

1-4 シリコン

結晶格子(crystal lattice)

物質を構成する原子や分子、イオンなどが空間的に規則正しく配列している固体を**結晶(crystal)**といい、結晶の周期的な配列を**格子**と呼ぶ。この周期的な繰り返しの最小単位の格子を**単位格子**

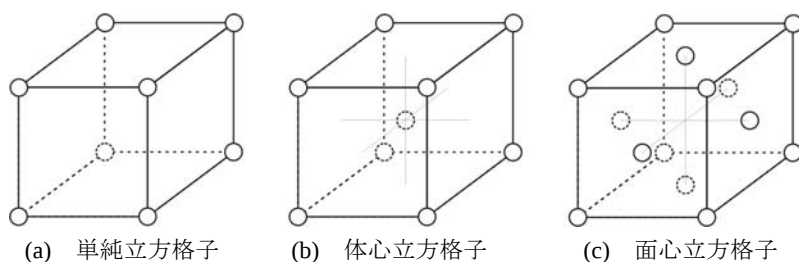


図 1 立方格子

(unit cell)という。結晶はその(対称性の)外形から 7 種に分類される(七晶系: 立方晶、正方晶、斜方晶、単斜晶、三斜晶、三方晶、六方晶)が、ここでは半導体に関連する立方晶系について説明する。

- ・単純立方格子: 立方体の各頂点に原子が存在。
- ・体心立方格子: 単純立方格子の立方体中心に 1 個の原子が存在。
- ・面心立方格子: 単純立方格子の各面中心にそれぞれ原子が 1 個存在。

面心立方格子を例に単位格子に含まれる原子の数を考える。頂点にある原子の単位格子分は $1/8$ であるので $8 \times 1/8 = 1$ 個、各面にある原子の単位格子分は $1/2$ であるので $6 \times 1/2 = 3$ 個の計 4 個が面心立方格子に含まれる原子数となる。

IV 族元素のシリコン Si やゲルマニウム Ge の結晶構造は炭素 C と同じく**ダイヤモンド(diamond)構造**(教科書 p.7 図 1.5)をとる。見方を変えると、ダイヤモンド構造は面心立方格子が 2 つ重なったものである。また、単位格子の 1 辺の長さを**格子定数**という。Si の格子定数は 0.357 nm ($3.57 \text{ \AA}$)である。

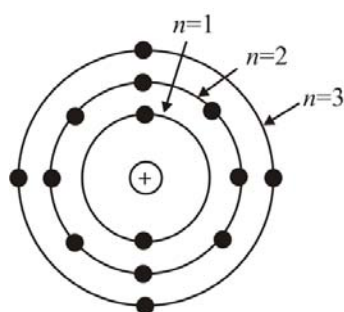


図 2 Si の原子モデル

原子核の周りがある軌道で核外電子が運動している原子モデルを考える。電子が存在している層を**殻(shell)**という。

- ・殻に入り得る電子の数: $2n^2$ (n :主量子数)
- ・殻に電子が詰まった状態: **閉殻(closed shell)**

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。IV 族元素の場合、価電子は 4 個である。

図 2 は Si(シリコン)の殻構造を示す。IV 族元素の場合、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 つの他の原子と互いに電子を共有しあって結合する。この結合を**共有結合(covalent bond)**と呼ぶ。共有結合は強い結合力を持っており、中心にある原子は隣接の 4 つの原子がつくる正四面体の重心位置にくる(図 3)。結晶構造を平面的にモデル化すると図 4 に示すような図になる。講義では、これ以降便宜上、この平面化した結晶モデル図を使用して説明を行う。

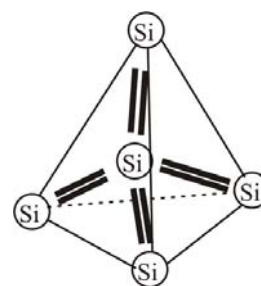


図 3 正四面体構造

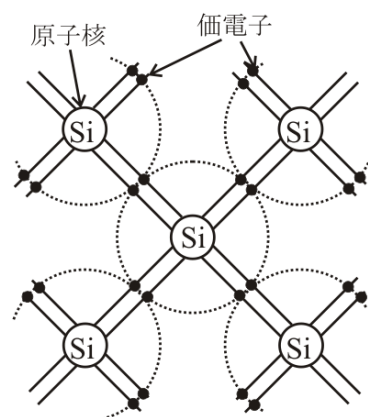


図 4 平面化した結晶モデル