



i-PERC

電気通信大学

基礎電子工学CH-5

曾我部 東馬

電気通信大学

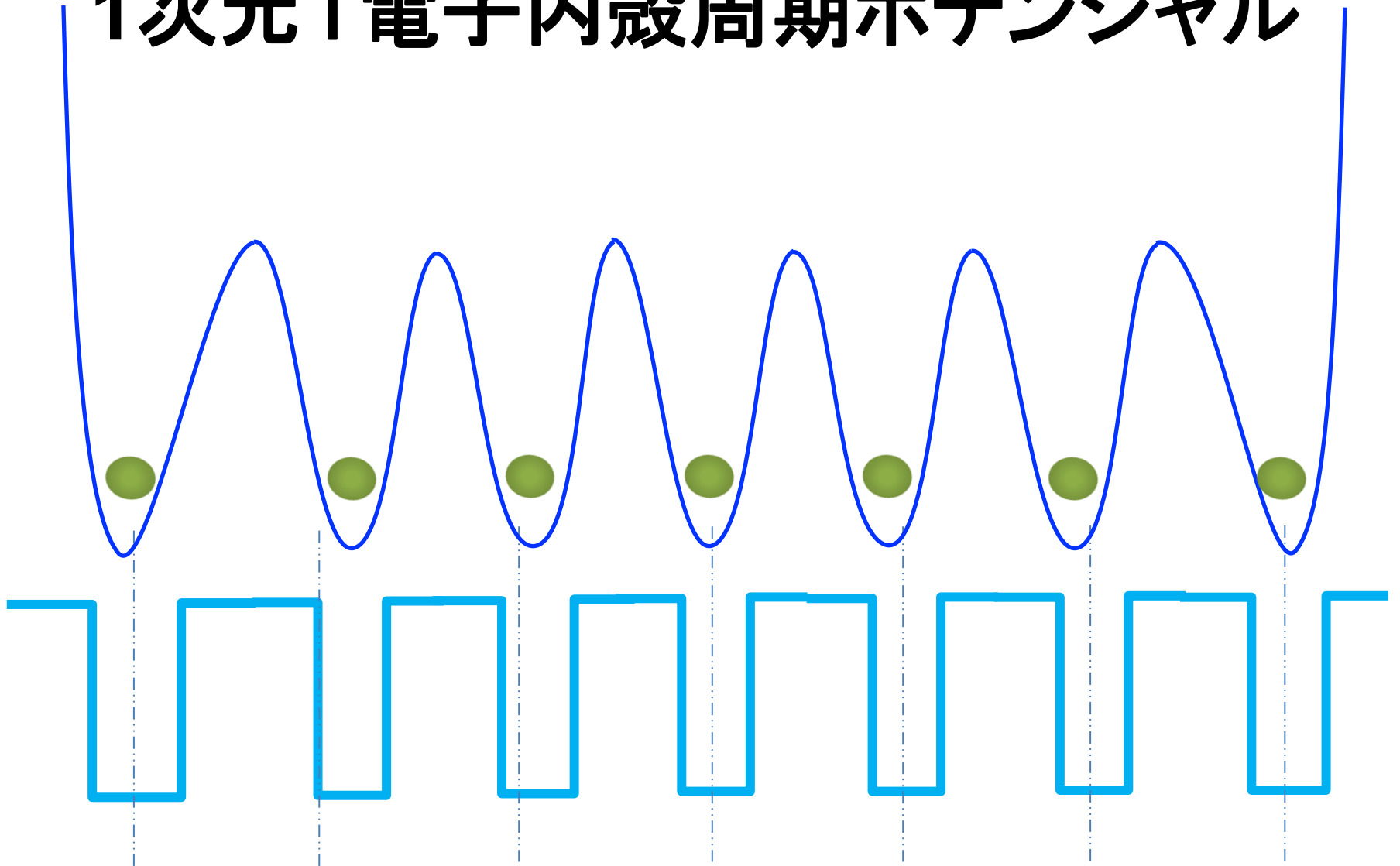
i-パワードエネルギーシステム研究センター(i-PERC)

概要:

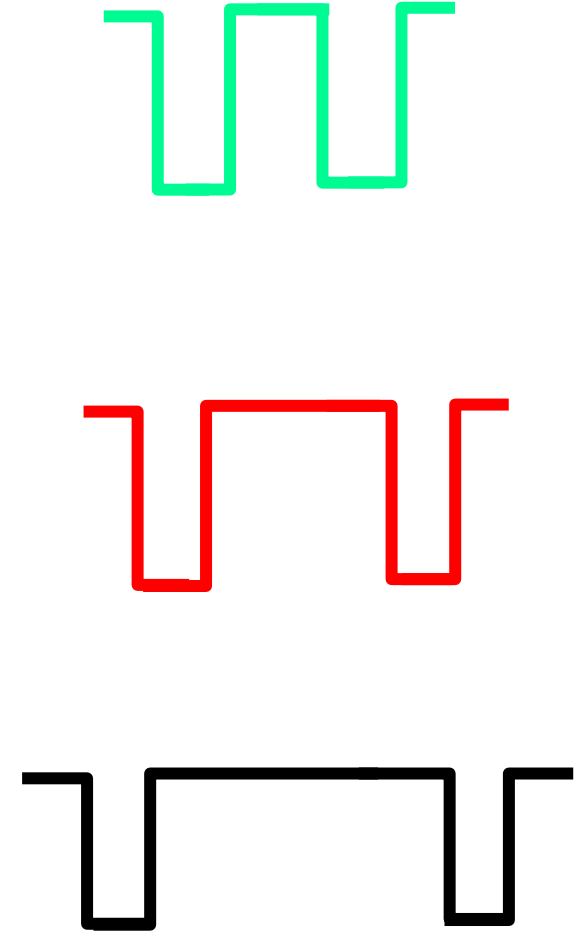
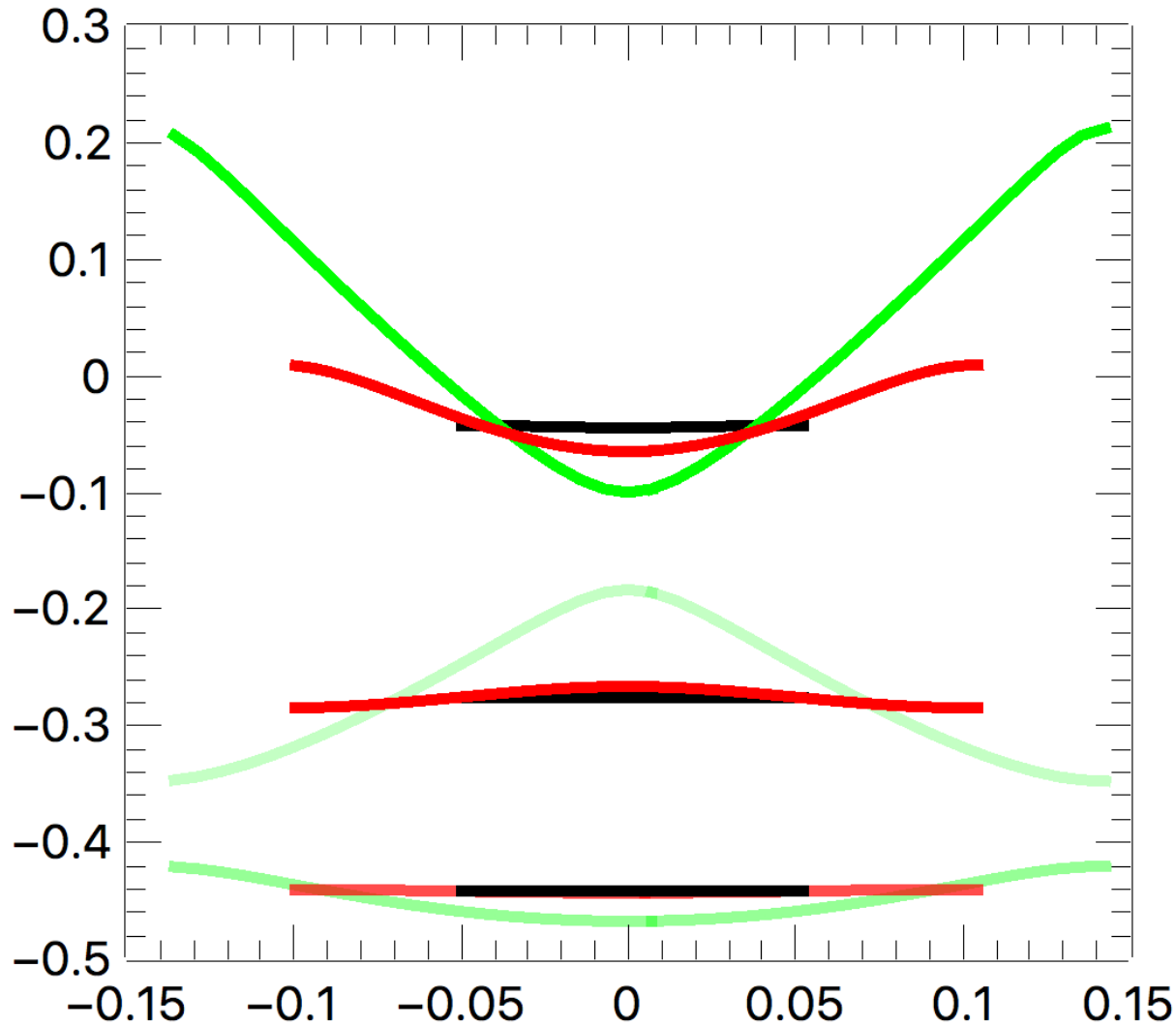
- 復習
- Siのバンド構造とバンドギャップ
- Siのバンド構造と伝導性の関係
- キャリア：電子とホール（正孔）
- Siに違う元素をドーピングする
- N型半導体、P型半導体

最も簡単なバンド計算:

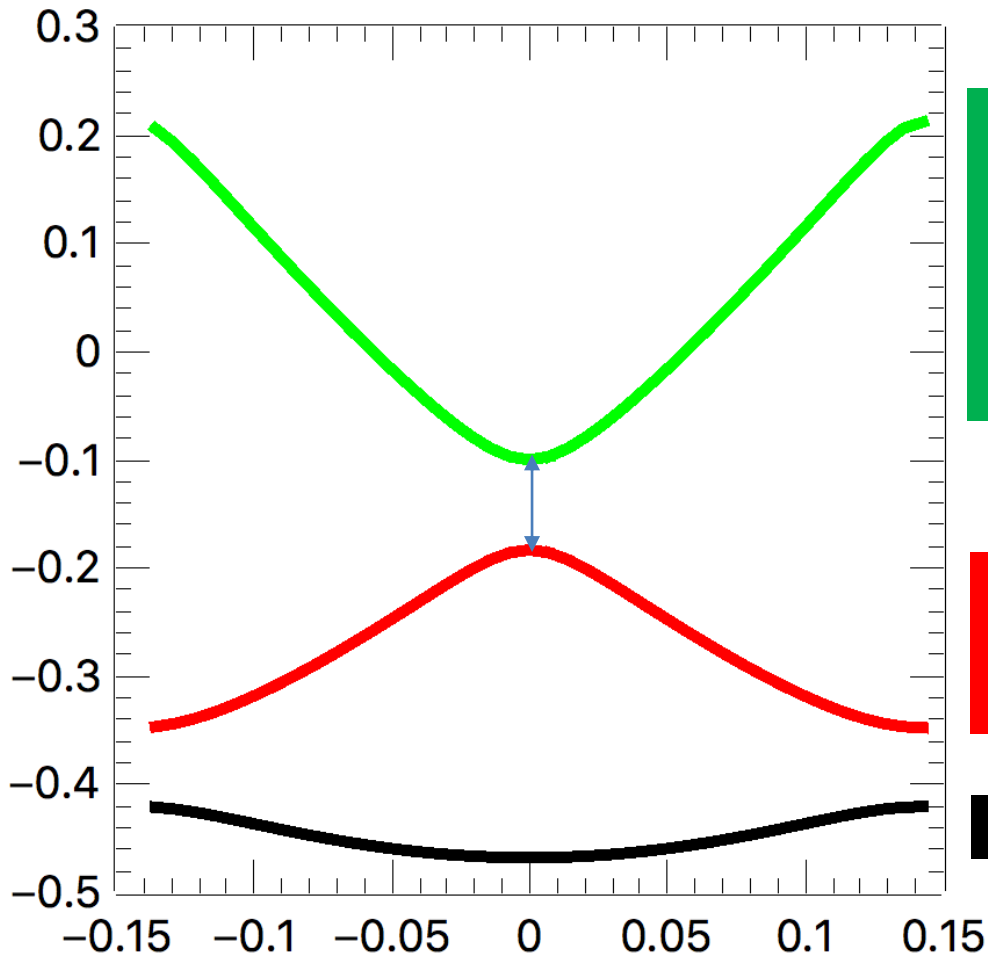
1次元1電子内殻周期ポテンシャル



バンド幅と原子間距離の関係 :



有効質量 m^* が大きいとバンド幅は大きくなる



バンド3: 許容帯

バンドギャップ2: 禁止帯

バンド2: 許容帯

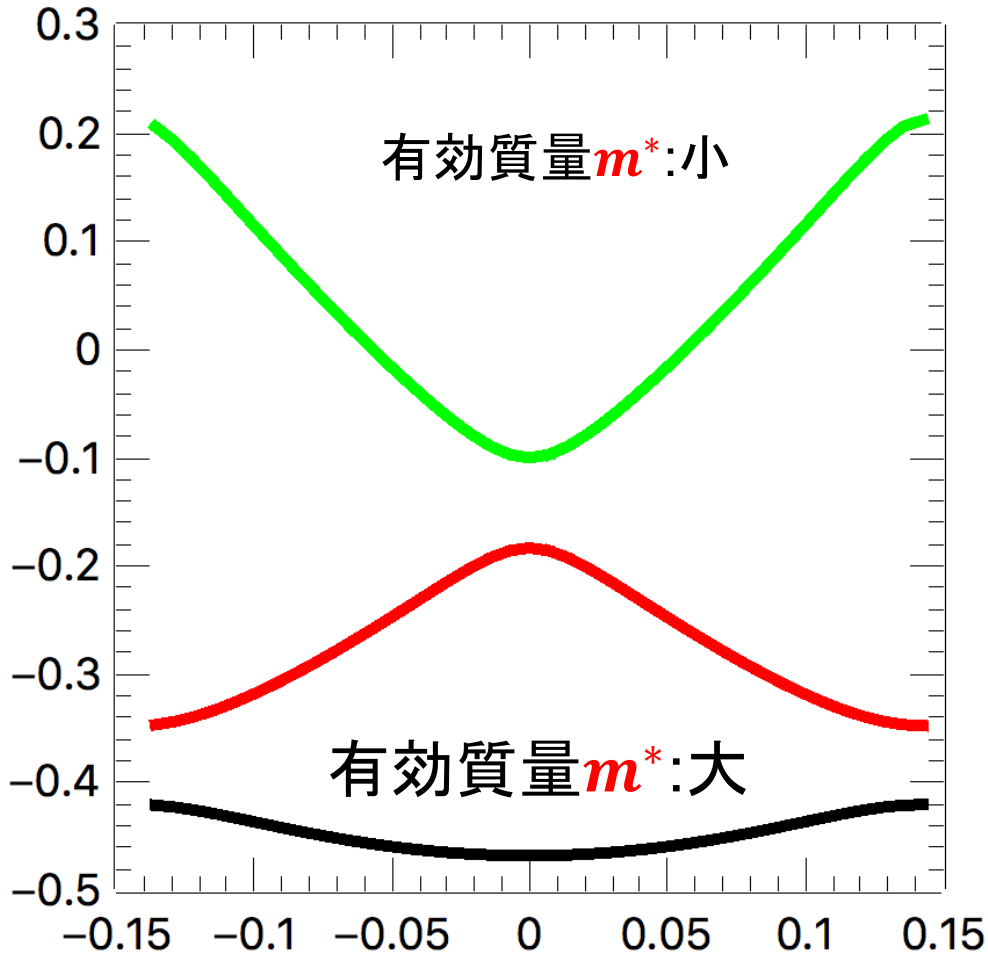
バンドギャップ1: 禁止帯

バンド1: 許容帯

有効質量 m^* が大きいとバンド幅が小さくなり、バンドは平らになる

有効質量とバンドの関係：

有効質量 m^* が小さくなればなるほど、自由電子に似ていく

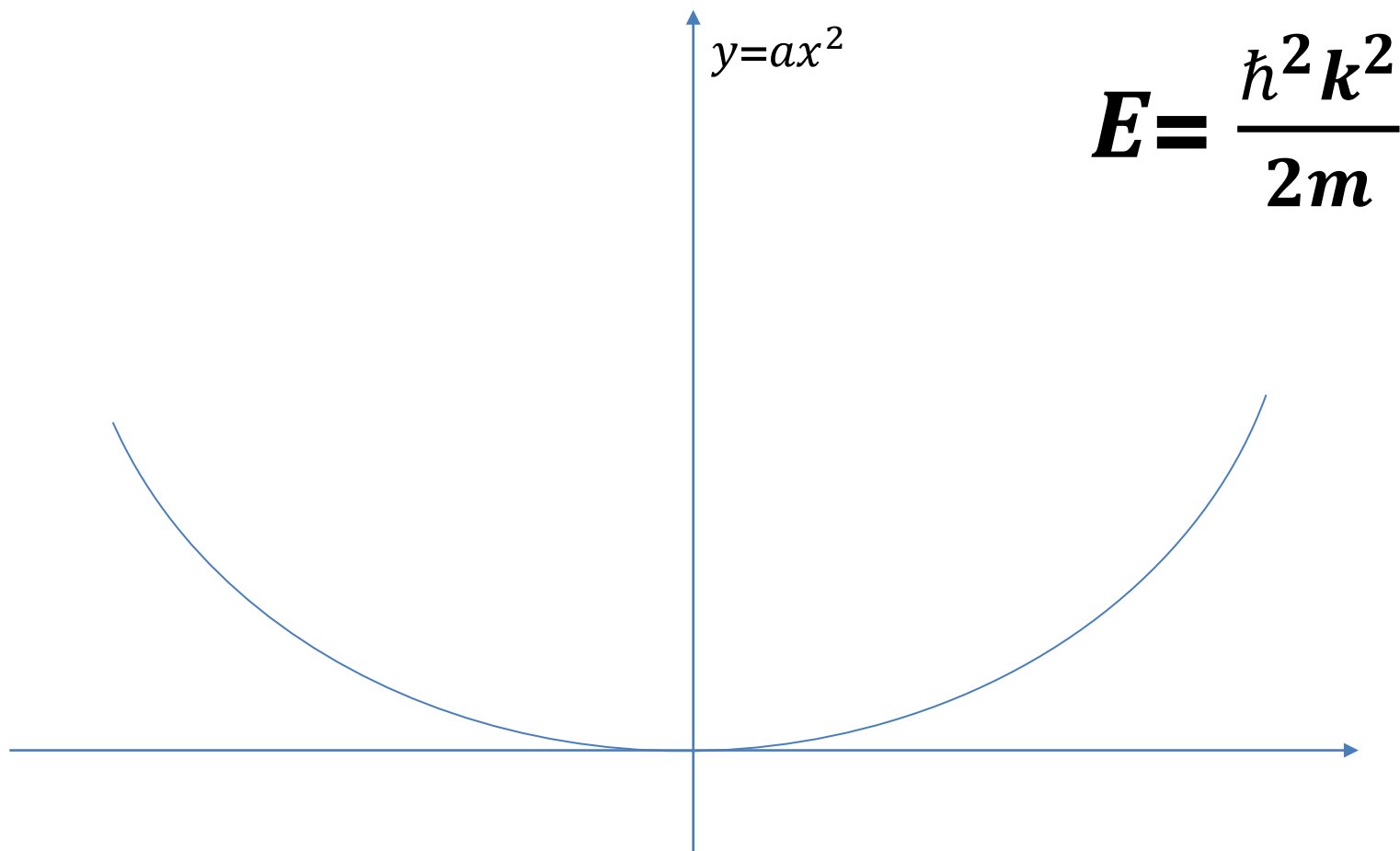


$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \gamma = \frac{\hbar^2}{m^*}$$

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}$$

ある質問に対する解答：

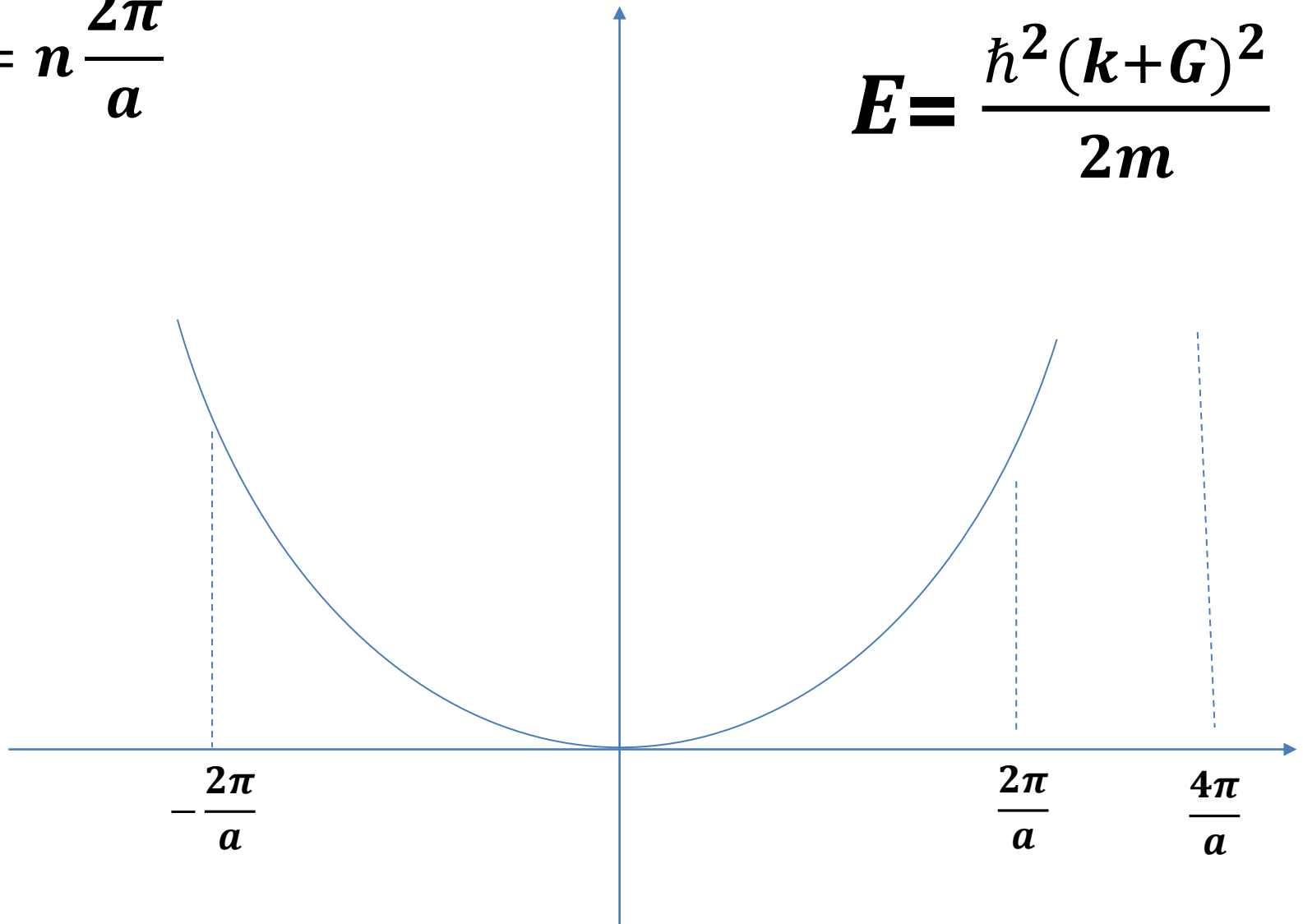


自由電子のエネルギー曲線

ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

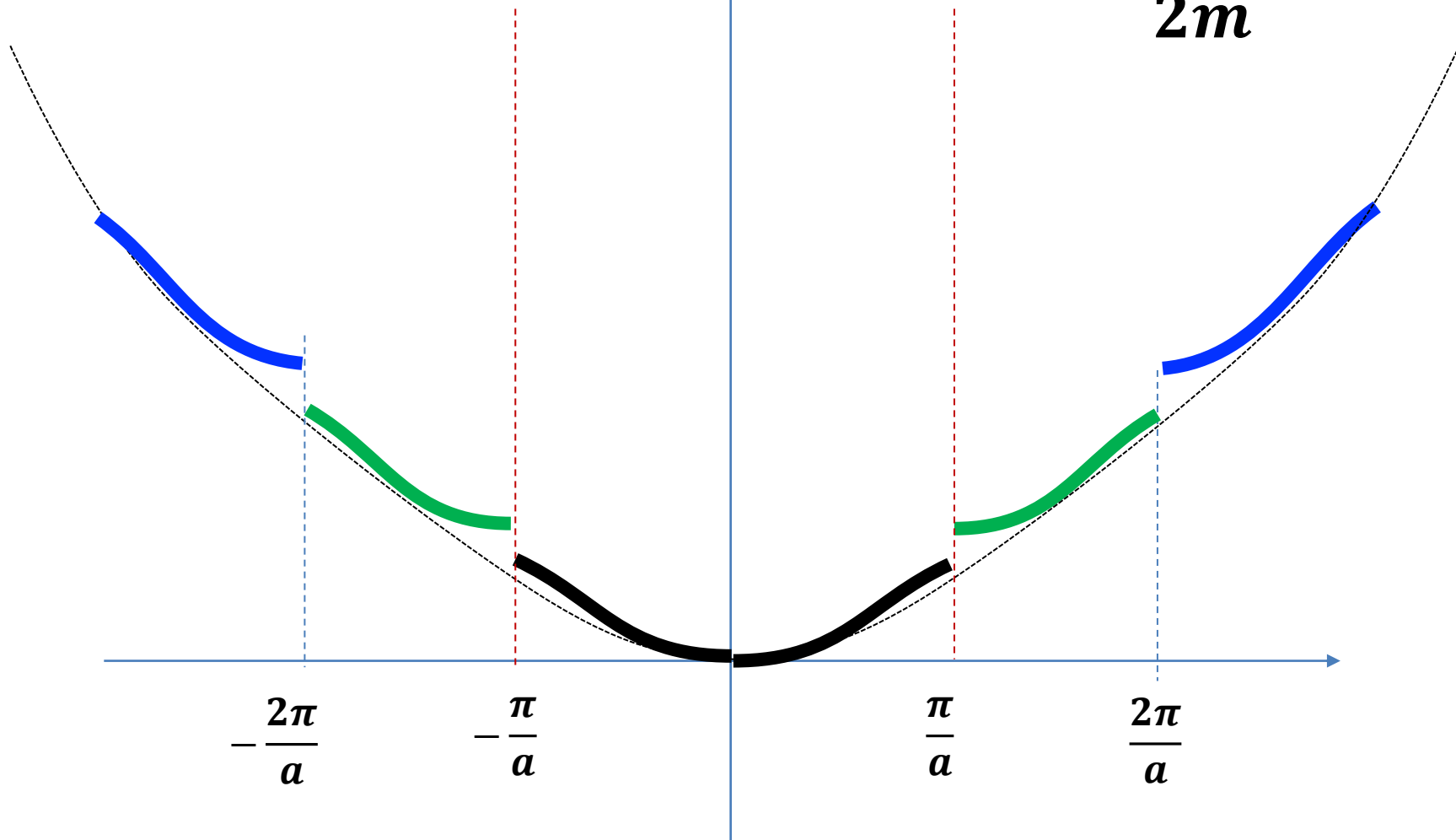
$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

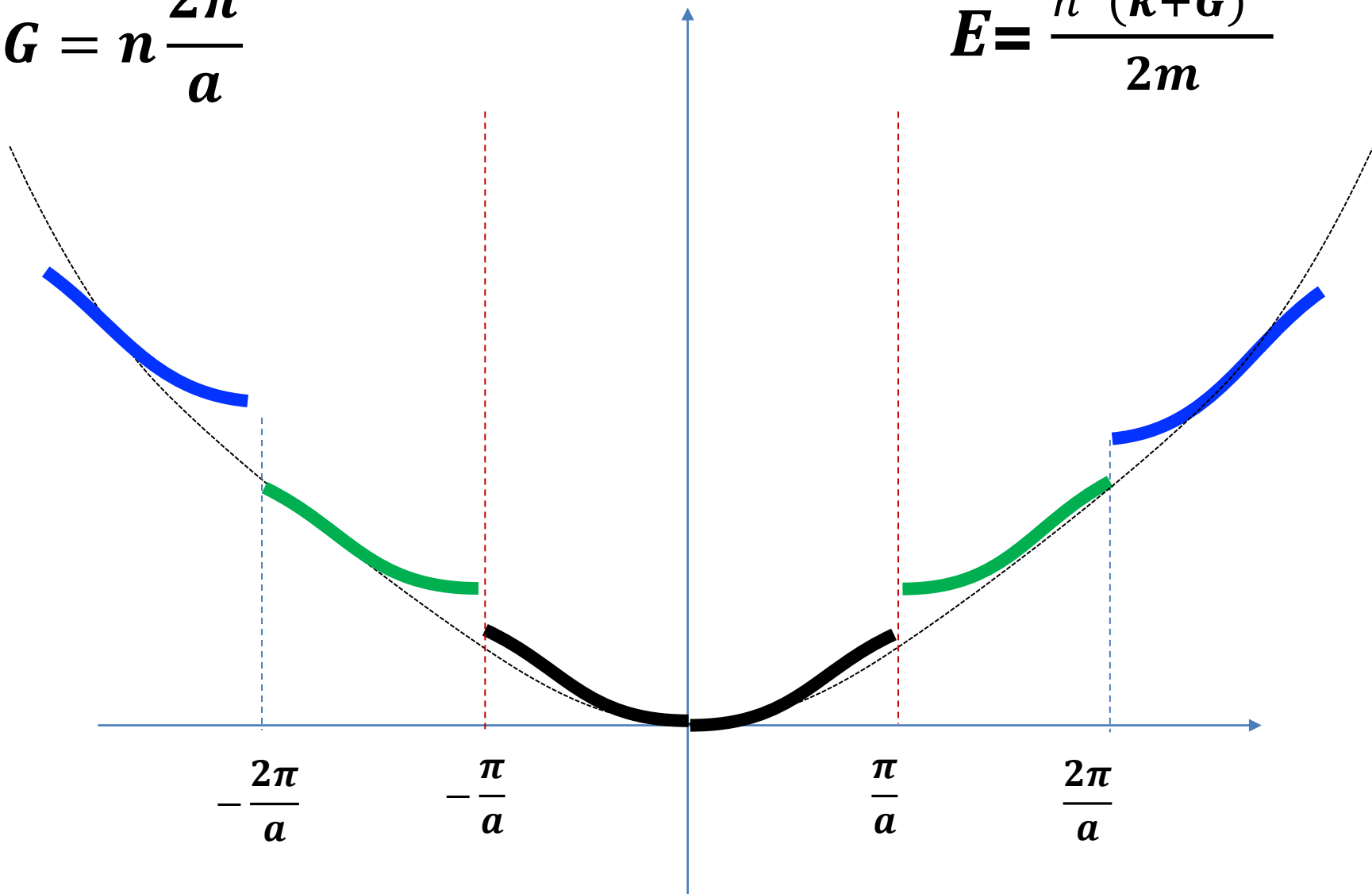
$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

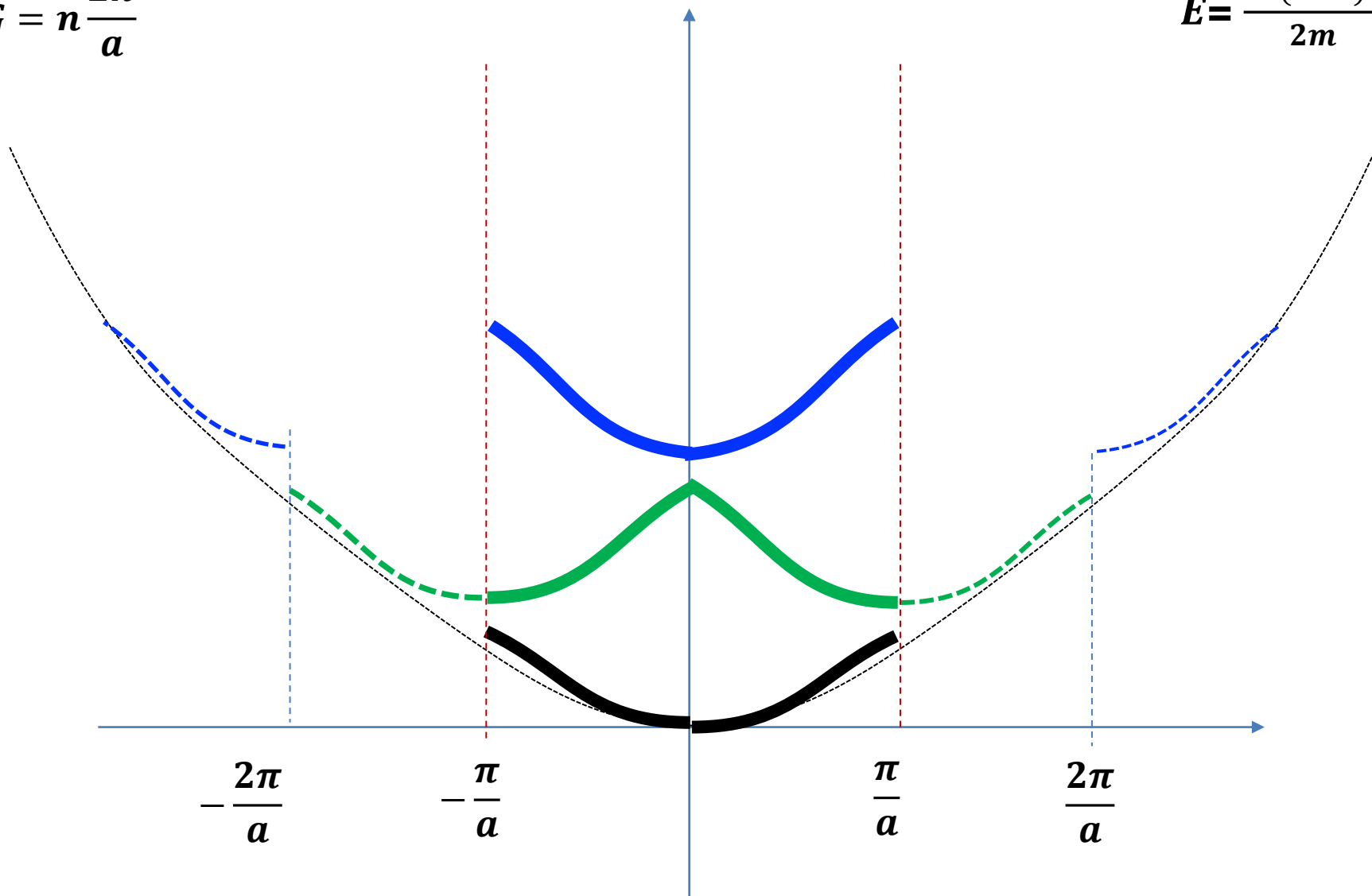
$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



ある質問に対する解答：

$$G = n \frac{2\pi}{a}$$

$$E = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$



固体におけるバンド構造:

$$H_{ij} = \delta_{ij} \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + \int V(x) e^{k_i - k_j} dx = E \delta_{ij}$$

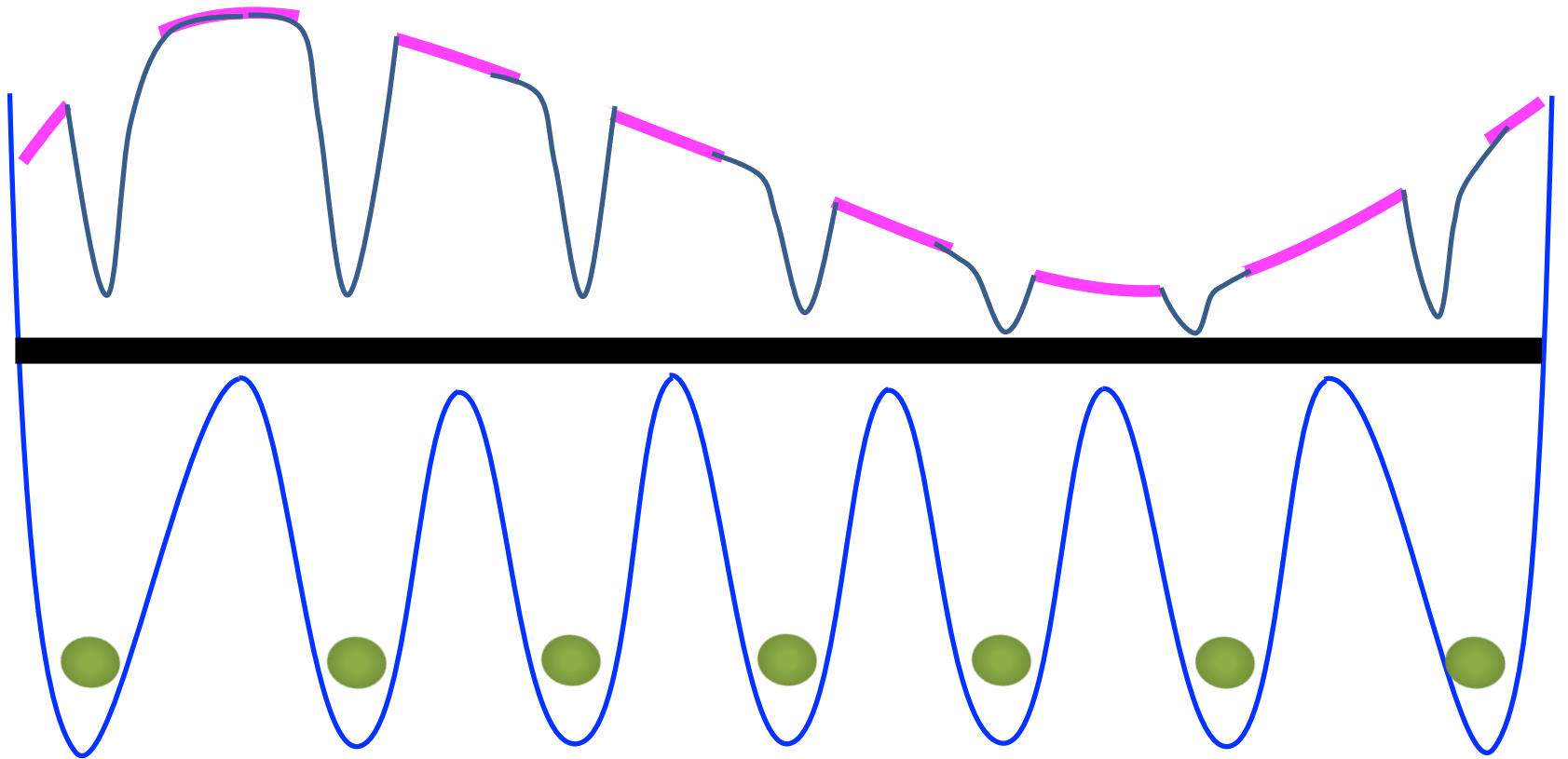
$$\int V(x) e^{k_i - k_j} dx = V_{Si}(G) \cos(G \cdot d)$$

$$G^2 = 3 \quad V_{Si}(G) = -0.21$$

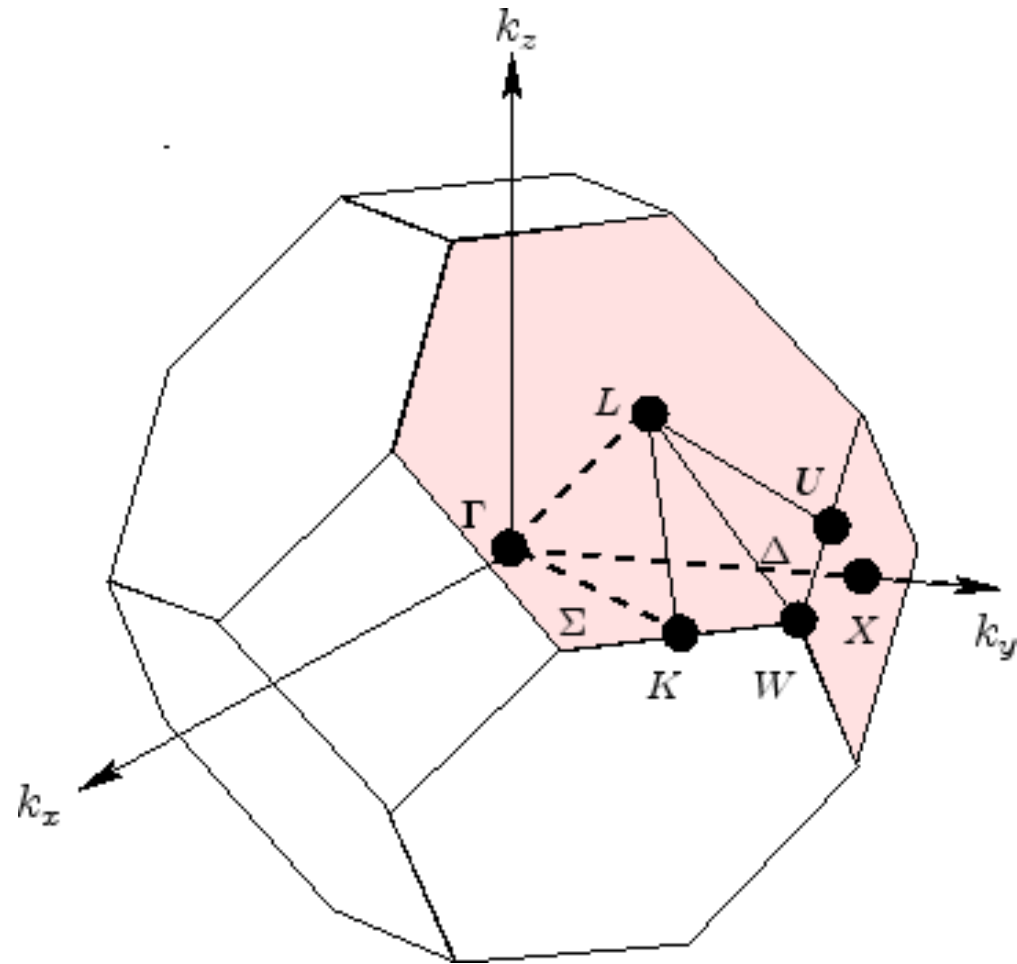
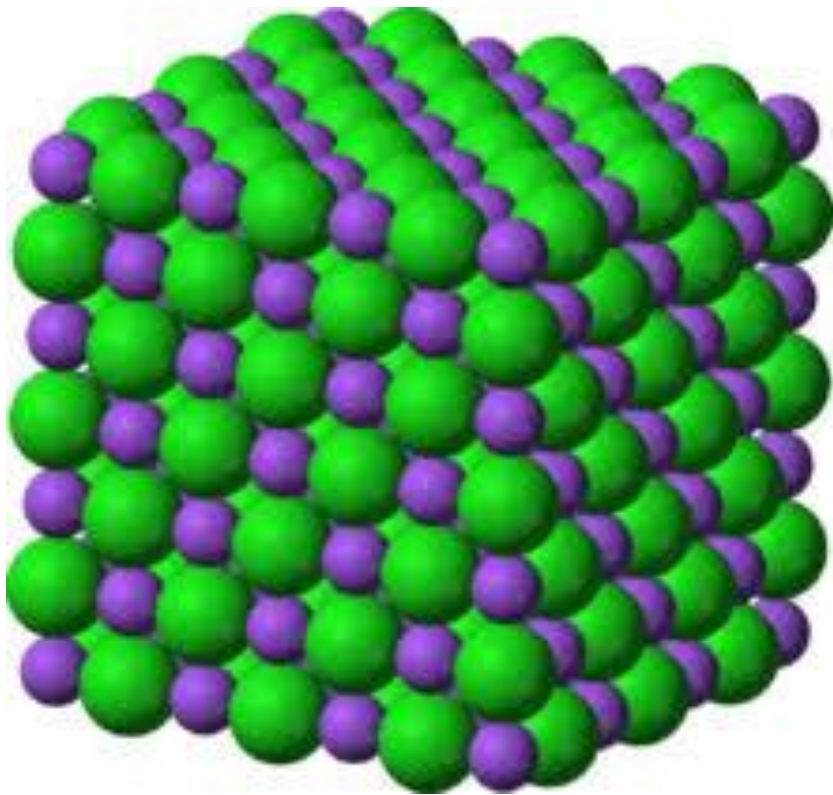
$$G^2 = 8 \quad V_{Si}(G) = 0.04$$

$$G^2 = 11 \quad V_{Si}(G) = 0.08$$

擬ポテンシャル法: (DFT常用手法)



結晶構造：結晶格子とその逆格子



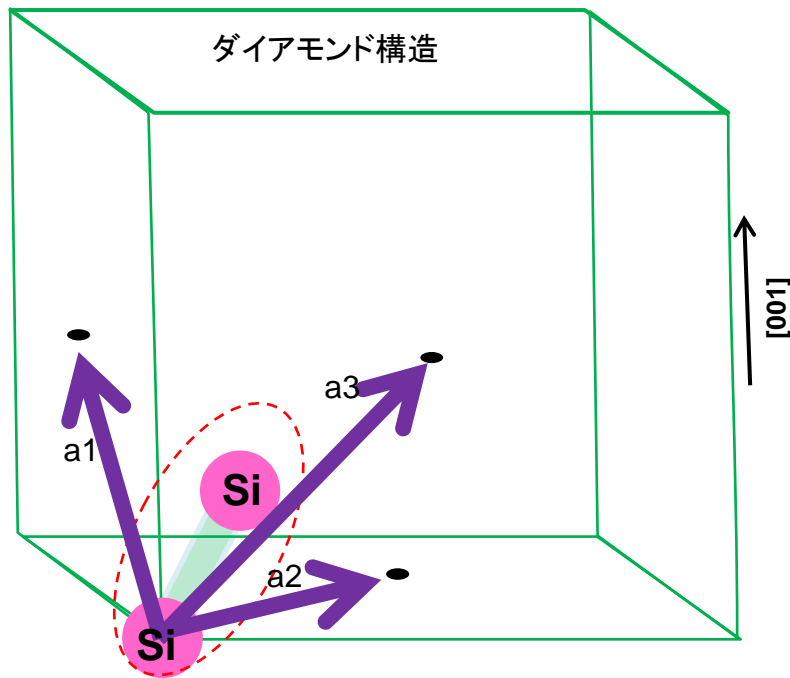
固体における周期構造の表現

結晶格子 + 基本単位格子

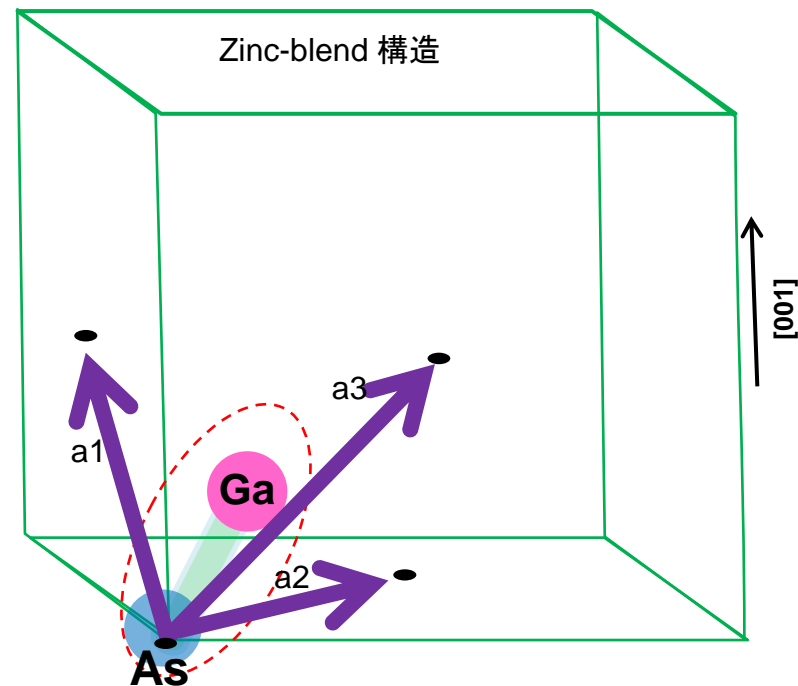
G : 面心立方逆格子

d : $(0, 0, 0)$, $(0.125, 0.125, 0.125)$

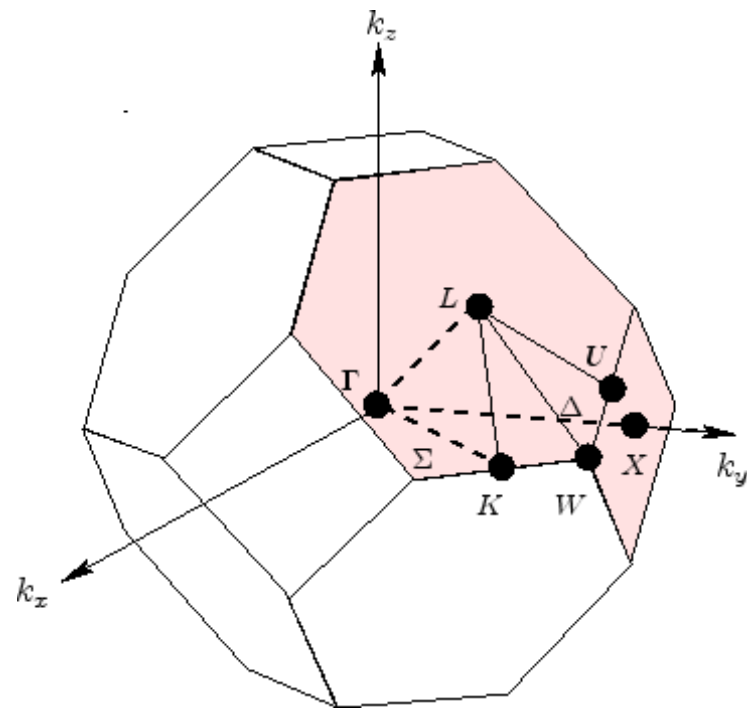
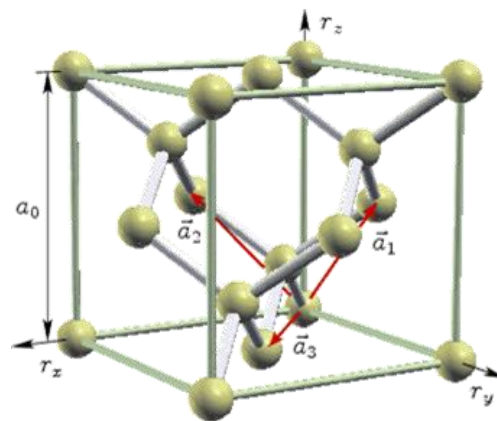
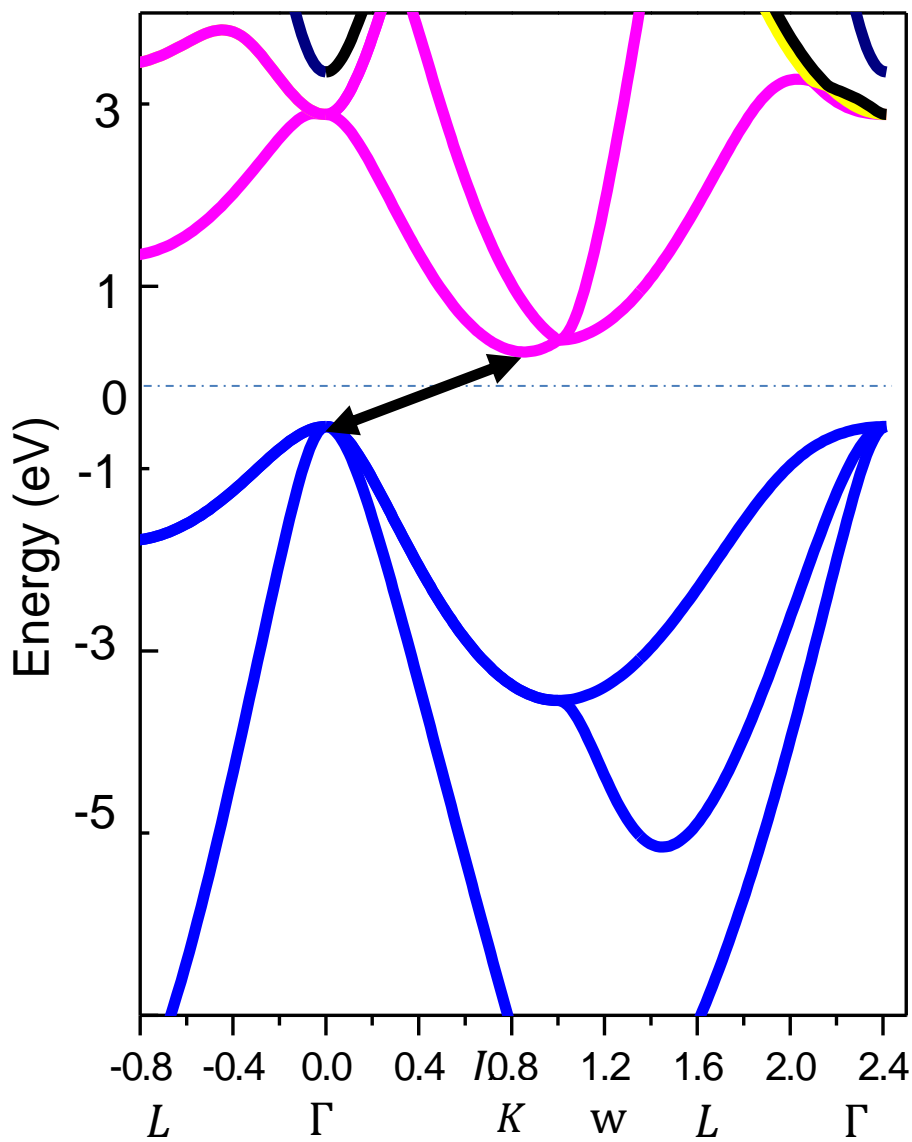
Si



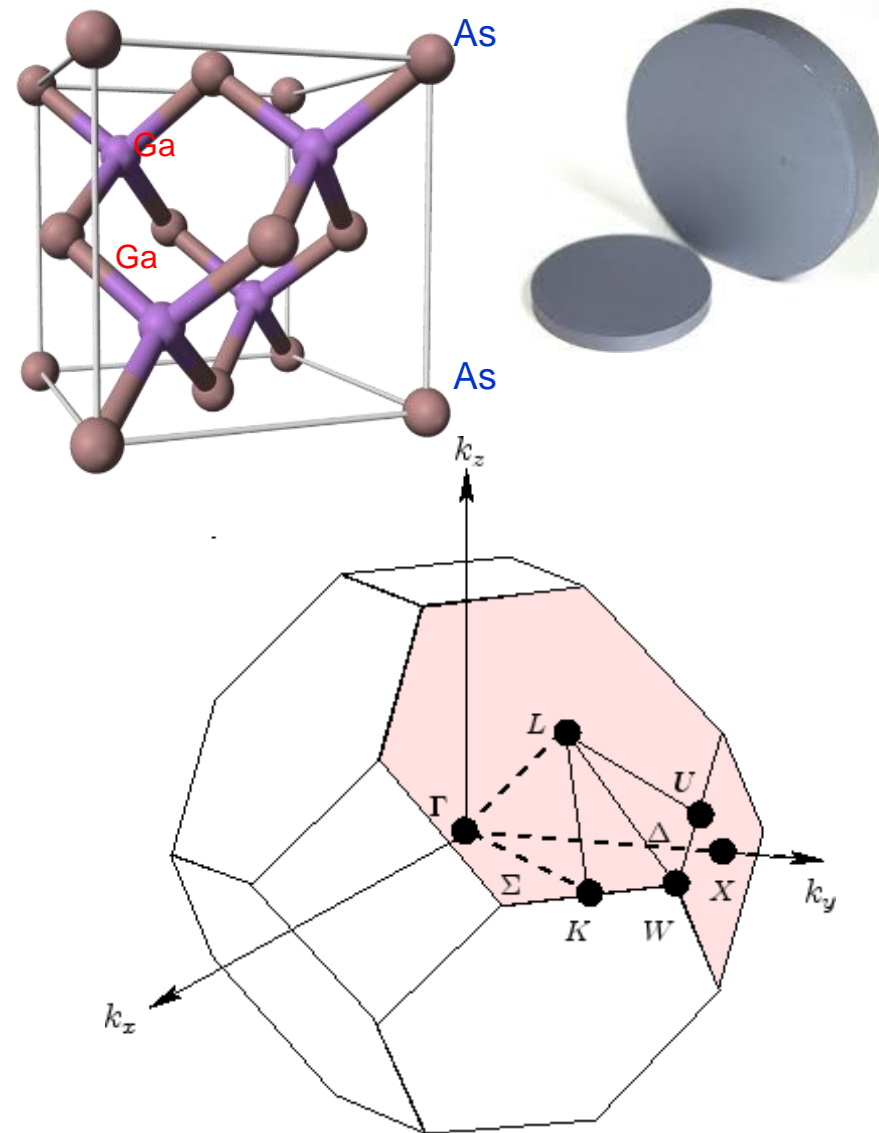
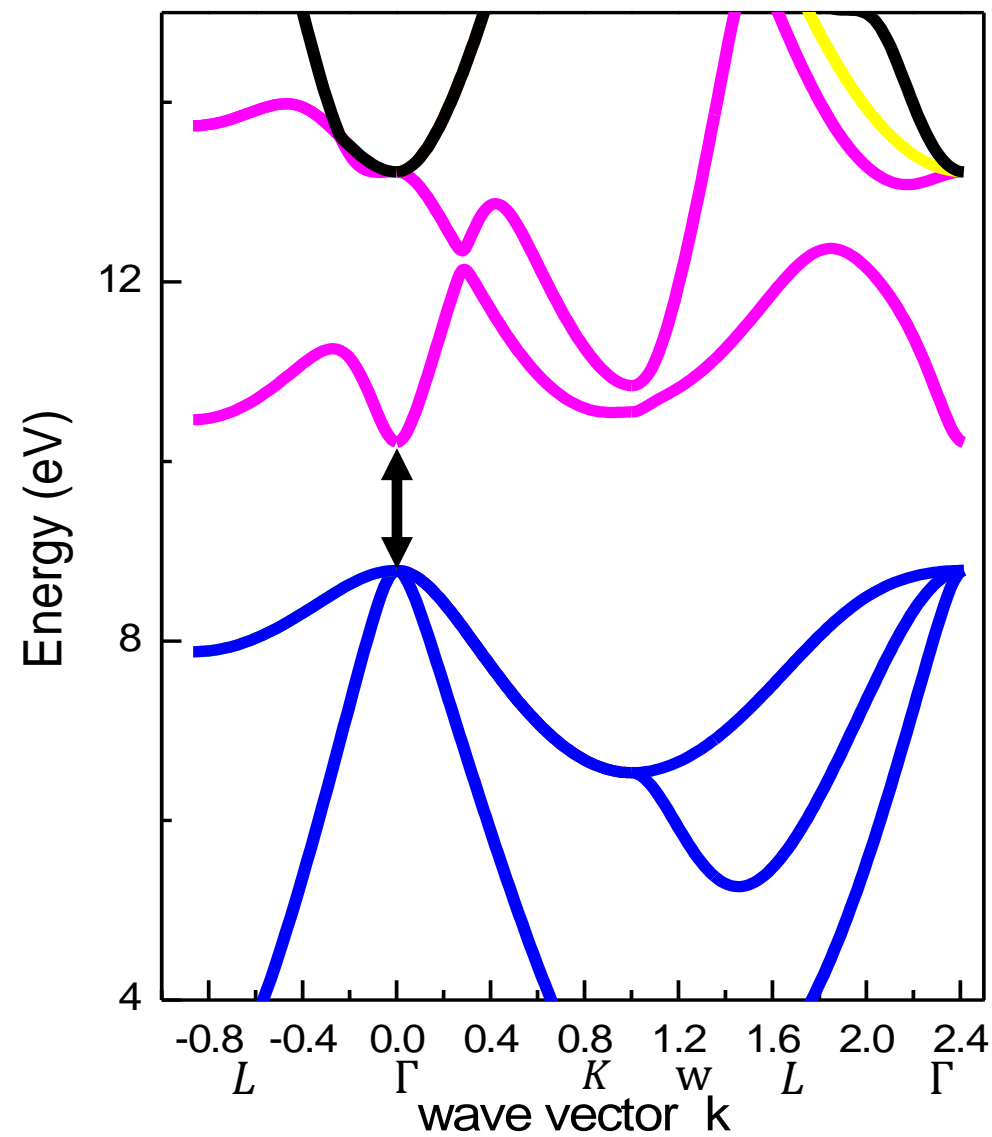
GaAs



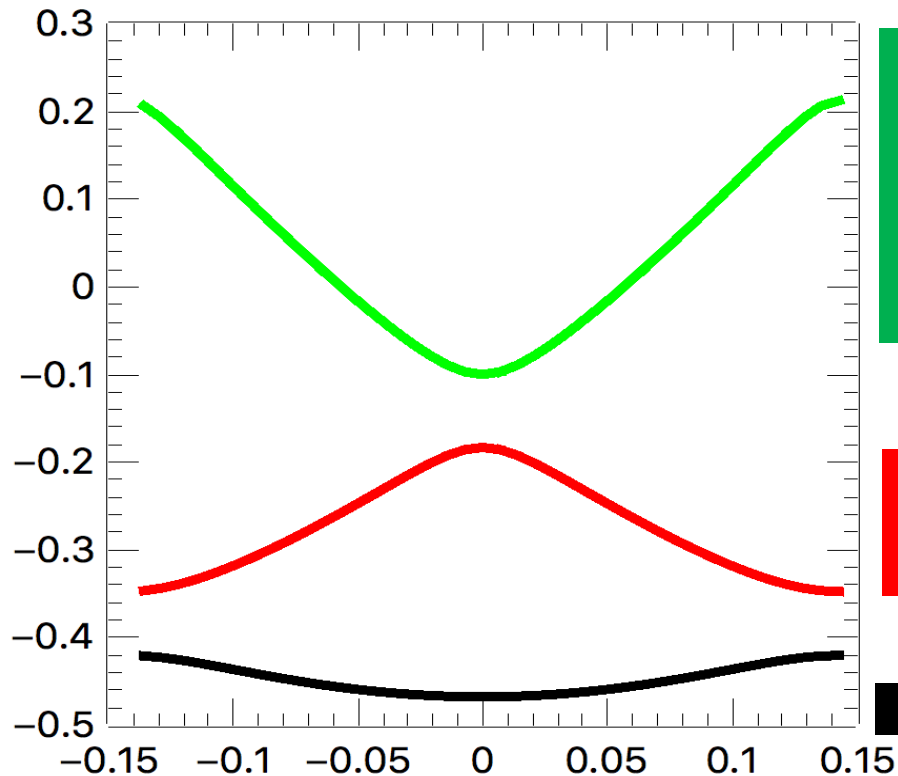
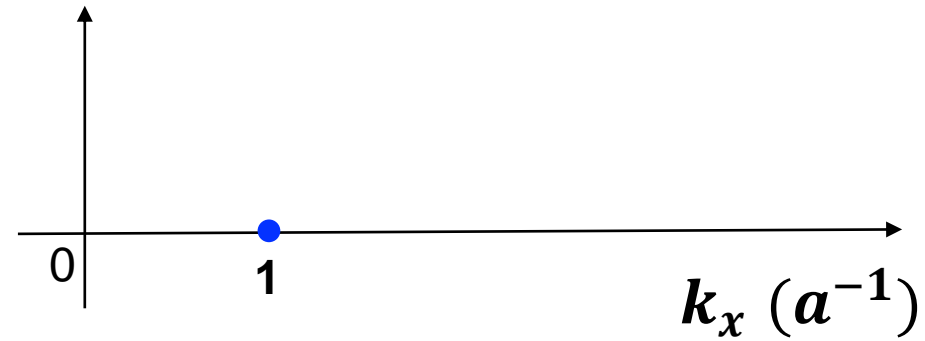
擬ポテンシャル法で計算したSiのバンド構造



擬ポテンシャル法で計算したGaAsのバンド構造



1次元周期構造によるバンドとバンドギャップ：



バンド3: 許容帯

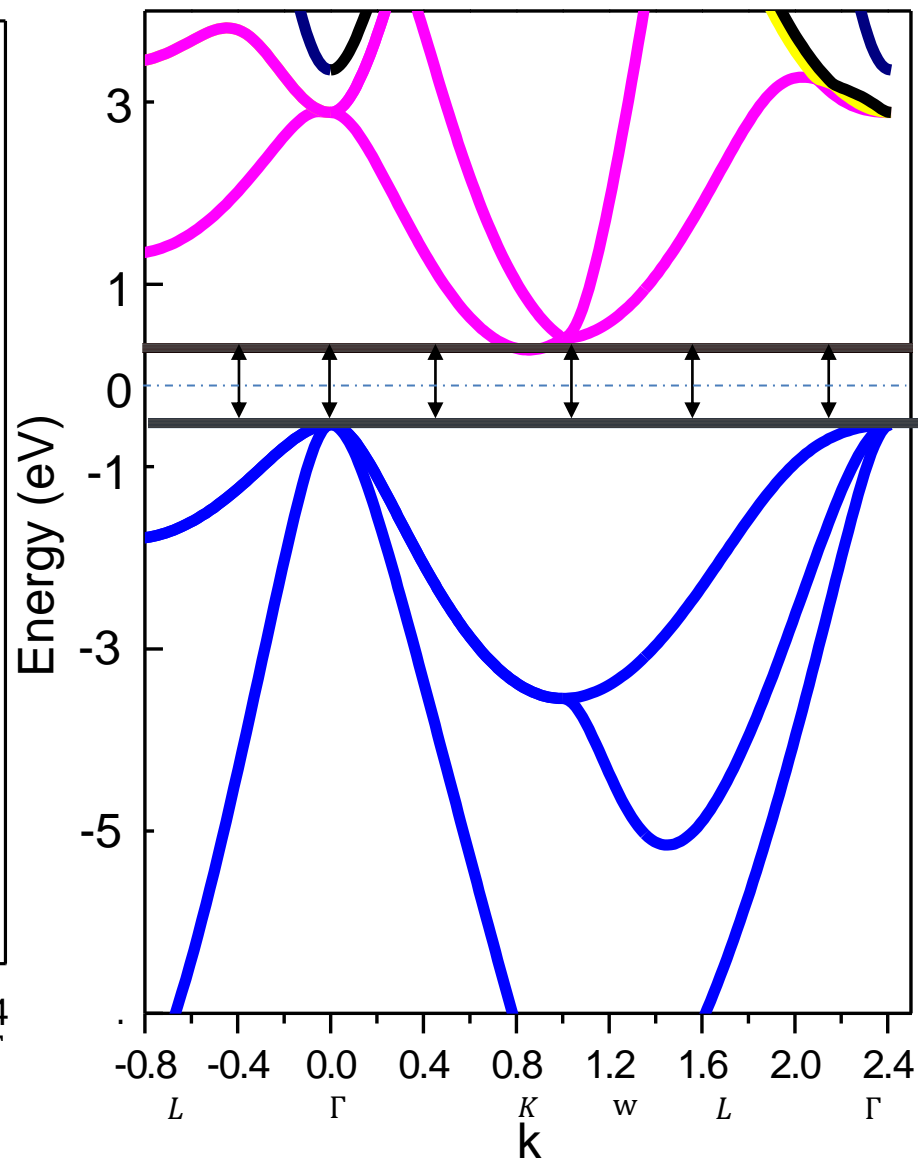
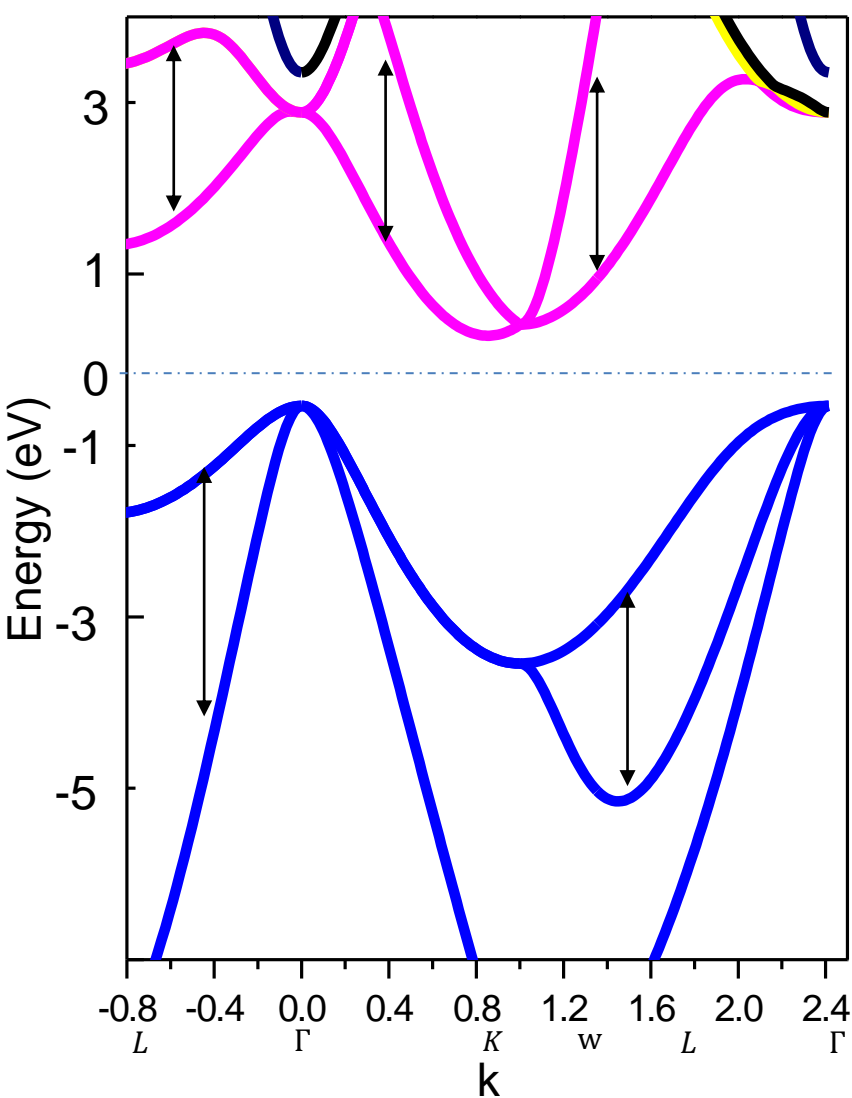
バンドギャップ2: 禁止帯

バンド2: 許容帯

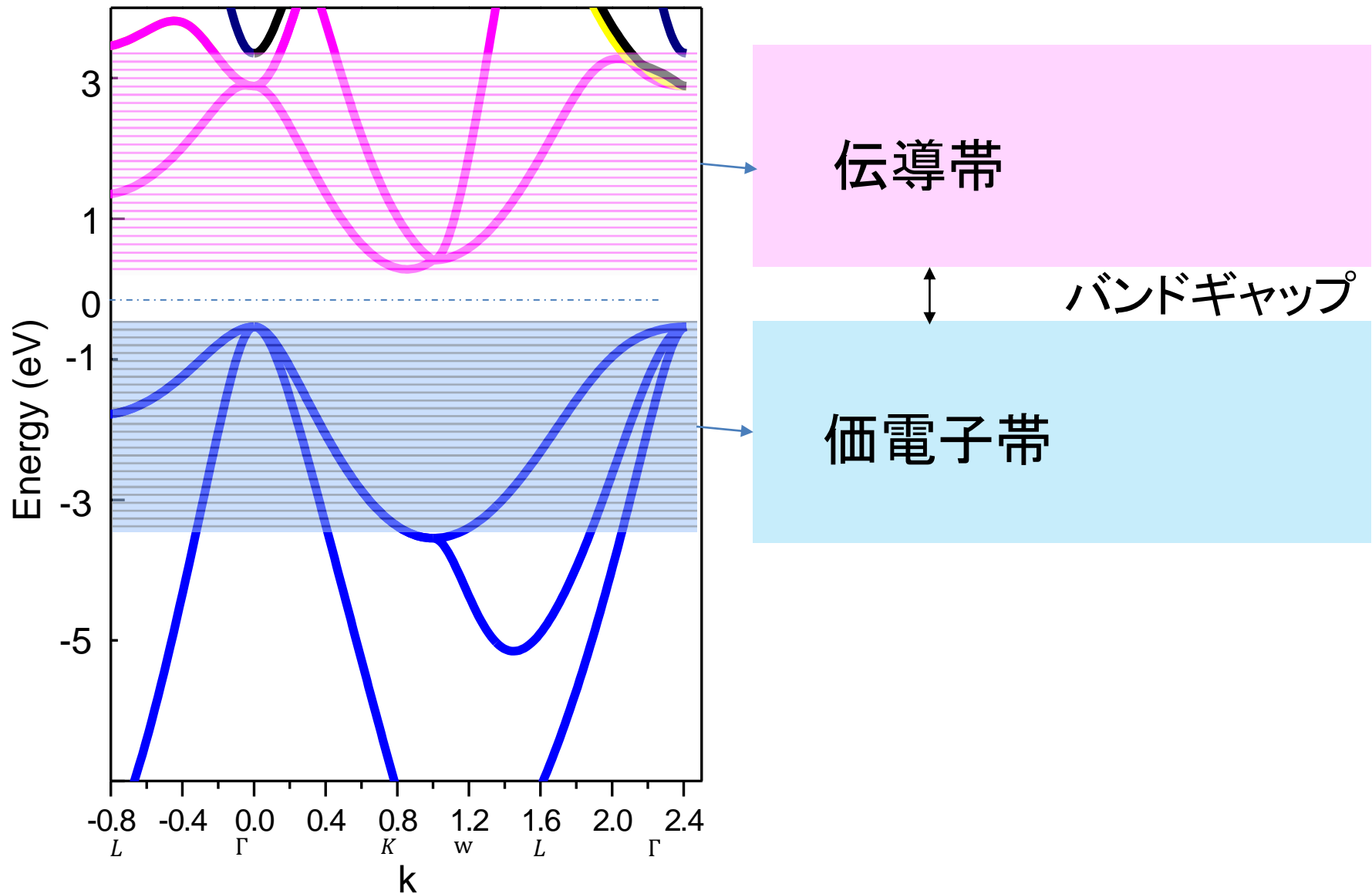
バンドギャップ1: 禁止帯

バンド1: 許容帯

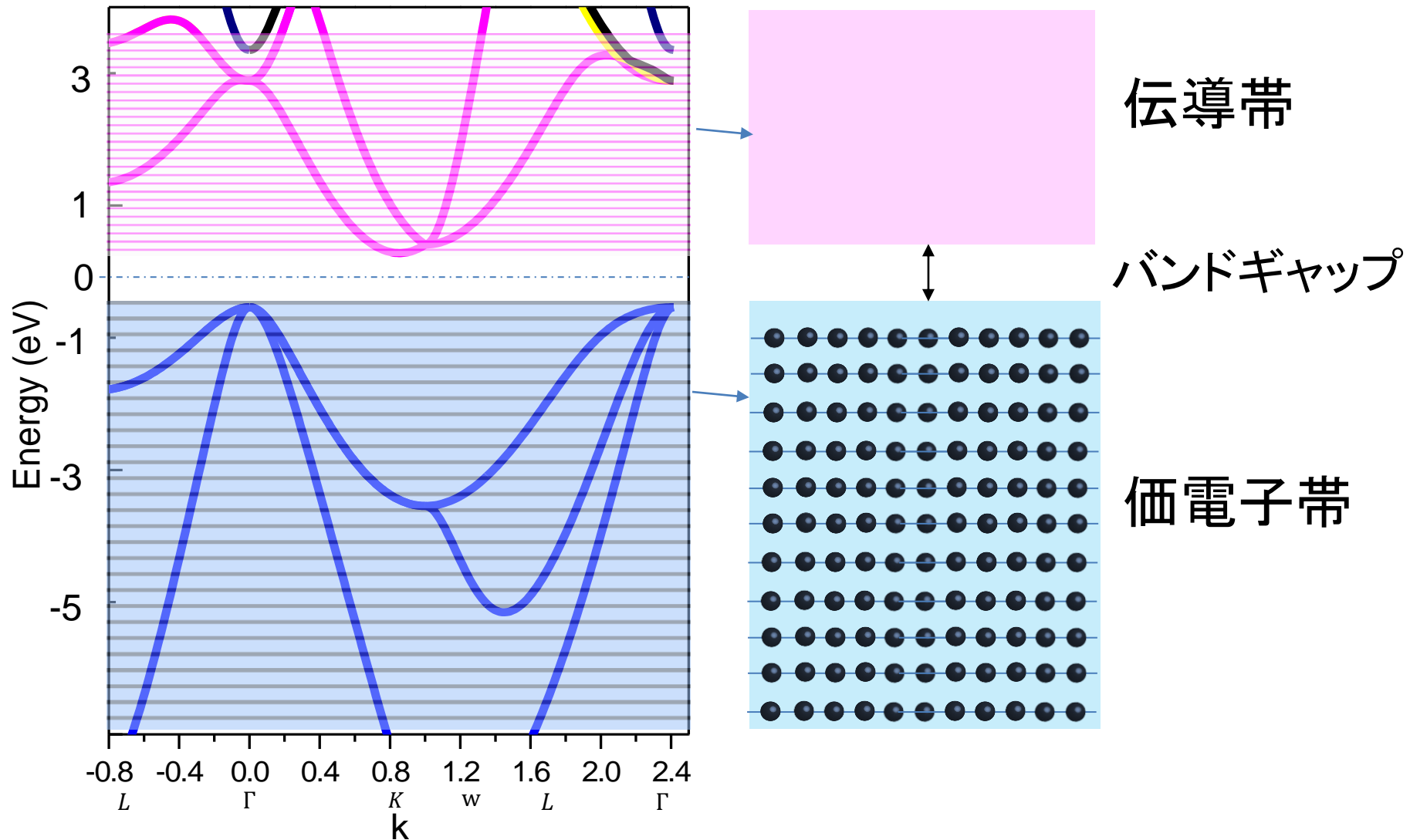
3次元固体におけるバンドとバンドギャップ：



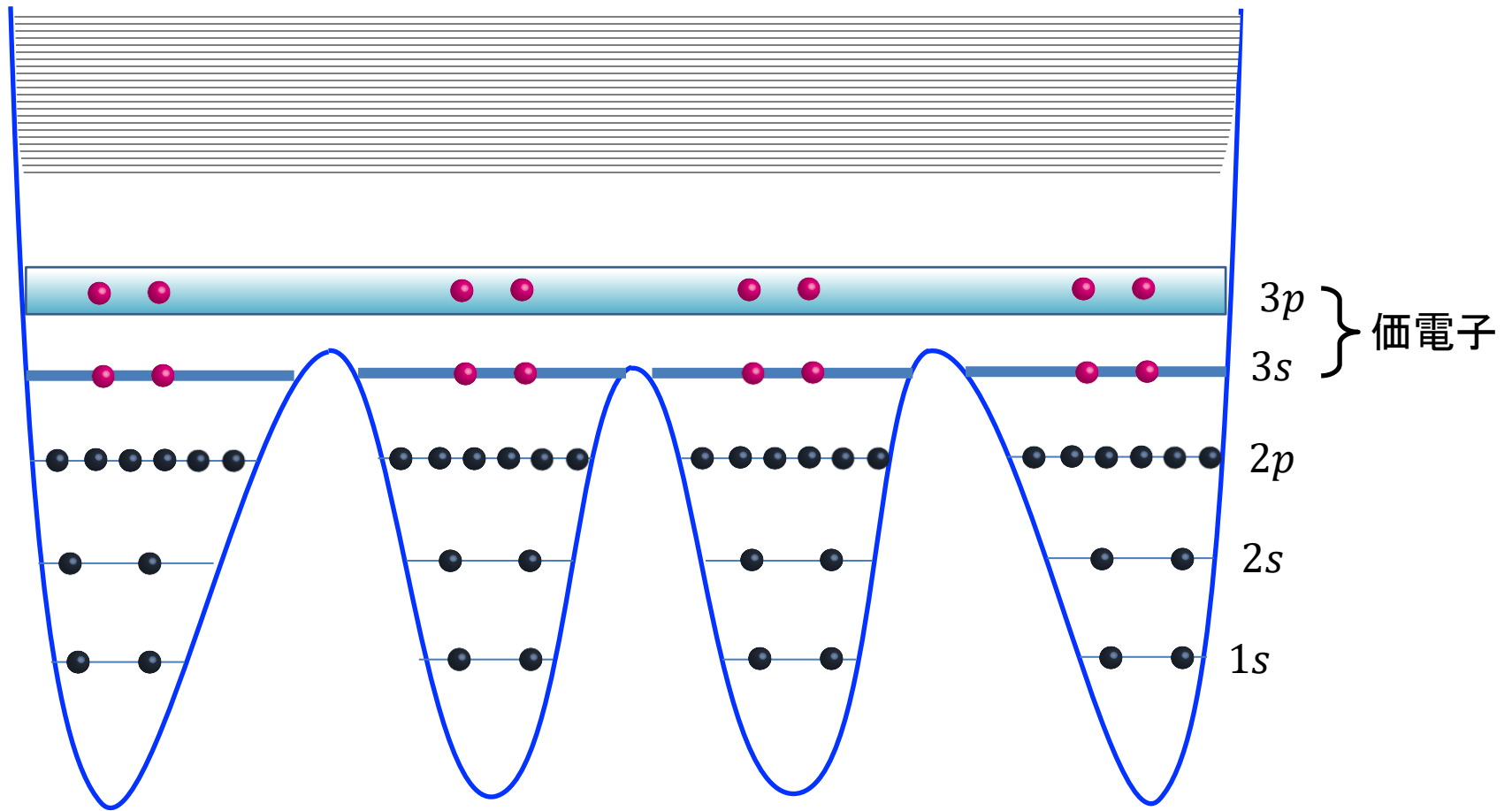
3次元固体における伝導帯と価電子帯：



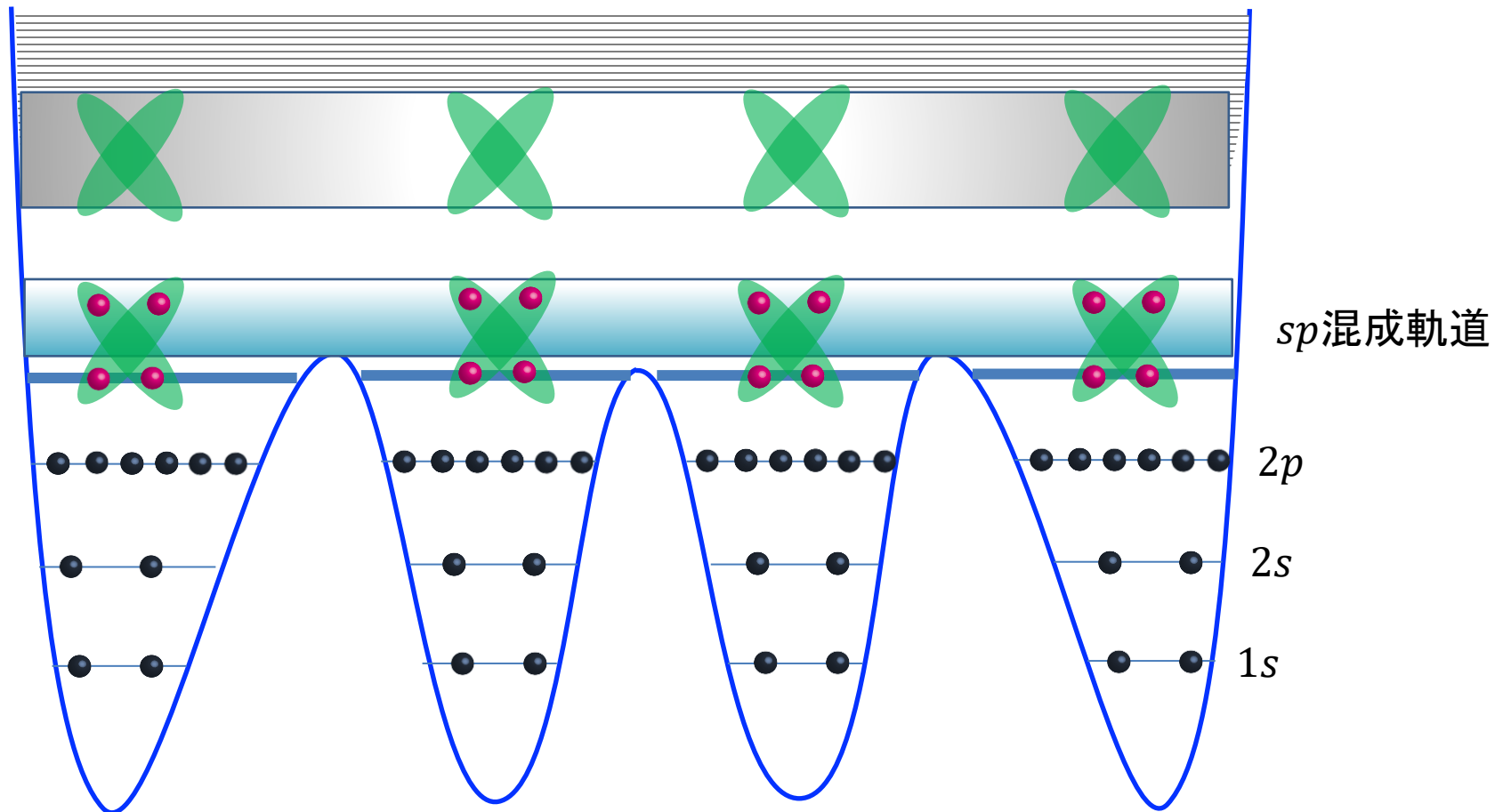
3次元固体における伝導帯と価電子帯：



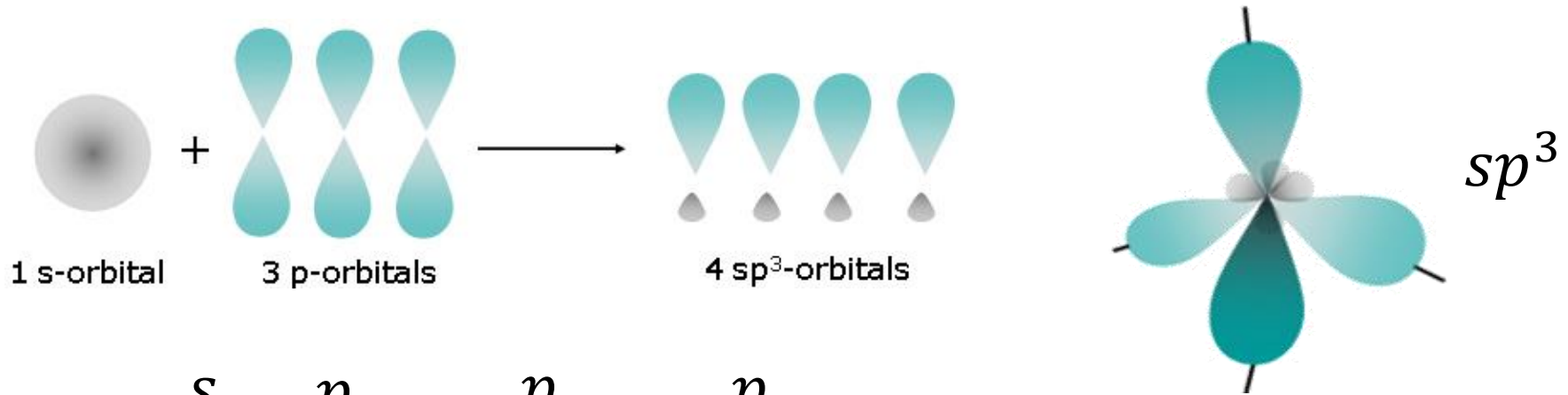
電子配置図：伝導帯：価電子帯 三者関係：



価電子による混成軌道の生成



価電子による混成軌道の生成

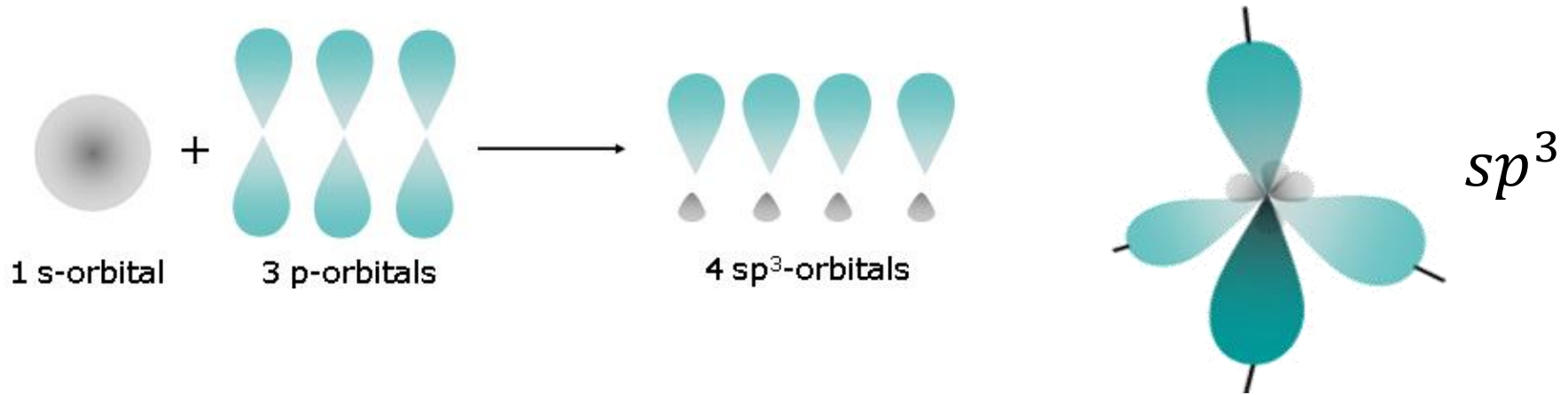


| | s | p_x | p_y | p_z |
|-------|-------|-------|-------|-------|
| s | a_1 | b | b | b |
| p_x | b | a_2 | 0 | 0 |
| p_y | b | 0 | a_3 | 0 |
| p_z | b | 0 | 0 | a_4 |

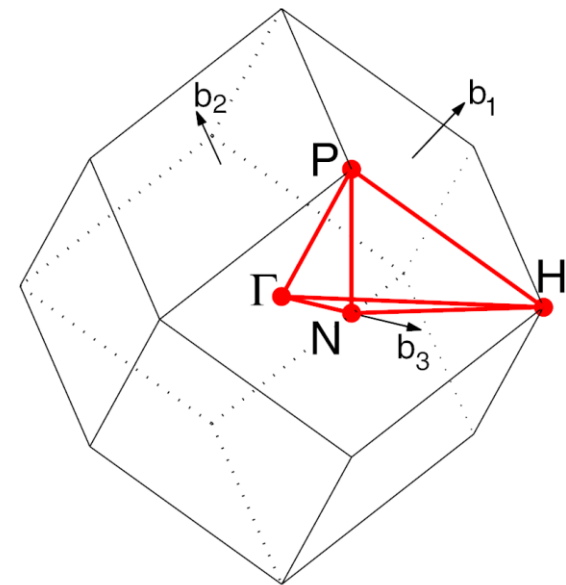
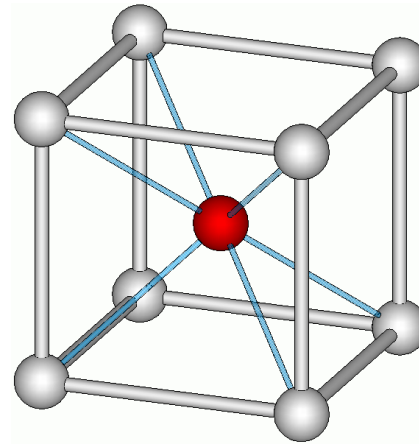
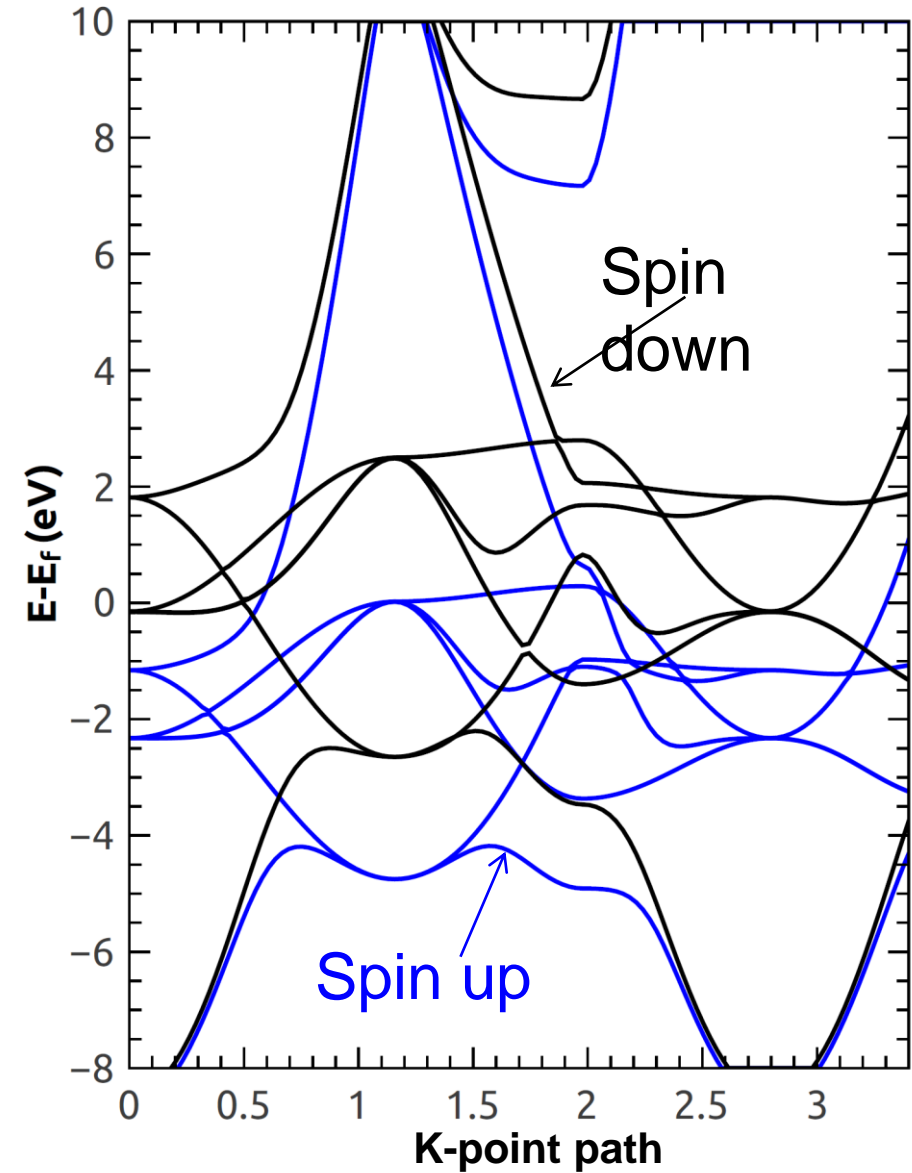
対角化

| | | | |
|-------|-------|-------|-------|
| A_1 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | A_2 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | A_3 | 0 |
| 0 | 0 | 0 | A_4 |

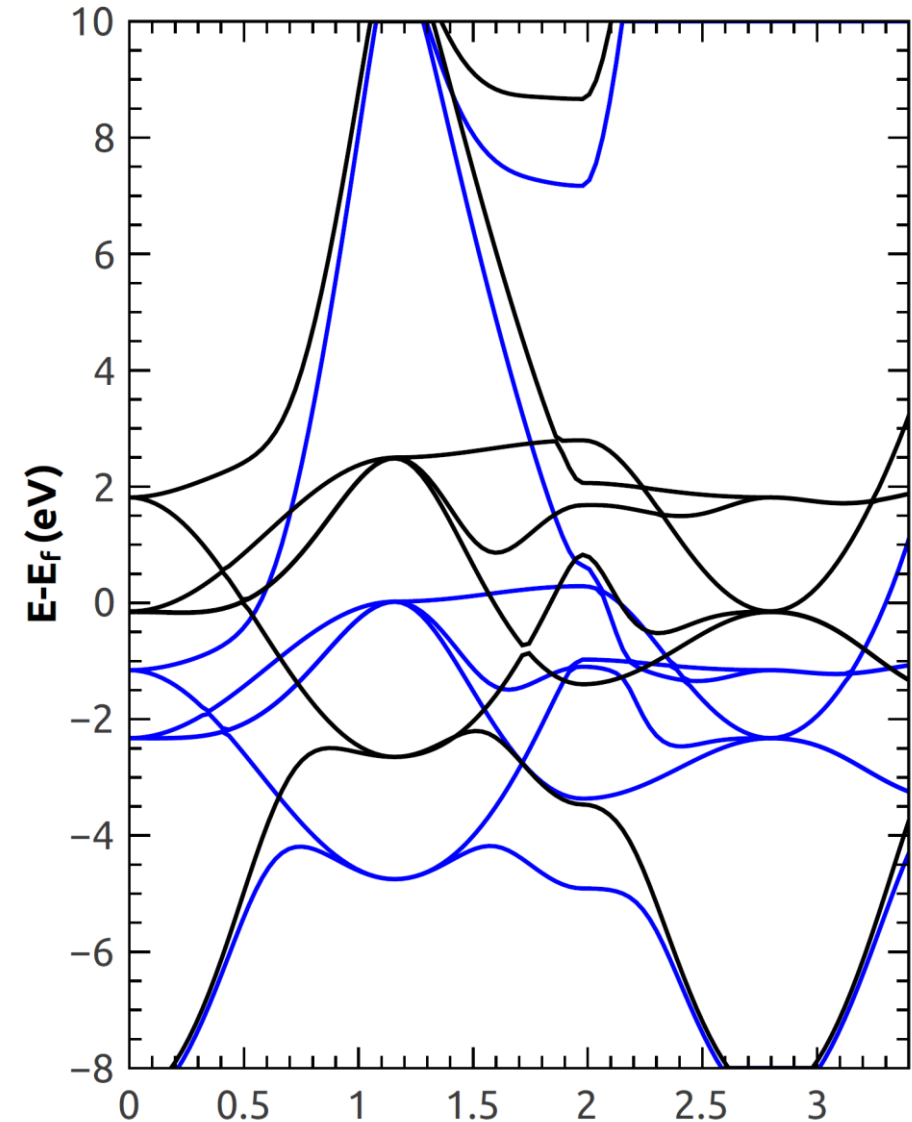
価電子による混成軌道の生成



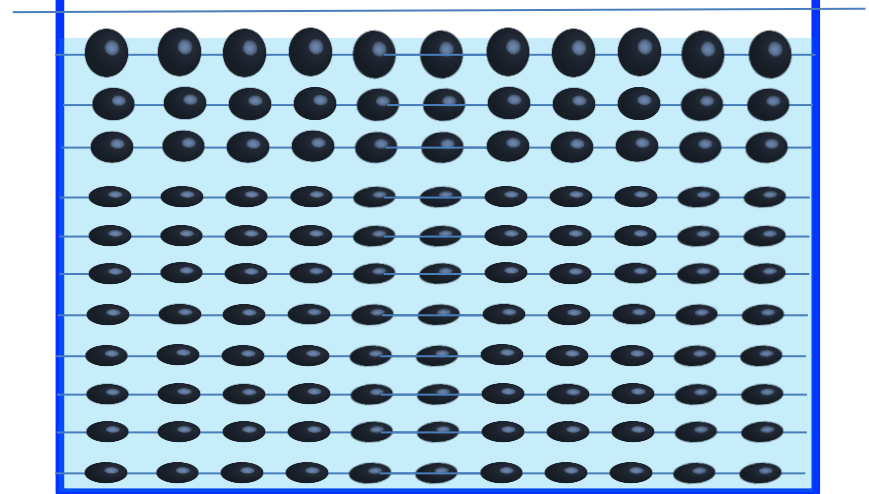
金属の場合



金属の場合は:伝導帯のみ

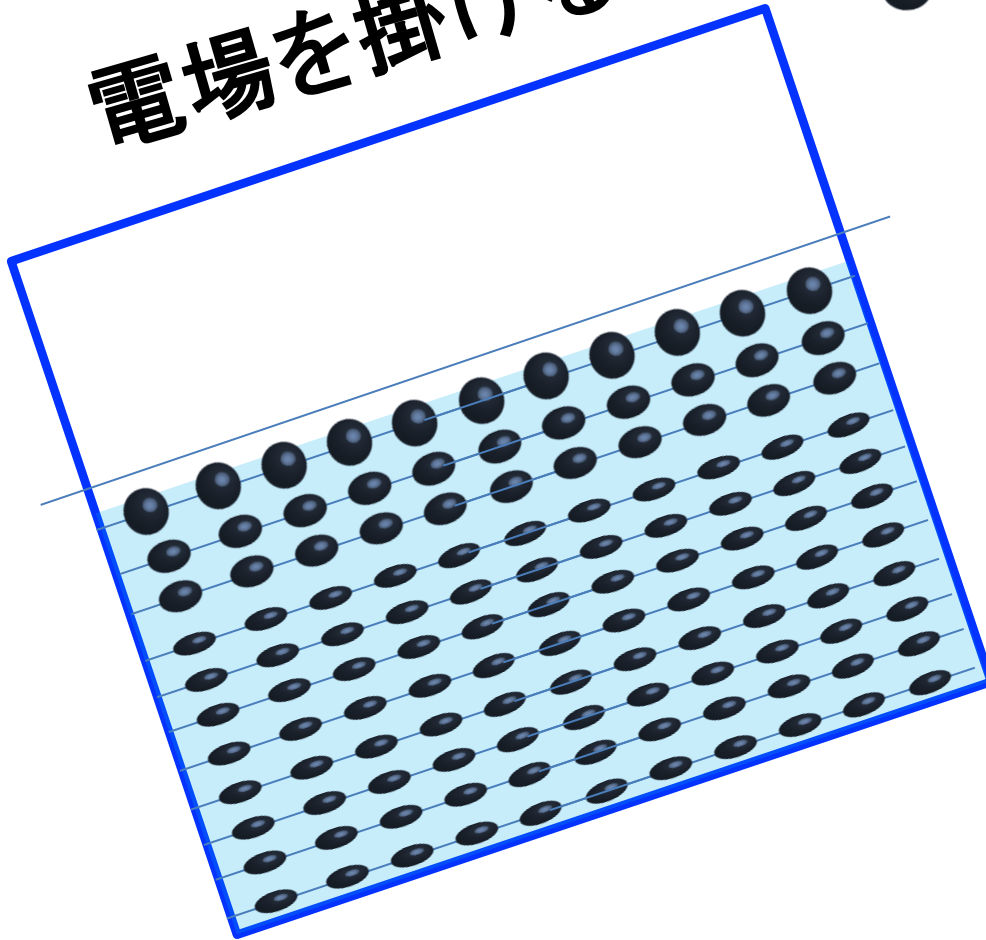


バンドギャップがない



金属に電場を掛けた場合：伝導性の由来

電場を掛ける



- 伝導電子(電子): キャリア

$$I = n\mu q \cdot E$$

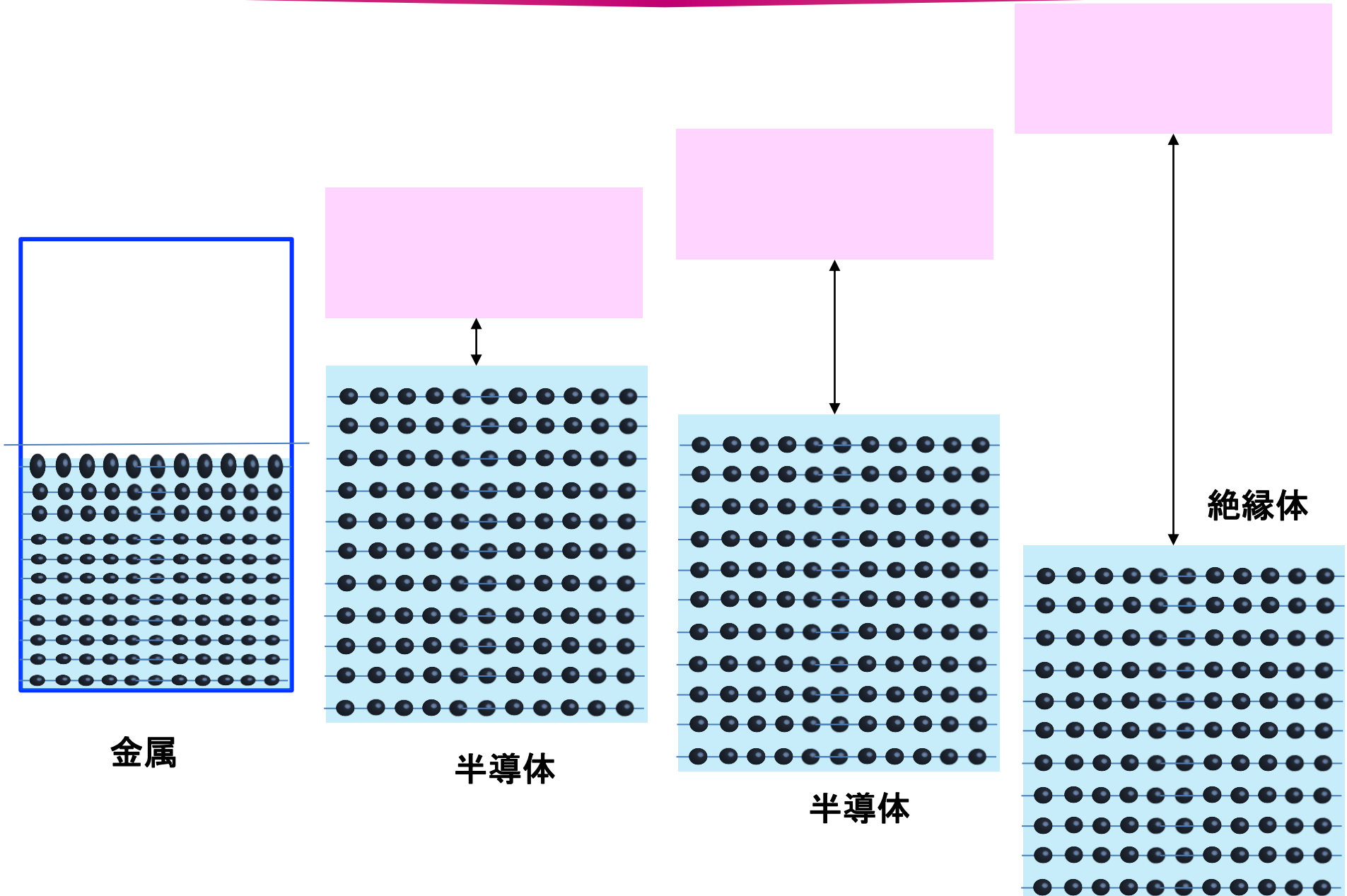
n : キャリア数

μ : 移動度

q : 電荷

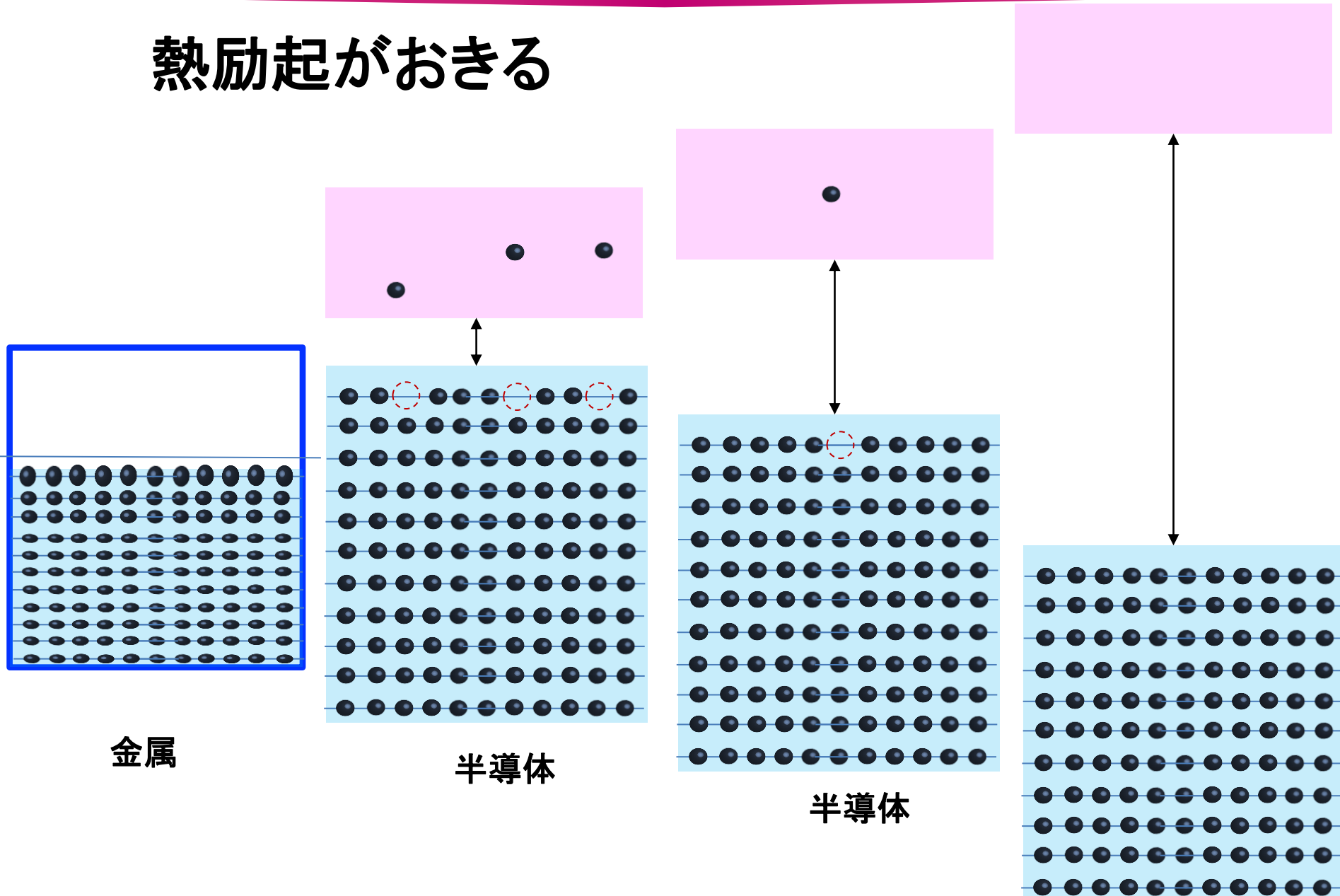
E : 電場

温度が0Kの時:

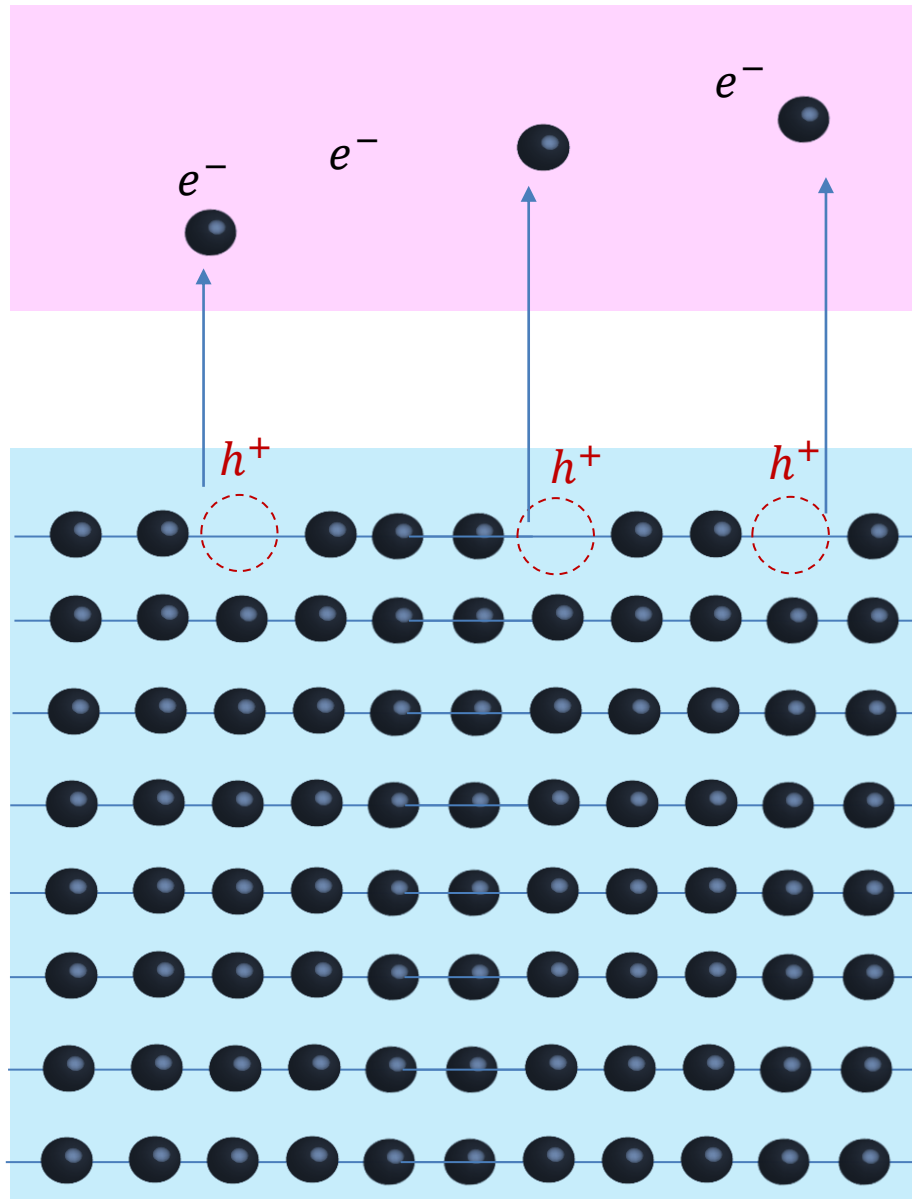


温度が $[300\text{K} = 0.025\text{eV}]$ の時:

熱励起がおきる



キャリア: 伝導電子と正孔(hole)



● 伝導電子(電子)

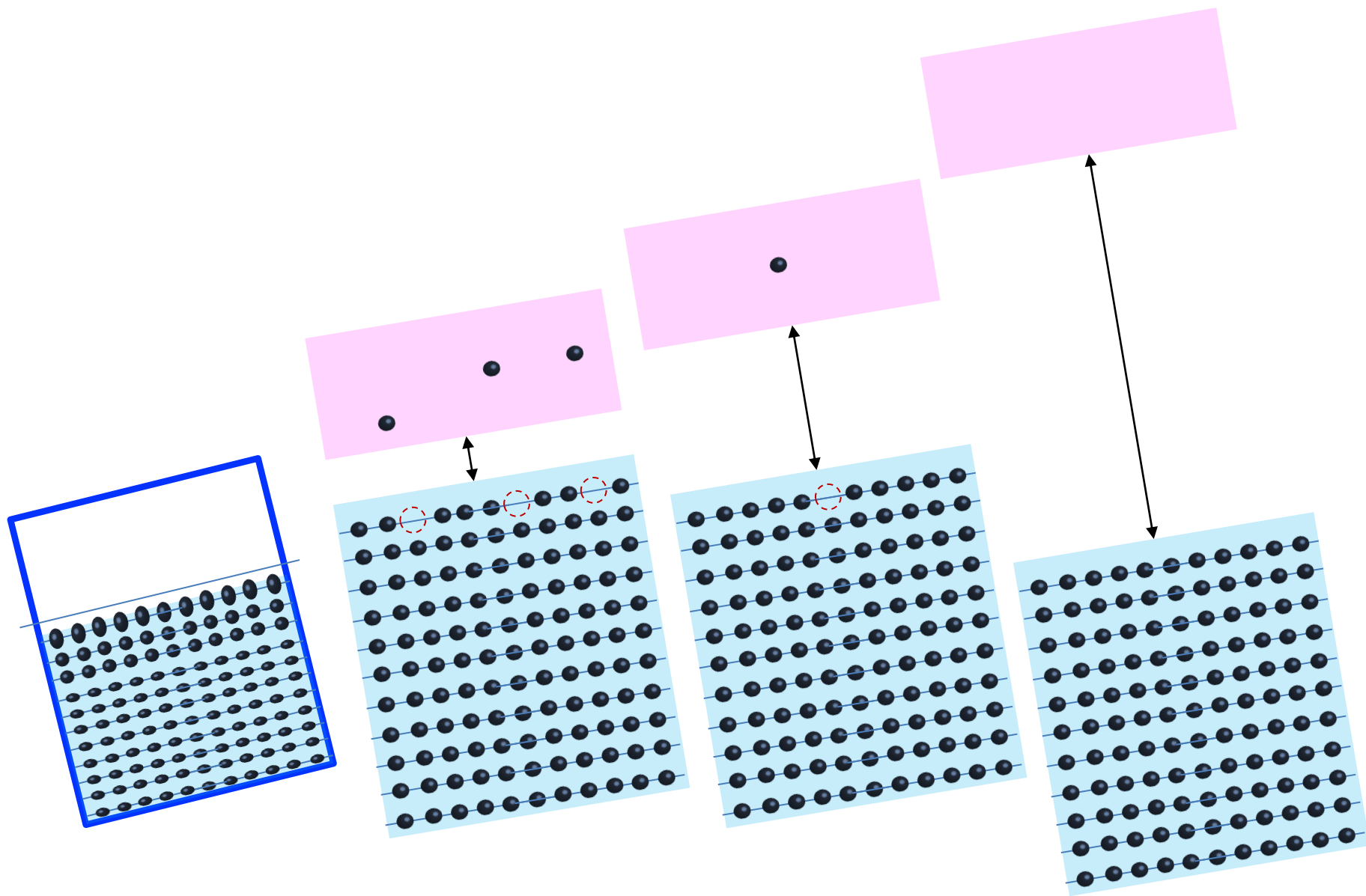
○ 伝導正孔(正孔)

電荷が正になっている理由は半導体
がもともと中性であるから

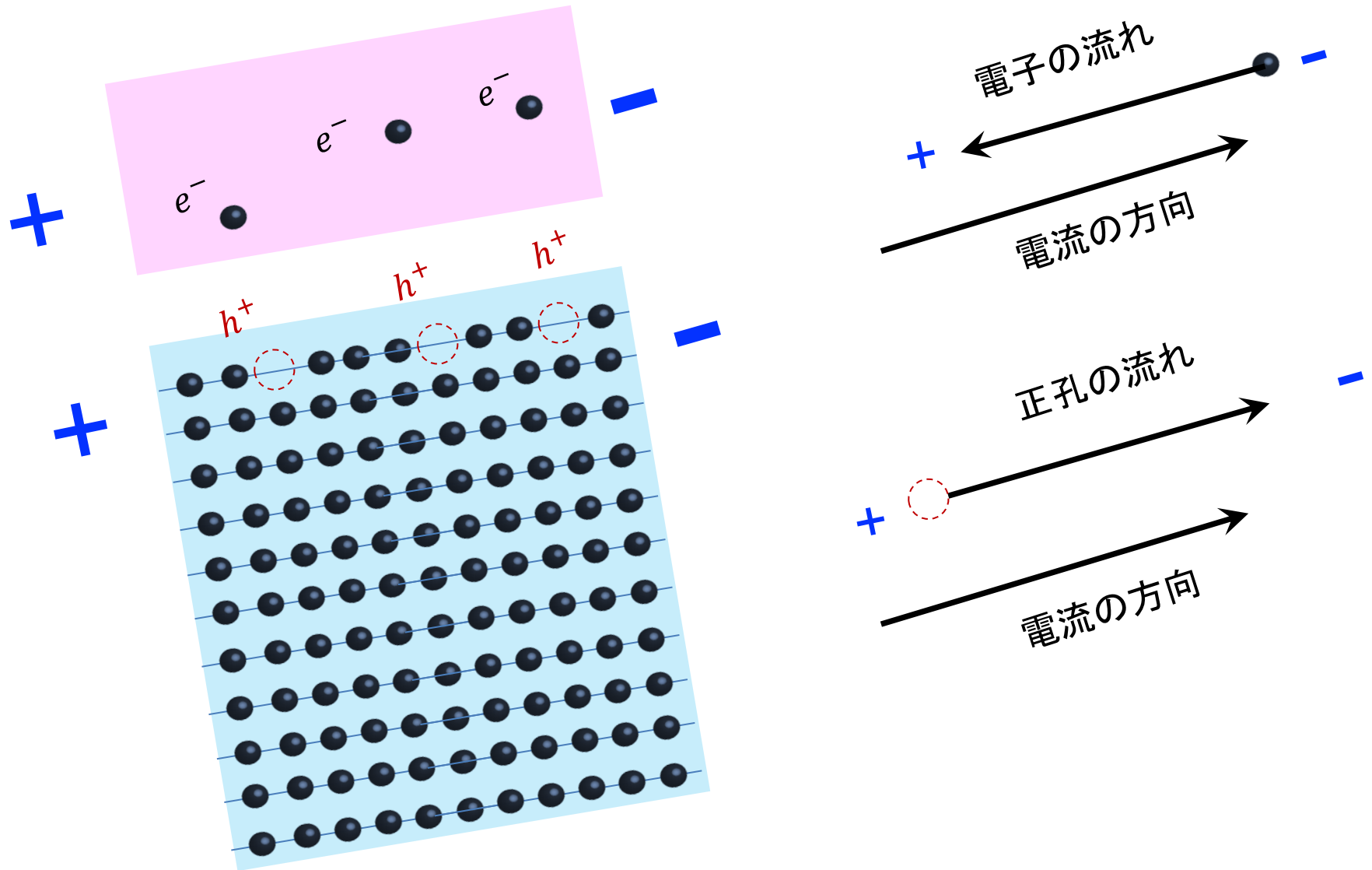
$$0 - e^{-} = h^{+}$$

$$0 - (-1) = +1$$

半導体に電場を掛ける

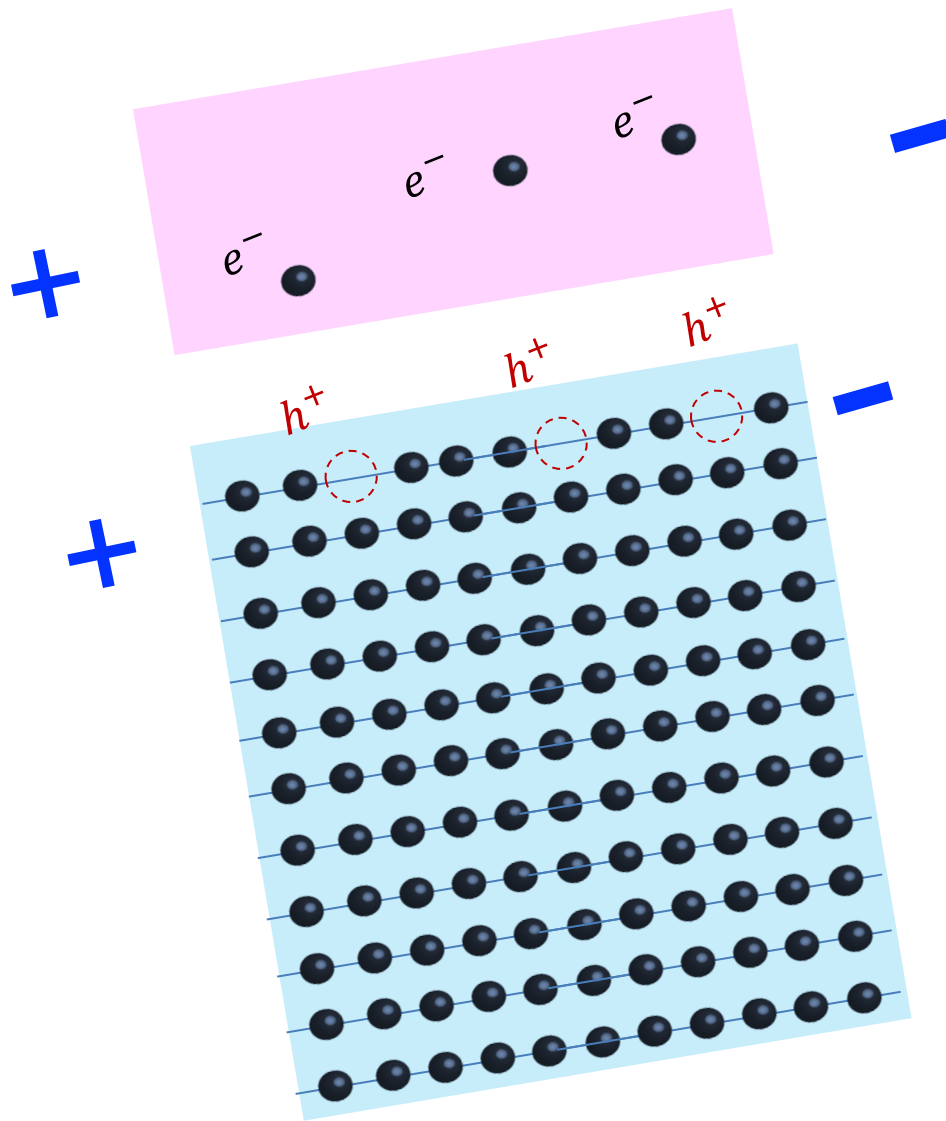


キャリアの流れ:



キャリアの流れによる電流の生成:

移動できるのは電子と正孔

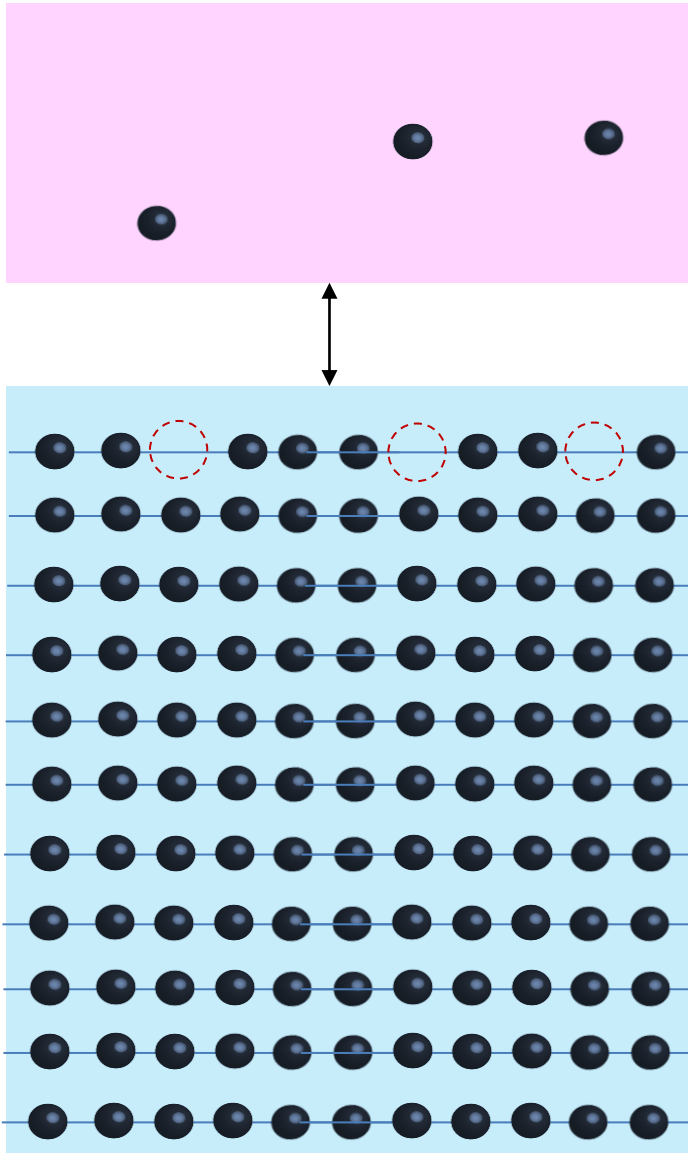


$$I_e = n_e \mu_e q \cdot E$$

$$I_h = n_h \mu_h q \cdot E$$

$$I = I_e + I_h$$

半導体の伝導性が弱い原因

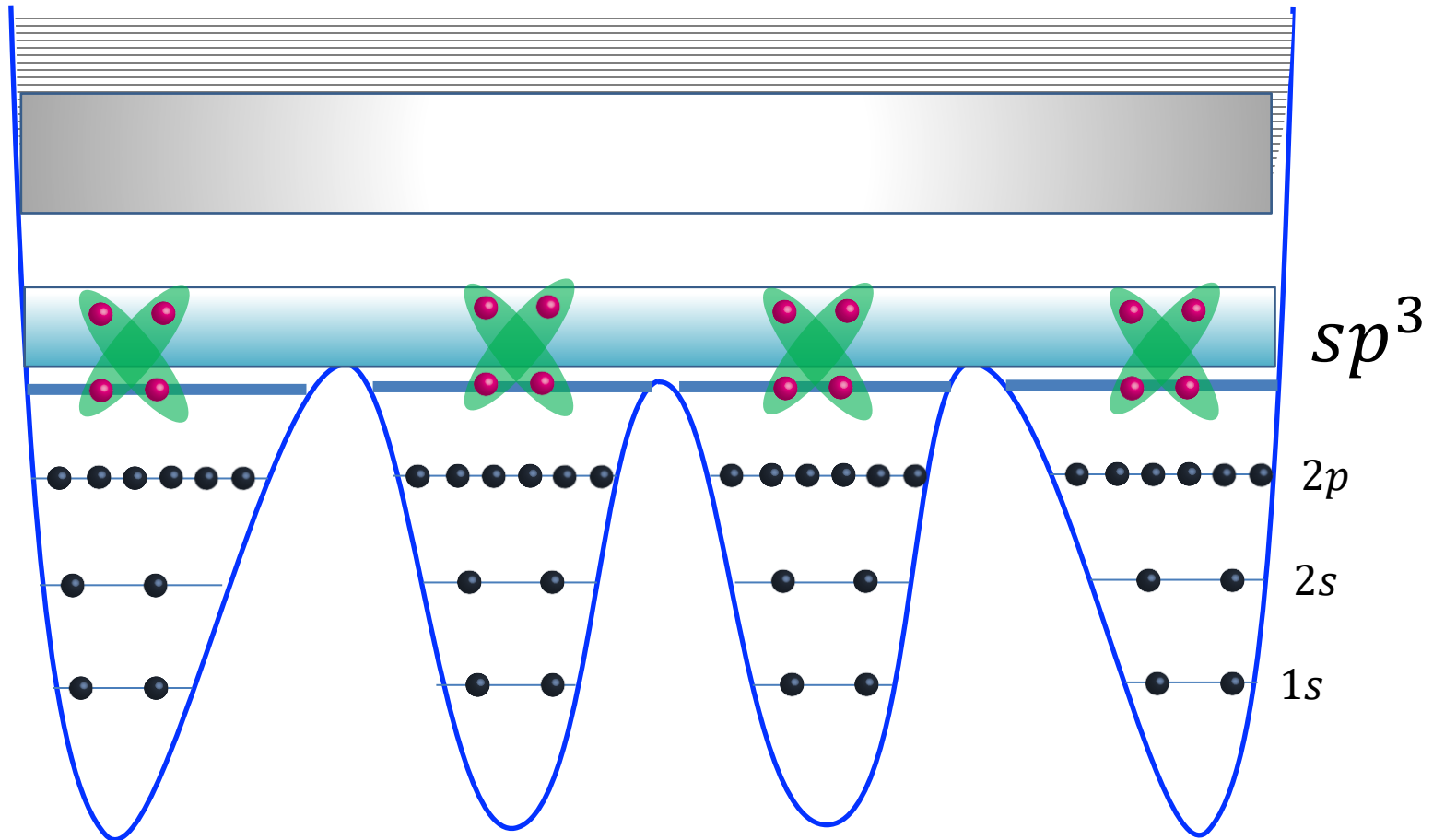


$$I_e = n_e \mu_e q \cdot E$$

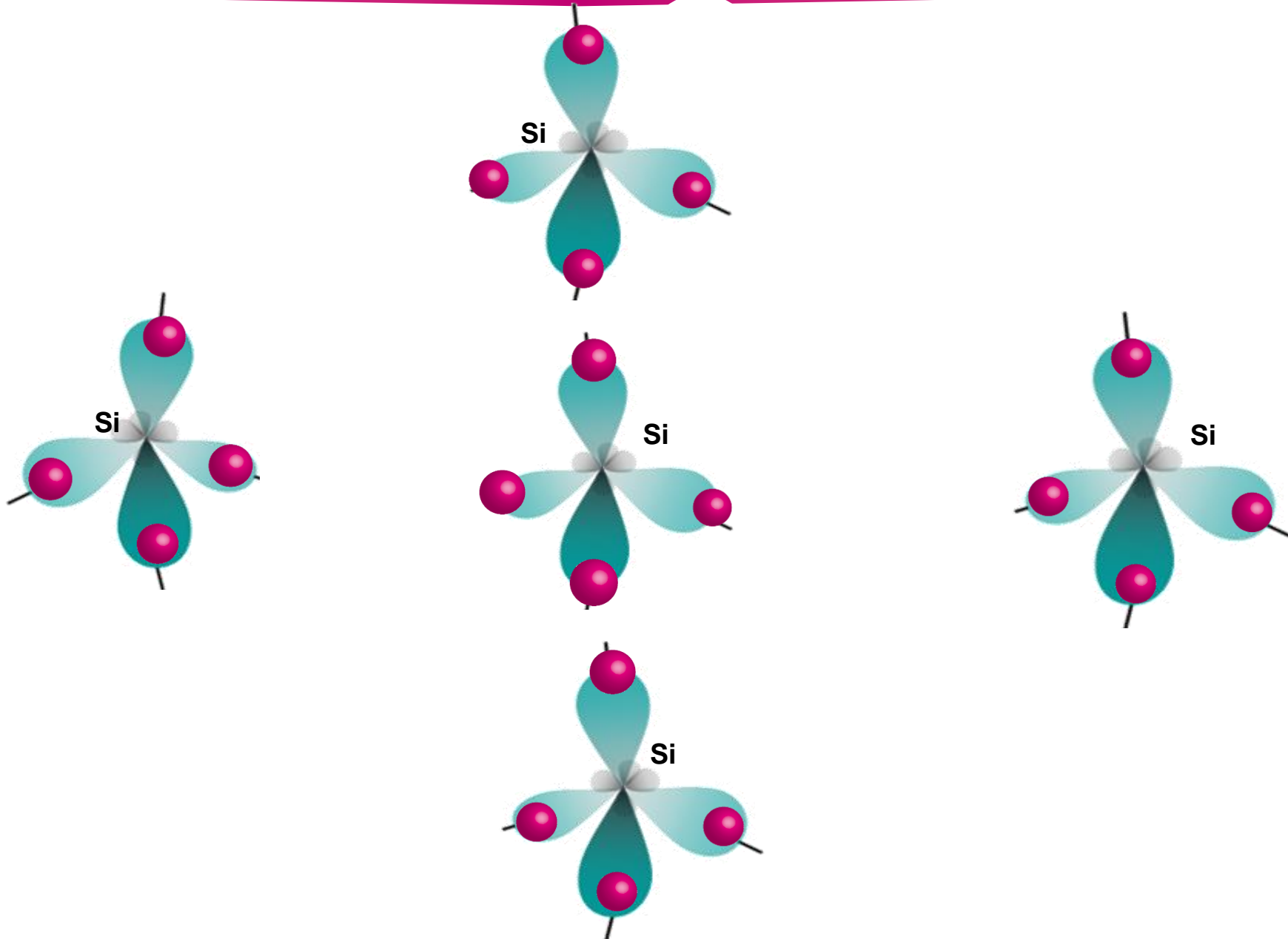
$$I_h = n_h \mu_h q \cdot E$$

伝導電子数と正孔数が少なすぎる！

半導体の伝導性を上げるための対策：背景



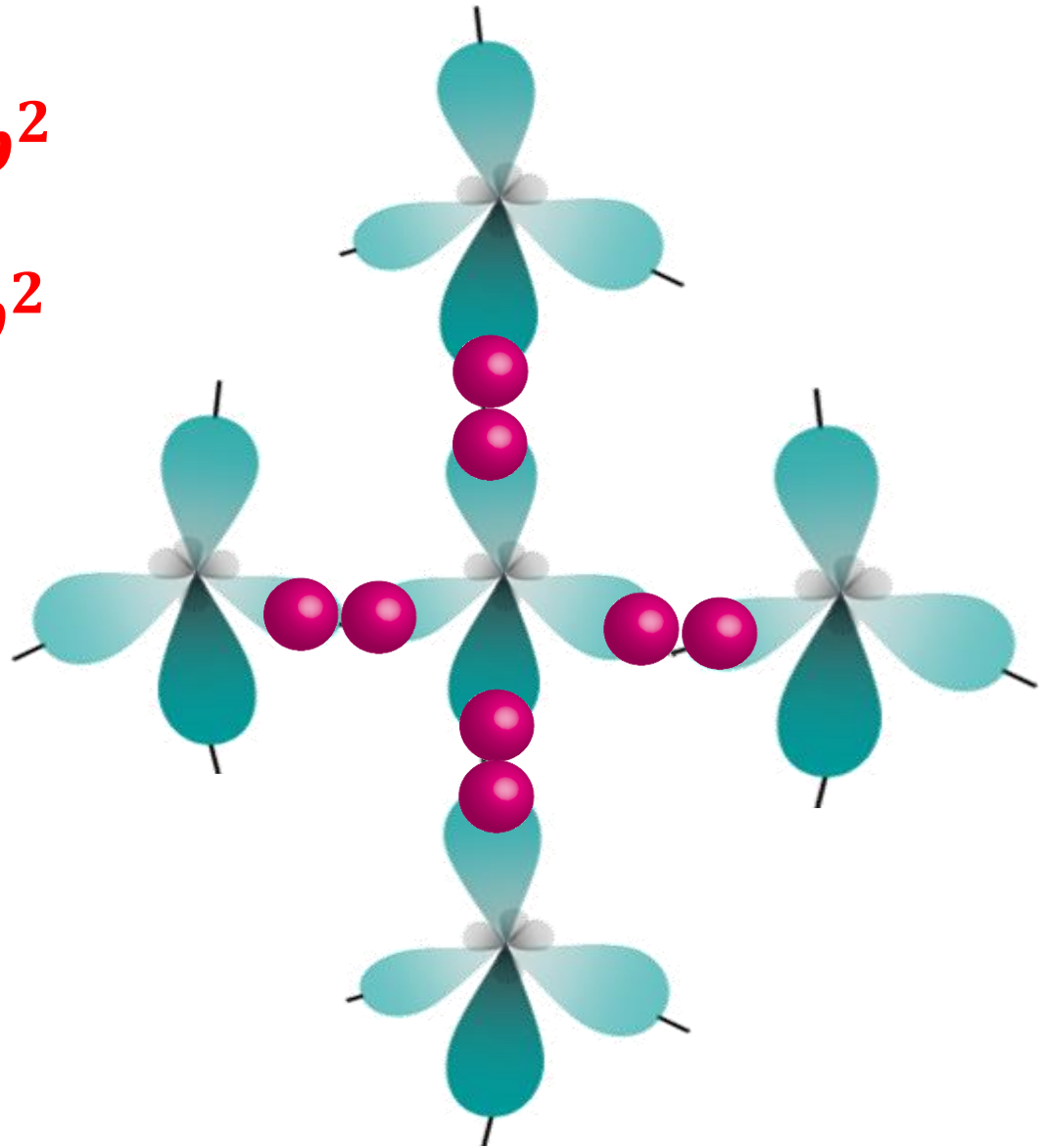
半導体の伝導性を上げるための対策



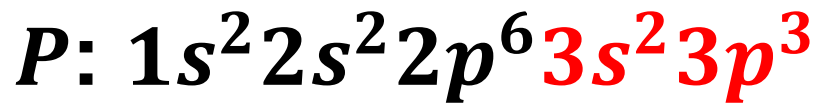
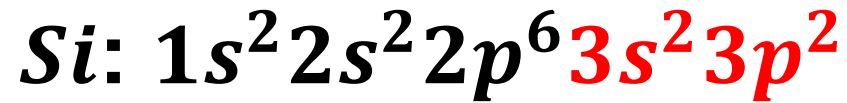
半導体の伝導性を上げるための対策

Si: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

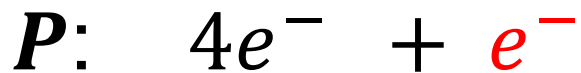
Si: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$



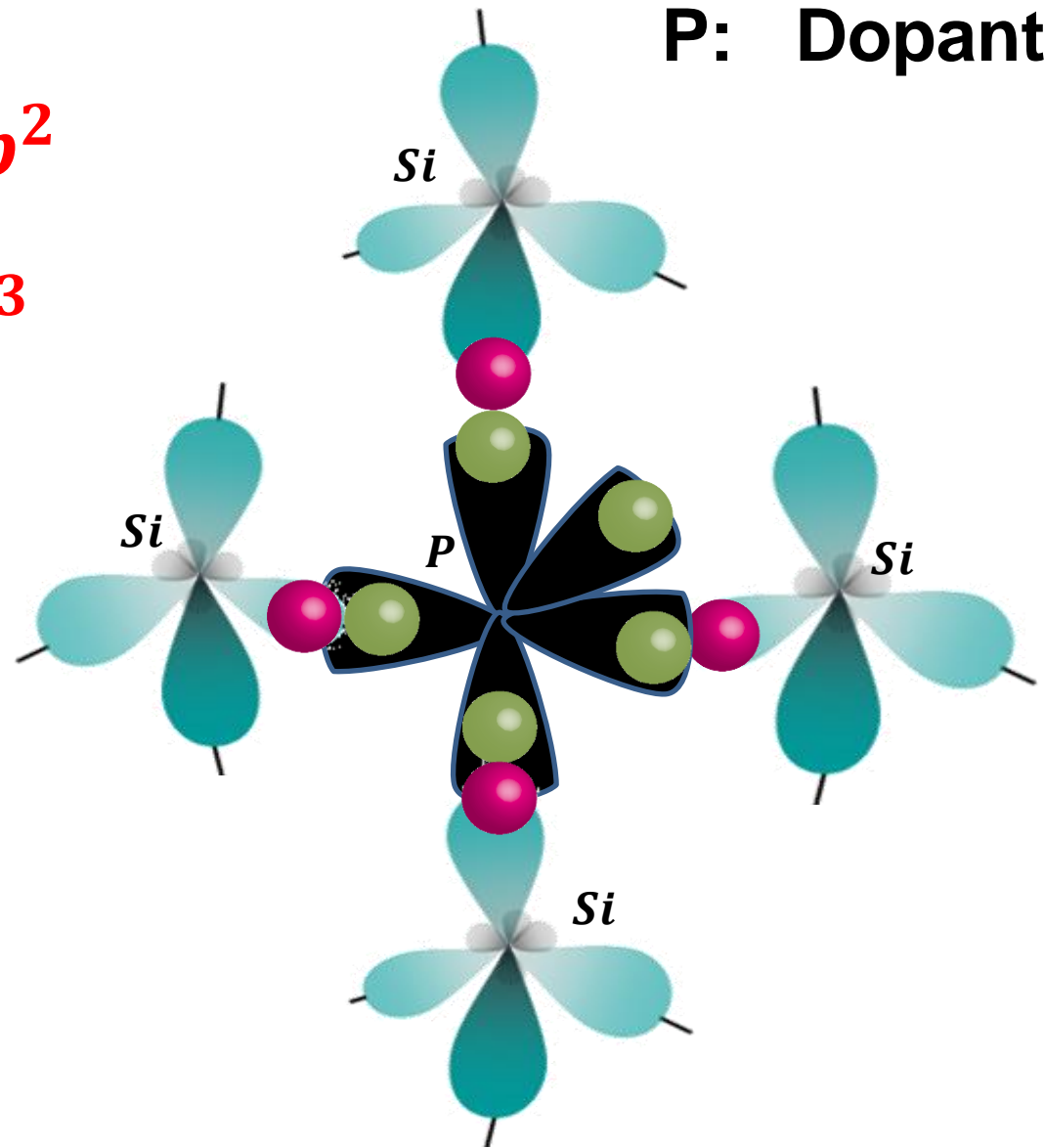
Si半導体に5価のPをDopingする:



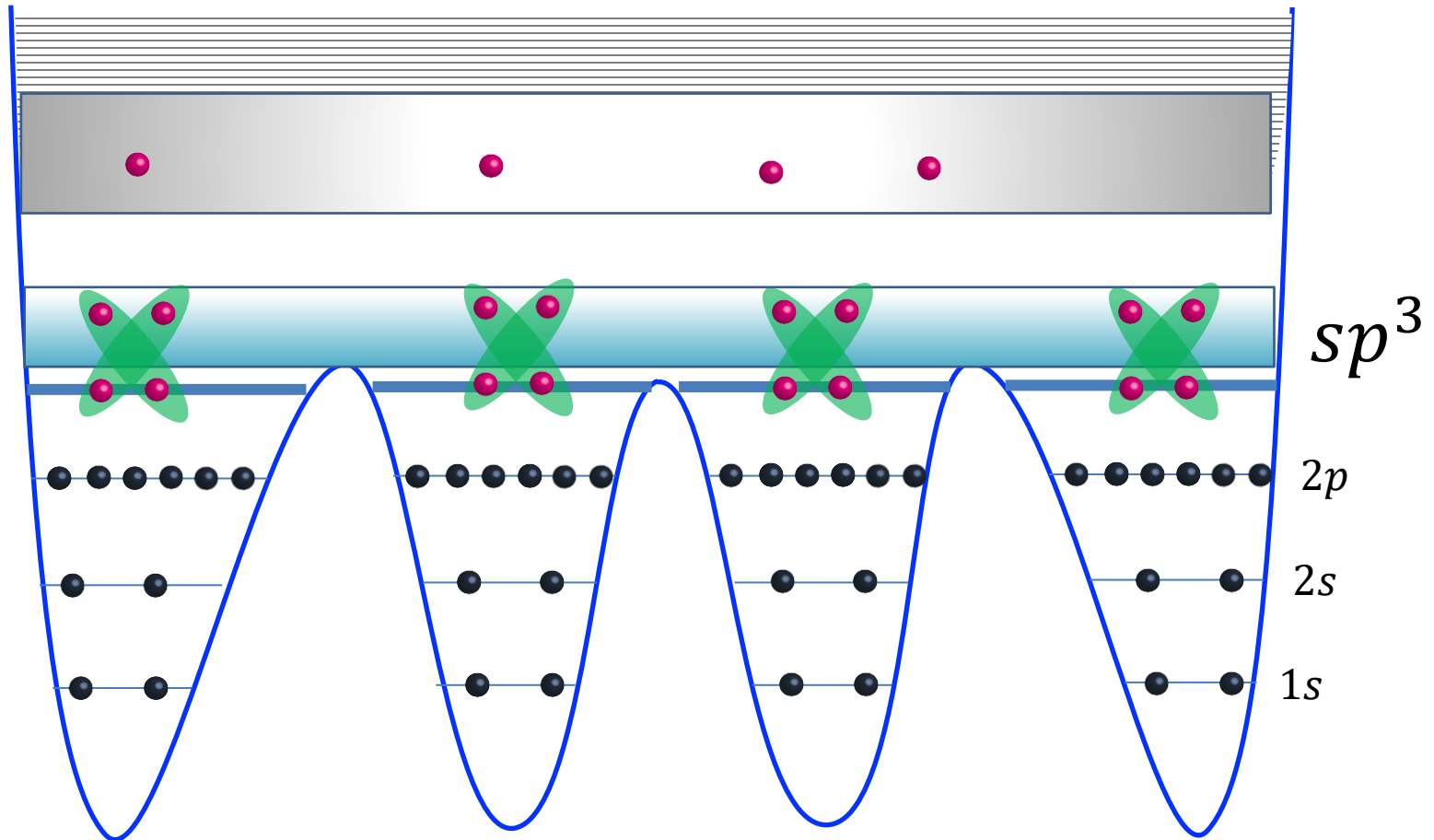
電荷において:



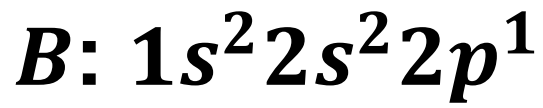
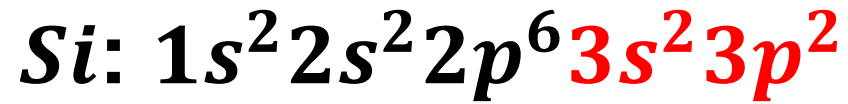
P: Dopant



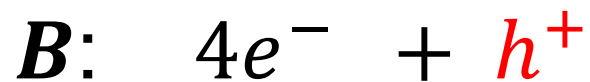
半導体の伝導性を上げるための対策：背景



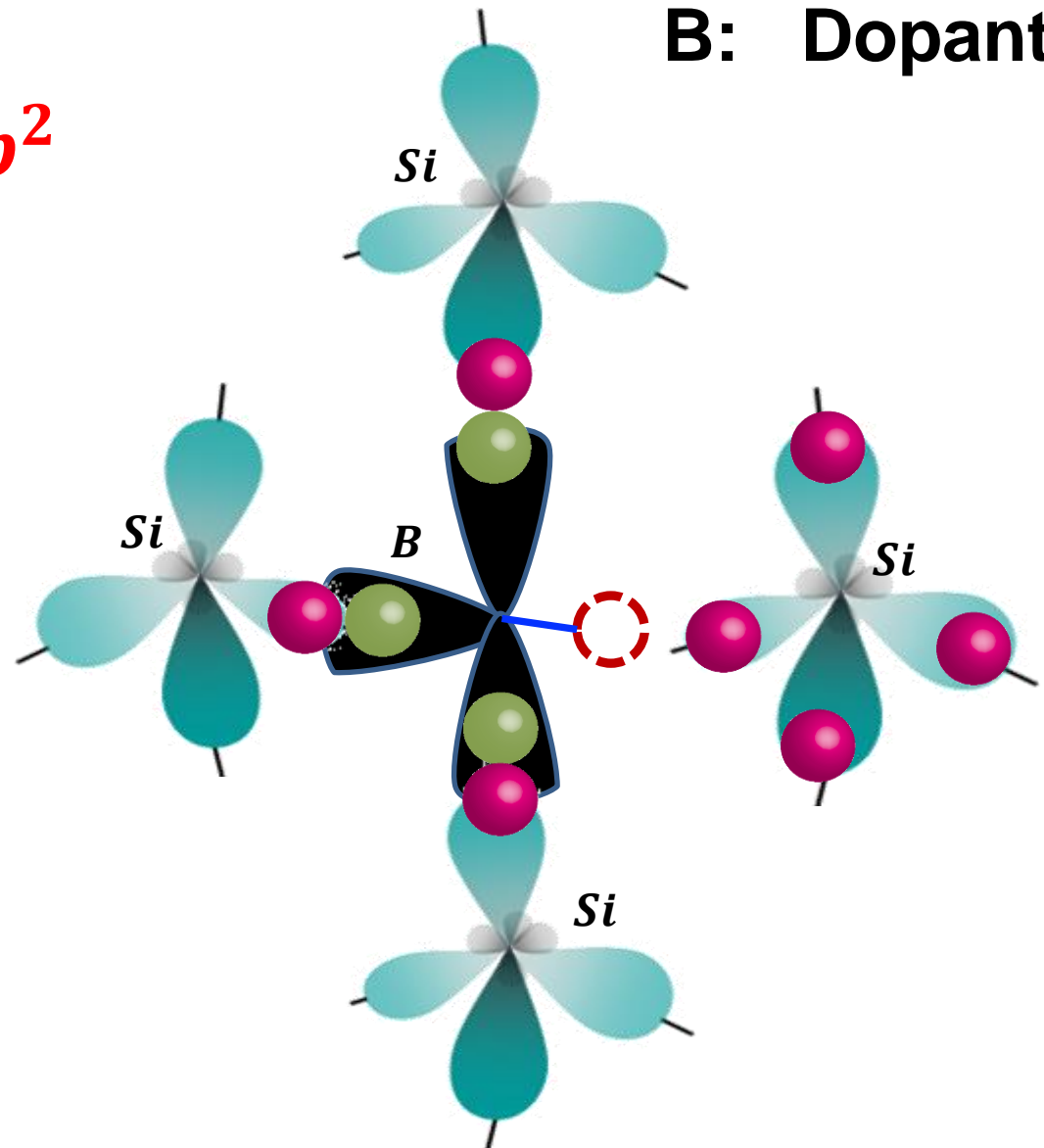
Si半導体に3価のBをDopingする:



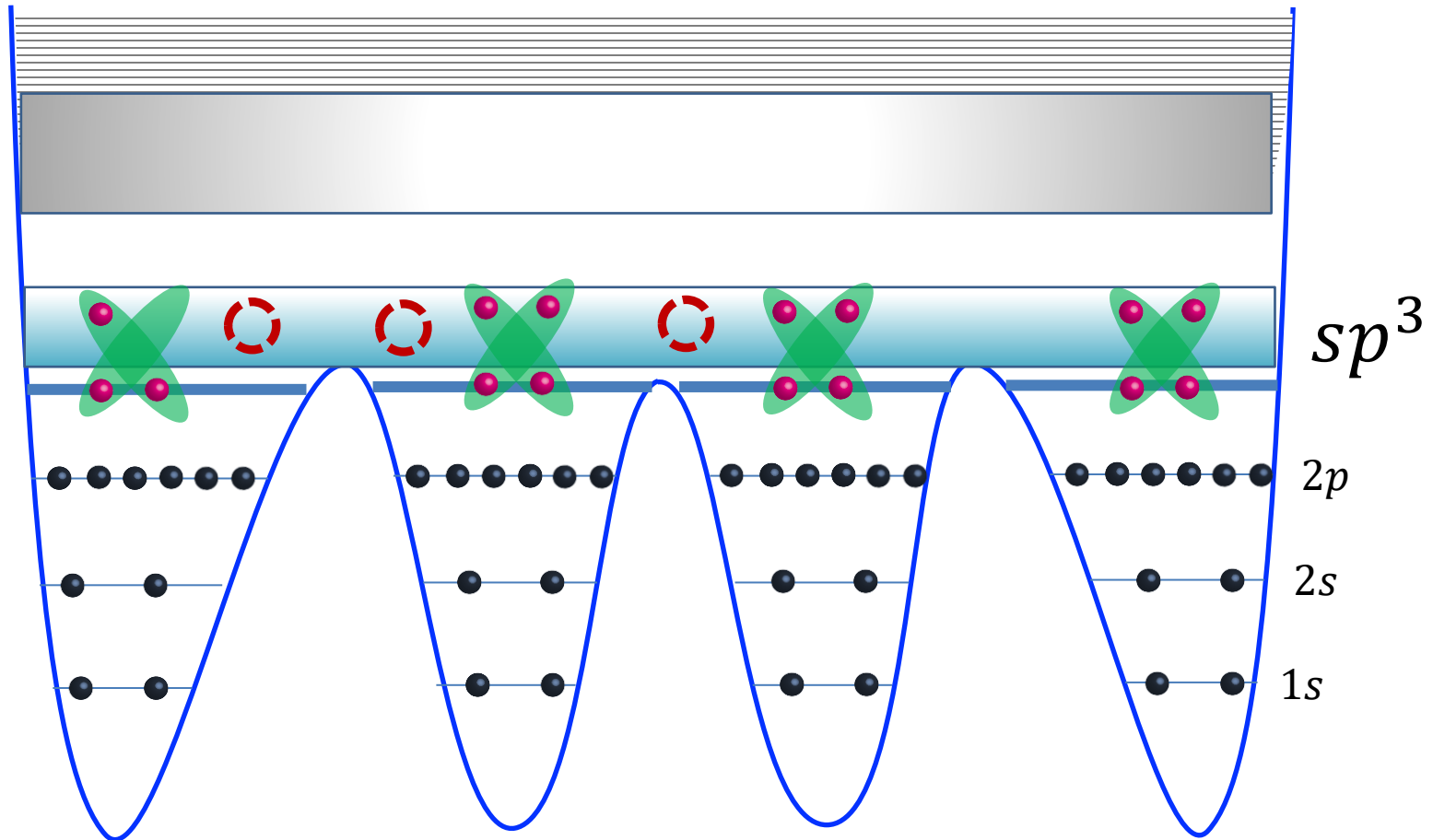
電荷において:



B: Dopant



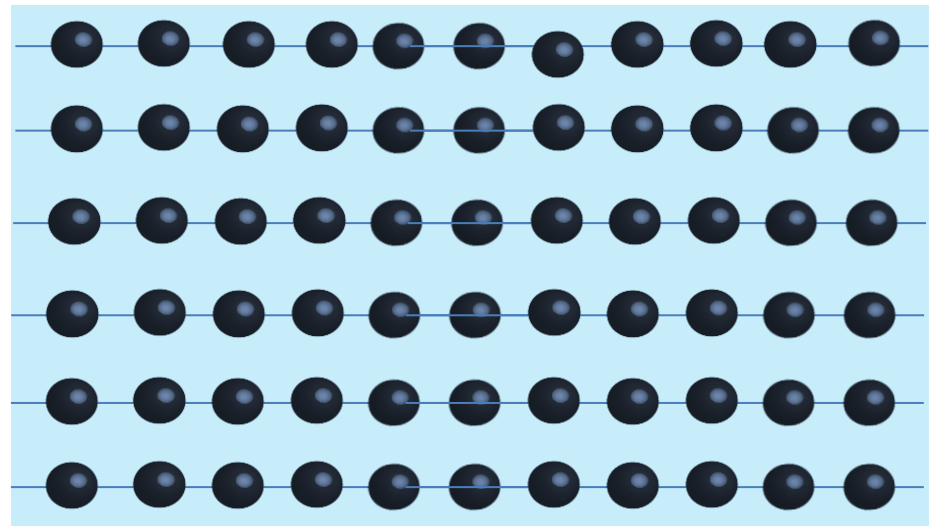
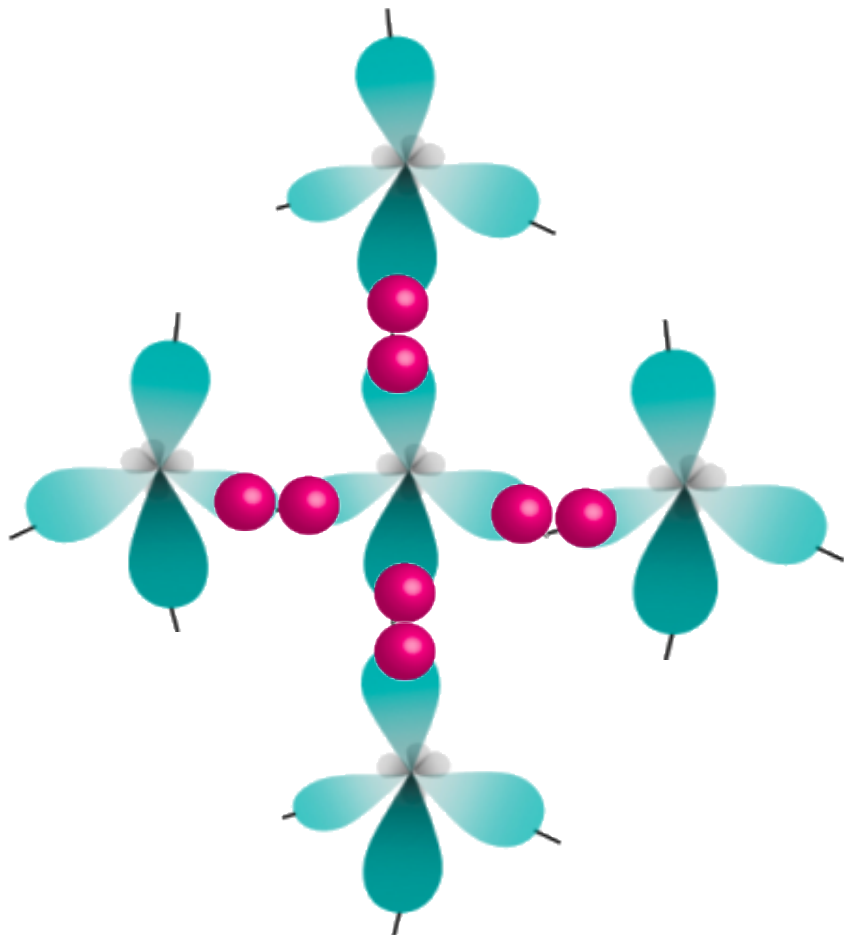
半導体の伝導性を上げるための対策：背景



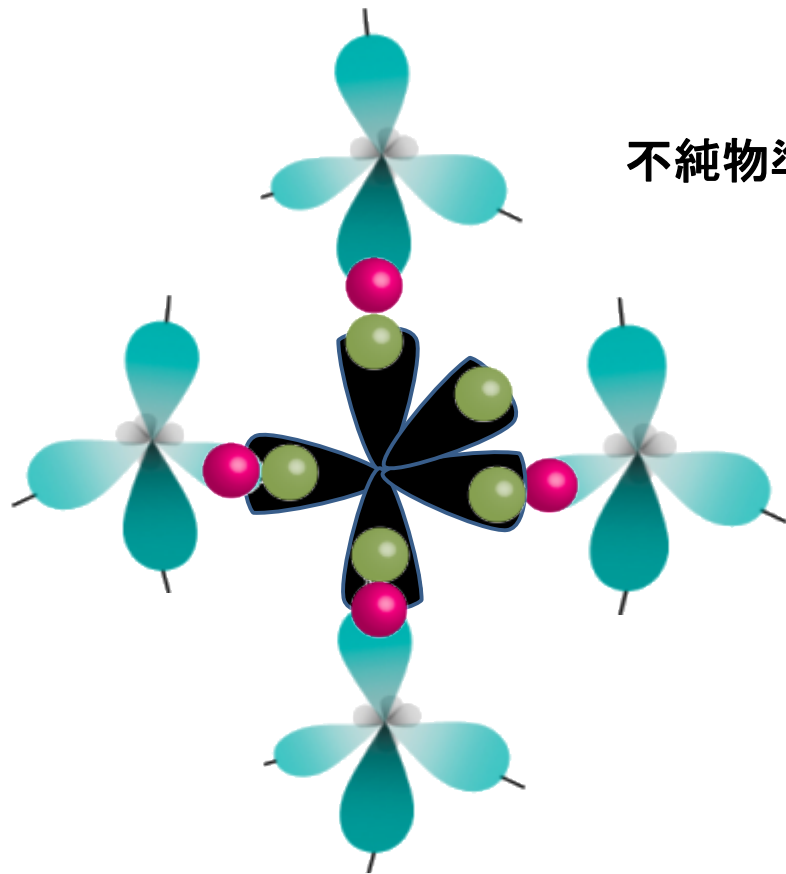
まとめの動画:



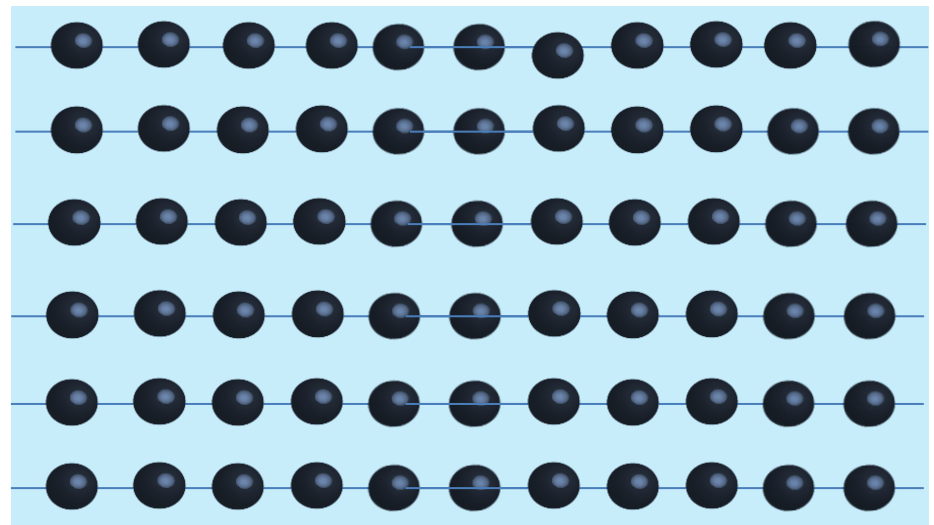
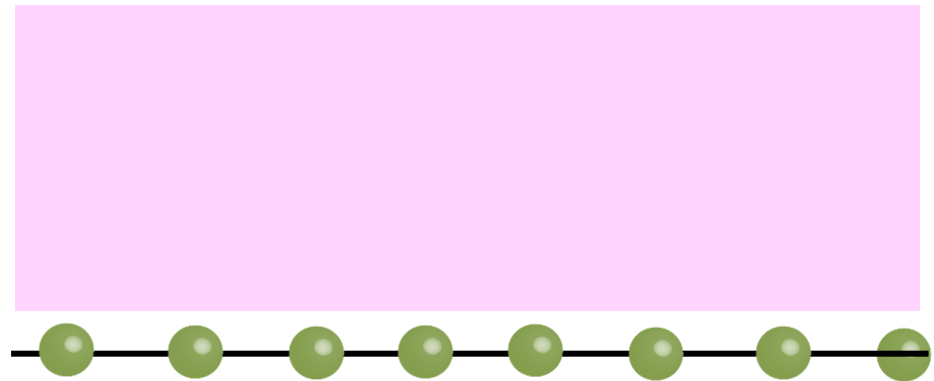
通常のシリコンのバンド構造



通常のシリコンにPをドーピングした際のバンド構造



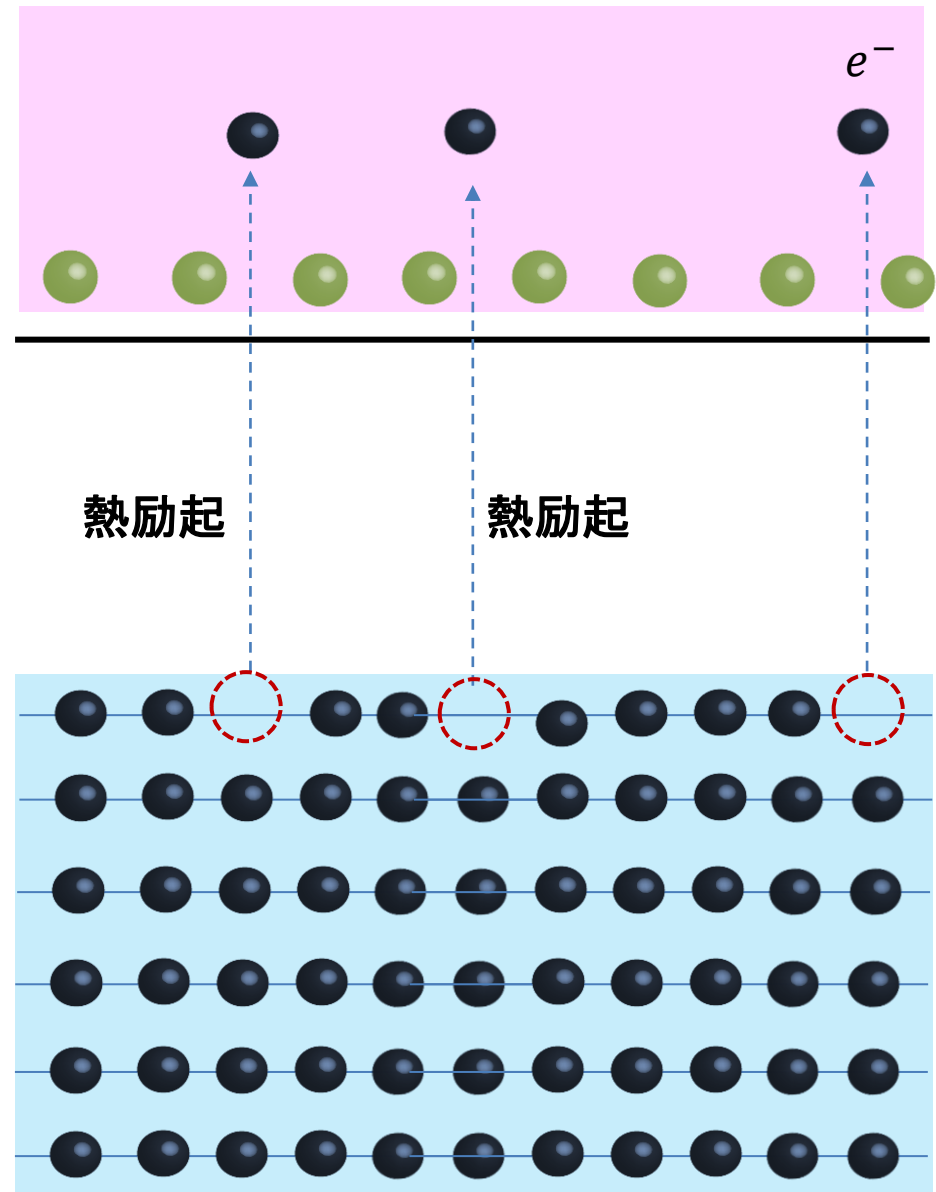
不純物準位



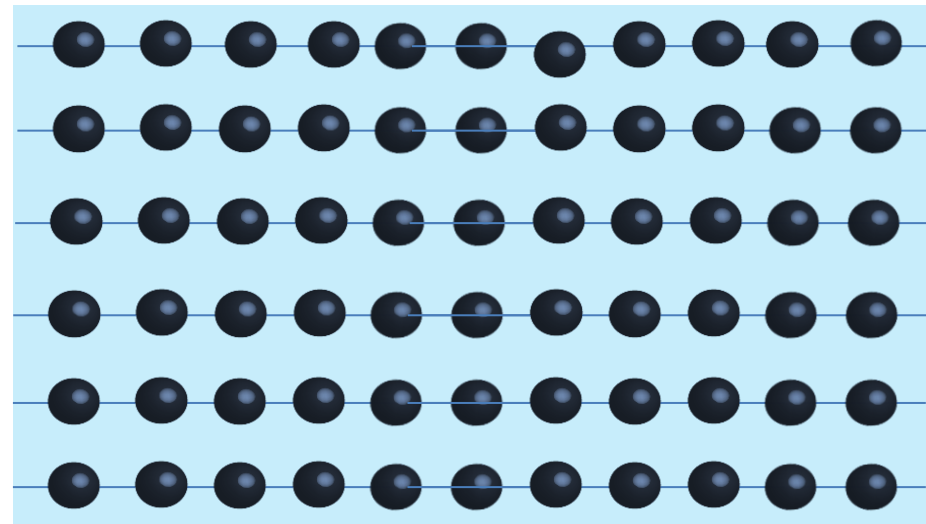
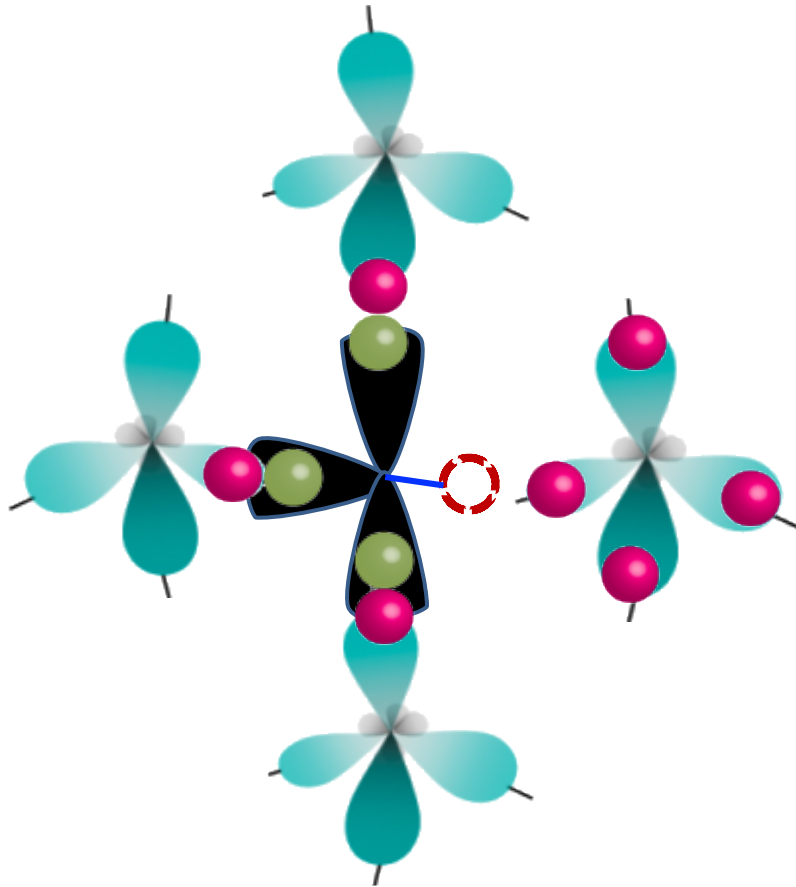
通常のSi(P):キャリア数の変化

通常のSiに比べ、
Pをドーピングした
Si(P)の方が電子
の数が多い。

ドーピングして電子の
数が増えた半導体は
N型半導体



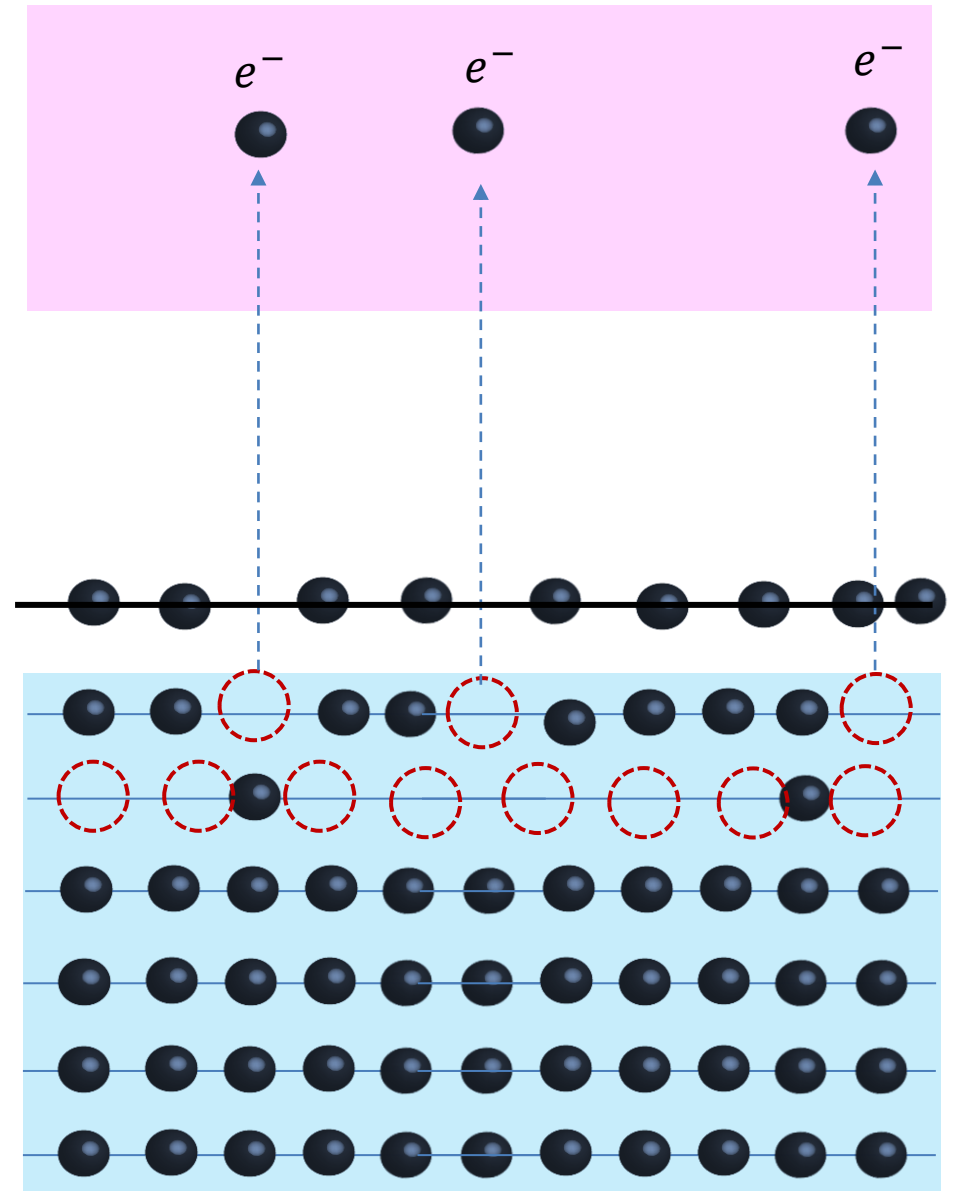
通常のシリコンにBをドーピングした際のバンド構造



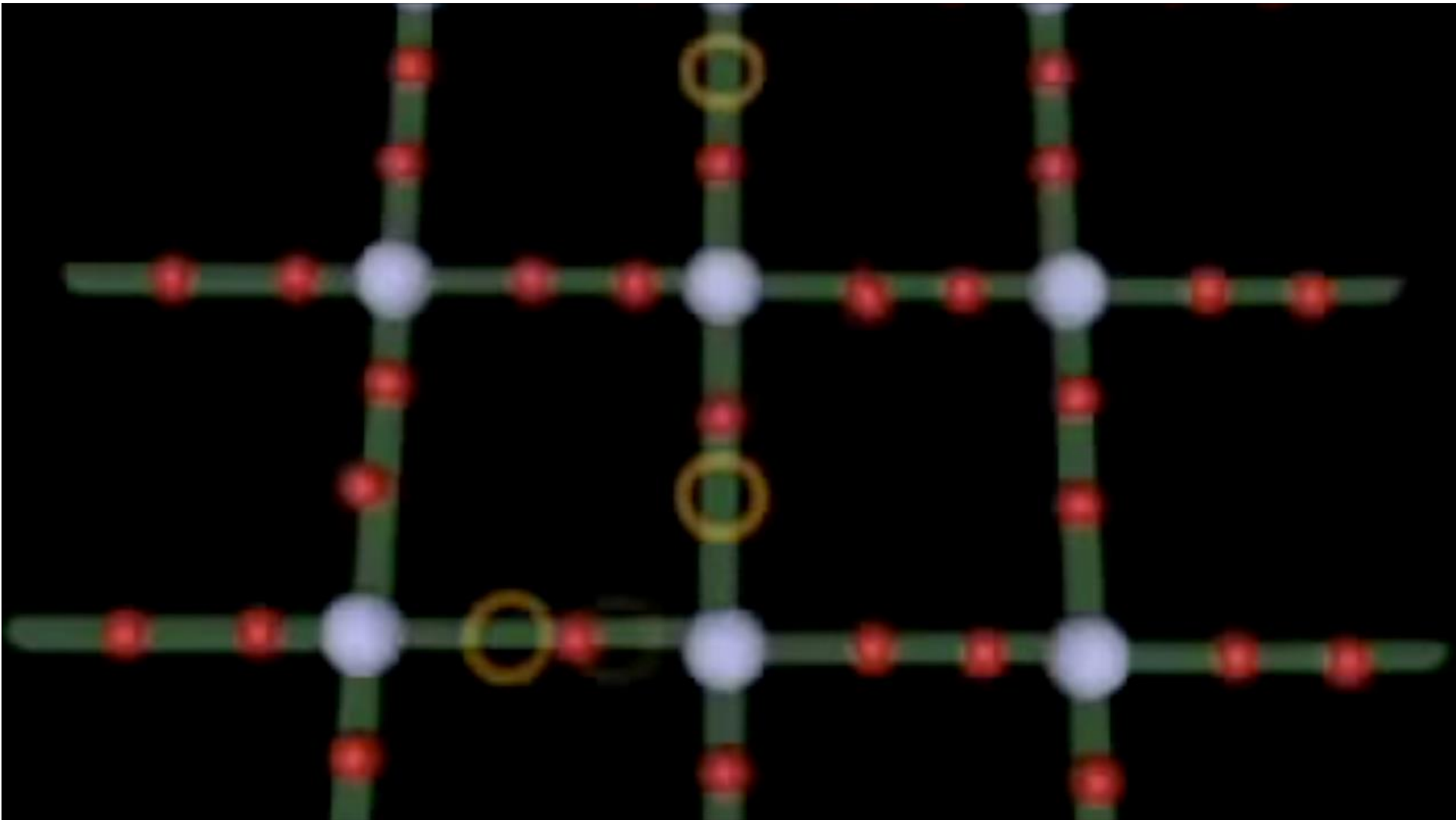
通常のSi(B):キャリア数の変化

通常のSiより, Bを
ドーピングしたSi(B)
の方がホールの数
が多い。

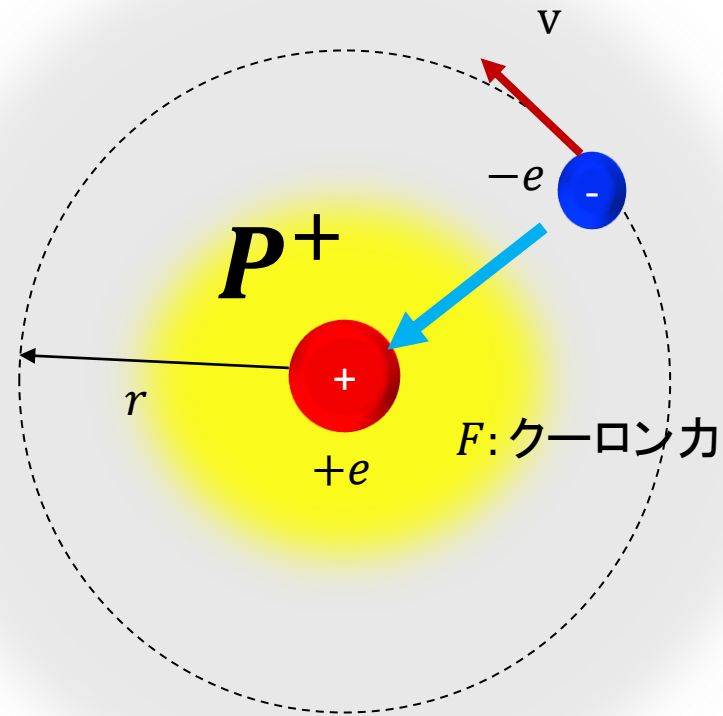
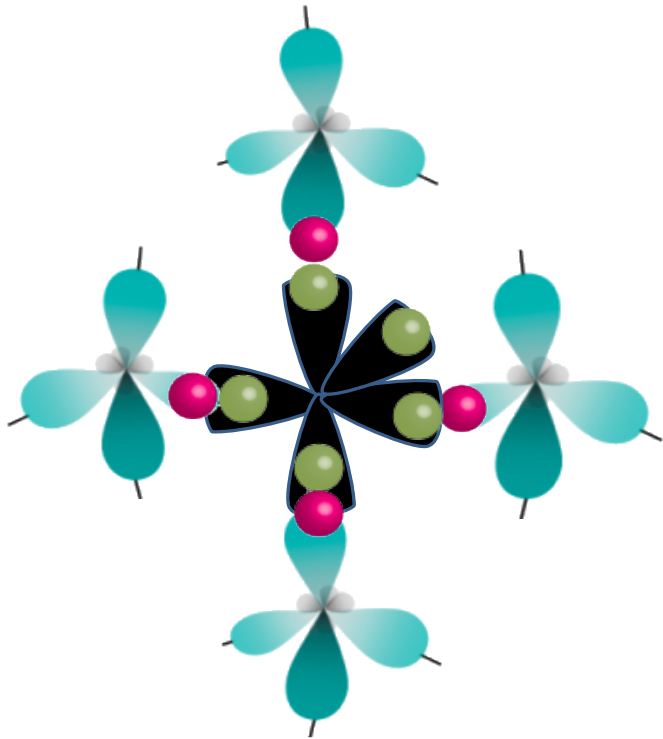
ドーピングしてホール
の数が増えた半導体
はN型半導体



ホールはどのようにして電流を作っている？

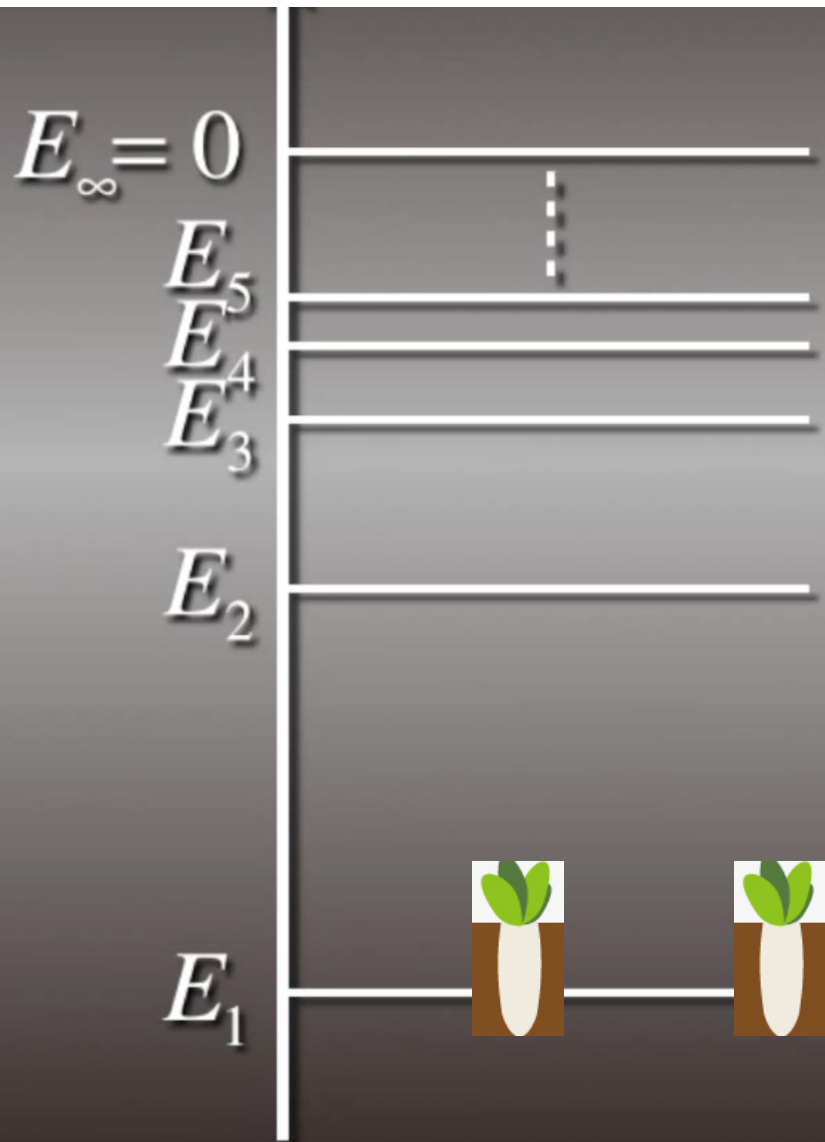


Dopant準位の計算: ボーアモデル



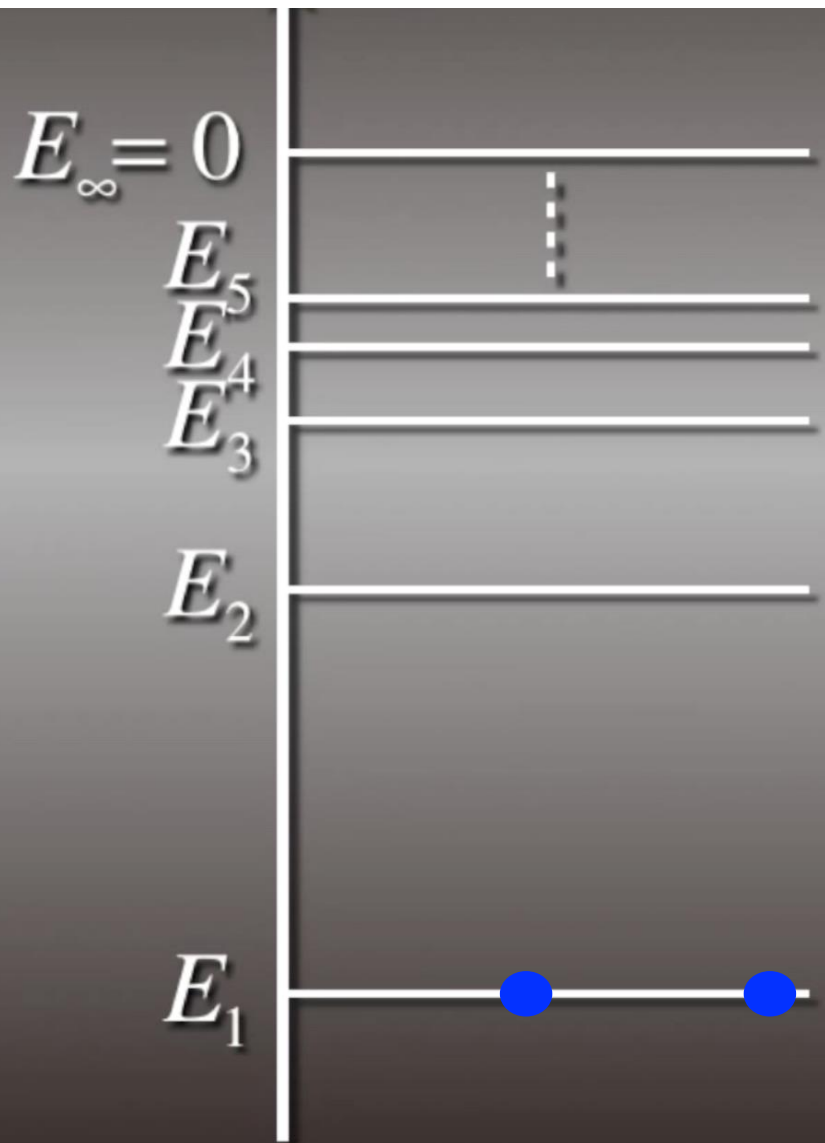
$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

Dopant準位の計算: ボーアモデル


 $n = \infty$
 $n = 3$
 $n = 2$
 $n = 1$

$$E = - \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

Dopant準位の計算： 電子準位


 $n = \infty$

$$E = -\frac{m^* e^4}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

シリコンの比誘電率

 $n = 3$

$$\varepsilon = 12\varepsilon_0$$

 $n = 2$

電子の有効質量:

$$m_e^* = 0.33m_0$$

 $n = 1$

$$E_{1e} = 0.032eV$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} [J \cdot s]$$

$$e = 1.6 \times 10^{-19} [C]$$

$$1eV = 1.6 \times 10^{-19} [J]: \text{電子ボルト}$$

$$c = 3 \times 10^8 [m/s]$$

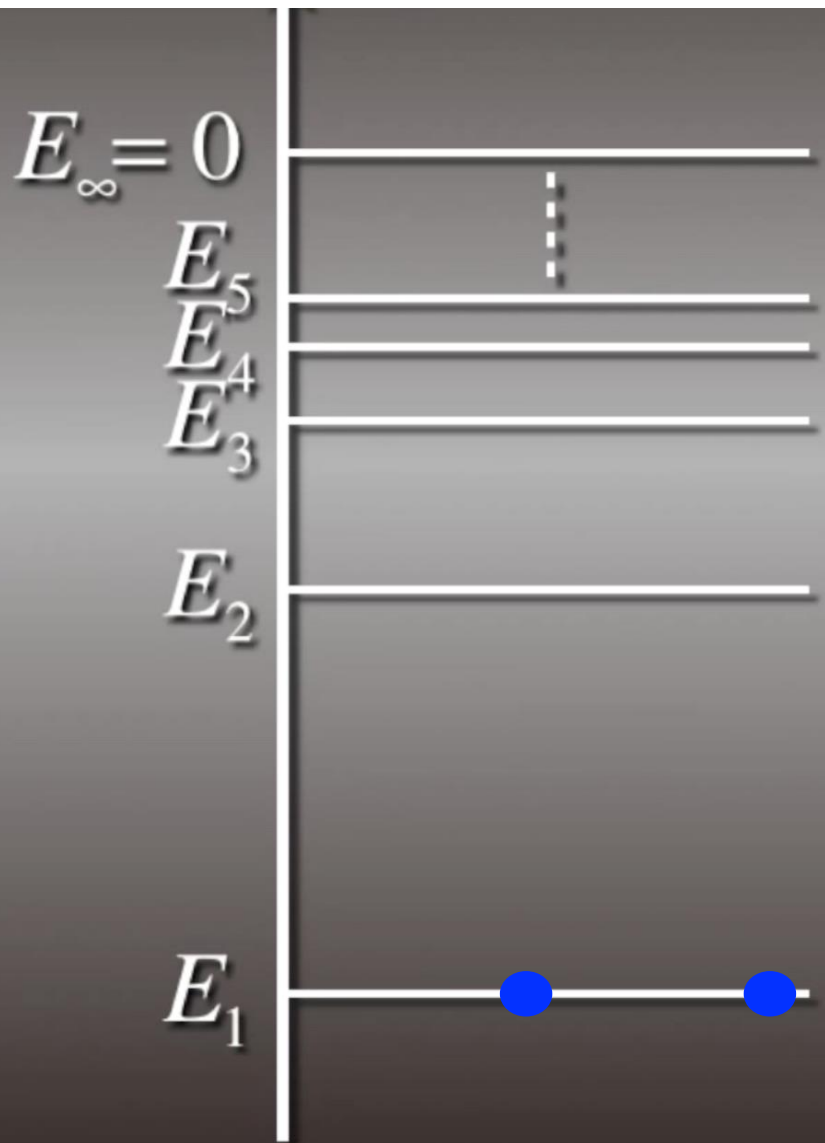
$$m = 9.1 \times 10^{-31} [kg]$$

$$1nm = 1 \times 10^{-9} [m]$$

$$E = - \frac{0.33m_0 * e^4}{144 * 8\varepsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$$E = - \frac{0.33}{144} * 13.6 = 0.031eV$$

Dopant準位の計算: ホール(正孔)準位


 $n = \infty$

$$E = -\frac{m^* e^4}{8\varepsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

シリコンの比誘電率

 $n = 3$

$$\varepsilon = 12$$

 $n = 2$

ホールの有効質量:

$$m_h^* = 0.55$$

 $n = 1$

$$E_{1h} = 0.053 eV$$

P型半導体 & N型半導体

