

Si 結晶の共有結合とキャリア

Fig.1 はIV族元素の Si(シリコン)の殻構造を示す。一番外側の軌道を**最外殻**といい、そこに存在している電子を**価電子(valence electron)**と呼ぶ。Si の場合、価電子は 4 個であり、最外殻の電子が 8 個のとき価電子配置が安定するため、隣り合う 4 つの他の Si 原子と互いに電子を 1 個共有しあって結合する。この結合を**共有結合(covalent bond)**と呼ぶ。この共有結合は強い結合力を持っている。

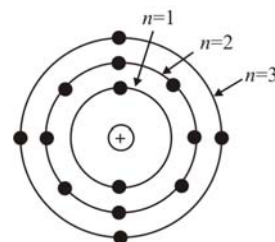


Fig.1 Si の原子モデル

Fig.2 に示すように、半導体に光や熱などの外部エネルギーが与えられると、価電子はそのエネルギーを得て容易に原子核の束縛から離れて自由電子となり得る。電子は負電荷を持っているので、飛び出した電子の空席は正の電荷を持った穴(孔)と考え、正の電荷を持った粒子のように振る舞う。この粒子を**正孔(hole)**と呼ぶ。隣接する価電子がこの孔を埋めるように移動したとき、正孔もまたそれとは逆に移動すると考える。半導体中の電子と正孔を、電気伝導の担い手(電荷を運ぶもの)という意味で**キャリア(carrier)**と呼ぶ。真性半導体では、正孔の数は自由電子の数と等しくなる ($n = p = n_i$)。

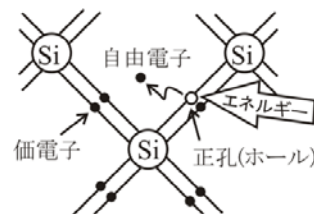


Fig.2 電子正孔対の生成

エネルギー帯

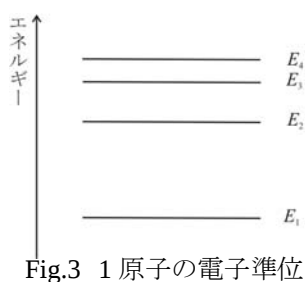


Fig.3 1 原子の電子準位

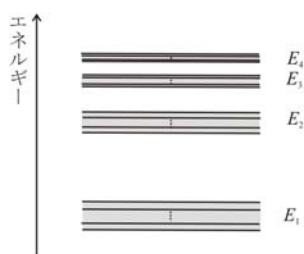


Fig.4 固体中の準位

Fig.3 に一つの原子が孤立した状態での電子のエネルギー状態を示す。このとき、電子はとびとびのエネルギー状態しか取り得ない。この孤立状態の原子にもう一つ原子を近づけてみると原子核を周回する電子は、隣の原子核からの影響を受け、電子のエネルギー準位は分裂する。固体中の原子の様に $10^{28} \sim 10^{29}$ 個/m³ の原子が密集している場合は、エネルギー準位は原子の数だけ分裂するため、個々の準位も密集して 1 つ 1 つ 区別できないので、これを 1 つの領域として考える(Fig.4)。この帯状となったエネルギー領域を「**エネルギー帯(バンド) energy band**」と呼び、特に電子の入り得る帯域を「**許容帯 allowed band**」、許容帯間の電子の存在できない帯域を「**禁制帯 forbidden band**」という。このようにエネルギー状態を帯状の状態とする考え方を「**エネルギー帯理論 band theory**」という。

電子が存在できる**許容帯**のうち、電子が完全に詰まっている許容帯を**充満帯(filled band)**という。その中で最もエネルギーの高い充満帯を**価電子帯(valence band)**という。充満帯の中の電子は完全に電子が詰まっている状態なので、電子が動き得る空席がないため自由に動くことができない。また、電子が空または一部詰まっている許容帯を**伝導帯(conduction band)**という。この伝導帯にある電子あるいは伝導帯に励起した電子は周りに空席が存在するので自由に動き回ることができ、電気伝導に寄与することができる。このような電子を**伝導電子(conduction electron)**あるいは**自由電子(free electron)**と呼ばれる。

導体のエネルギー帯

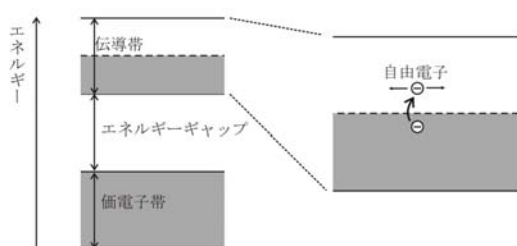


Fig.5 導体のバンド構造

導体(金属)のエネルギーバンド図は Fig.5 に示すようにに空きがある構造となっている。伝導帯の中の電子は少しのエネルギー(例えば熱)を得て周りより高いエネルギー状態となり、周りには移動できる空席が多いので自由に動くことができる。この状態に電界を加えると電子は容易に移動するので電流として寄与することができ、良好な導体となる。

絶縁体のエネルギー帯

絶縁体では Fig.6 に示すように、電子が完全に詰まった価電子帯の上に大きなエネルギーギャップを隔てて完全に電子が空の状態の伝導帯が存在している。そのため、自由に動くことができる伝導帯に電子が励起するにはエネルギーギャップ以上のエネルギーが必要となるが、絶縁体のエネルギーギャップは大きく簡単には電子が励起できないため(室温程度では励起できない)、伝導電子が存在しないことになり絶縁体(不導体)となる。

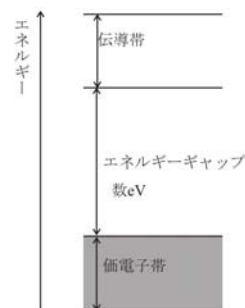


Fig.6 絶縁体のバンド構造

真性半導体のエネルギー帯

半導体のエネルギーバンド構造は絶縁体と同じ構造である。ただし、絶縁体と比べてエネルギーギャップが 1eV 程度と小さく、室温程度の熱エネルギーにより容易に伝導帯に電子が励起することができる (Fig.7)。この伝導帯に励起した電子(数は少ない)が伝導電子として振る舞うため、電気伝導に寄与することになる。半導体のバンド構造を図示する時は、価電子帯の上部から伝導帯の下部(底)までを表示することが多い。

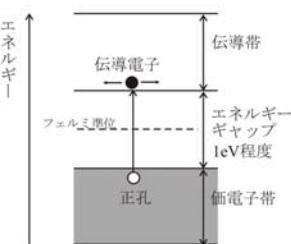


Fig.7 真性半導体のバンド構造

n 形半導体 (IV族+V族)

V族原子の5個の価電子のうち1個がフリーとなって電気伝導に寄与する(残りの4個は共有結合に使う)。このフリーになった電子がキャリアとなる。また、V族元素をドナーと呼ぶ。

室温での n 形半導体のフェルミ準位 E_{Fn} は伝導帯下端 E_C の直ぐ下に位置する。

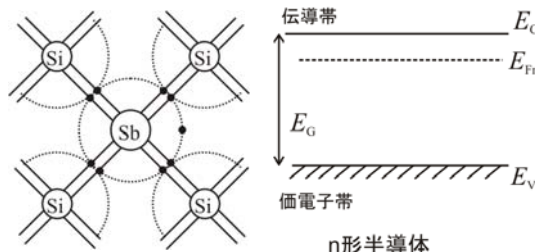


Fig.8 n 形半導体の結合モデルとフェルミ準位

p 形半導体 (IV族+III族)

母体IV族原子の価電子をIII族原子が奪って共有結合する。電子の抜けた穴が正孔(ホール)となって電気伝導に寄与する。この正孔がキャリアとなる。また、III族元素をアクセプタと呼ぶ。

室温での p 形半導体のフェルミ準位 E_{Fp} の位置は価電子帯上端 E_V の直ぐ上にある。

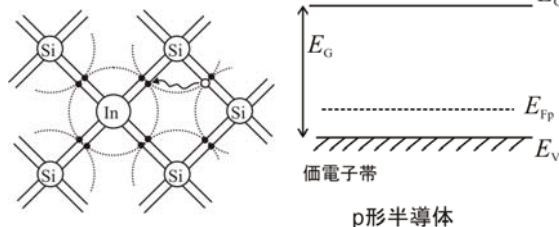


Fig.9 p 形半導体の結合モデルとフェルミ準位

半導体中を流れる電流

移動度 mobility : キャリアの動きやすさの度合いを示すパラメータ。 $\mu = \frac{e\tau}{m^*} \left[\frac{m^2}{Vs} \right]$

(1)電界による電流: ドリフト電流

半導体に外部から電圧を掛けた時、電子(正孔)が外部電界と反対方向(同方向)へ移動していく運動はドリフト運動と呼ばれる。このドリフト運動する電子または正孔によって流れる電流をドリフト電流という。

$$J = J_e + J_h = e(n\mu_e + p\mu_h)E = \sigma E$$

(2)キャリアの拡散による電流: 拡散電流

キャリア分布に不均一がある場合、キャリアは濃度が高い方から低い方へと均一になるように移動する。この現象を拡散(diffusion)現象という。(電荷を持ったキャリアが時間的に変化すること) = (電流が流れること)になり、この拡散によって流れる電流を拡散電流と呼ぶ。

$$J = J_e + J_h = -e \left(-D_e \frac{dn}{dx} \right) + e \left(-D_h \frac{dp}{dx} \right)$$

移動度 μ と拡散定数 D を結ぶ関係式をアインシュタインの関係という。 $\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{e}$

半導体に流れる電流はドリフト電流と拡散電流を足しあわせたものになる。