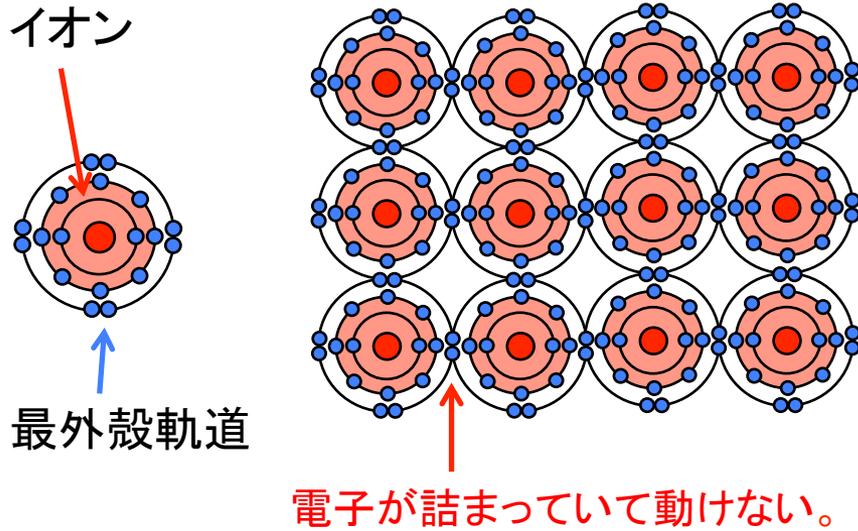


11. 金属と半導体

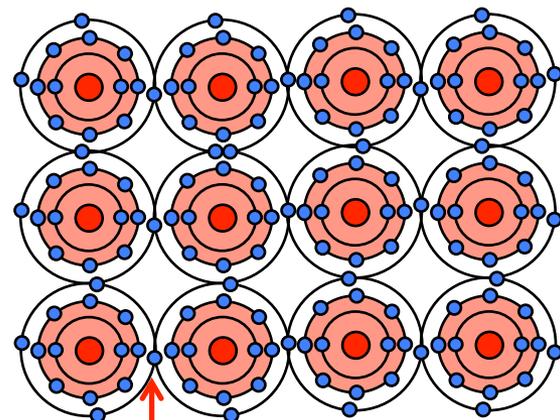


シリコン(半導体)結晶の電子構造

結晶構造に由来するこの共通のメカニズムを使って、現代の電子技術を支える半導体の動作原理を理解することができる。

金属は導体で電流を良く流すのに対し、半導体はほとんど電流を流さない。しかし、実はいずれも結晶構造で、その電子構造も非常に似通っている。

金属と半導体の違いは軌道(電子が入り得る通り道)に入っている電子の数の違いである。



最外殻に電子の隙間がある。

金属結晶の電子構造

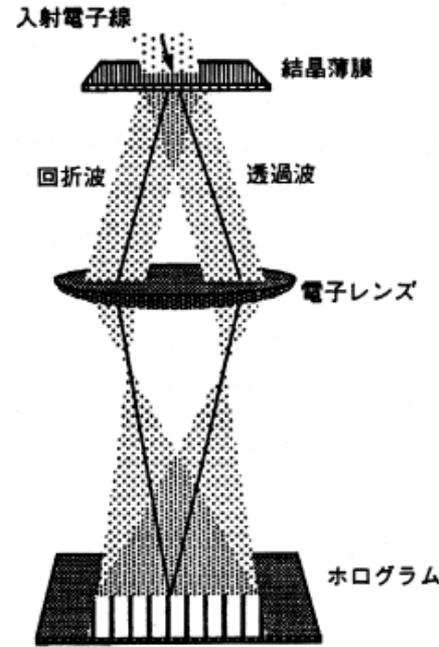
波としての電子

2個の電子が作る干渉パターンや、光電子のエネルギーが波長に依存する事実は、物質が波の性質を持つことを示している。電子に限らず、あらゆる物体は波としての性質を持っていて、その運動量 p とエネルギー E は、波の波数 k と周波数 ν と結びついていることが知られている。

$$E=h\nu$$

$$p=hk$$

比例定数 h はプランク定数。



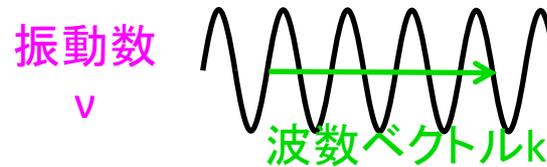
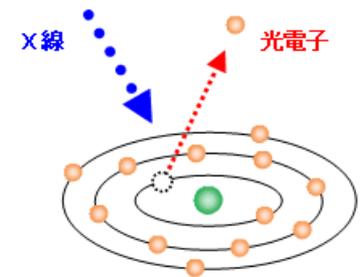
電子の干渉パターン

光電子のエネルギー E_a は仕事関数を ϕ とすると、

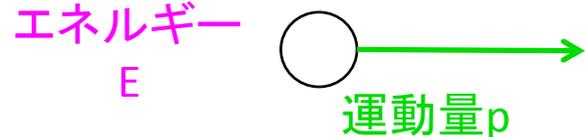
$$E_a=h\nu-\phi$$

となる。

光電子の発生原理



微視的なイメージ



巨視的なイメージ

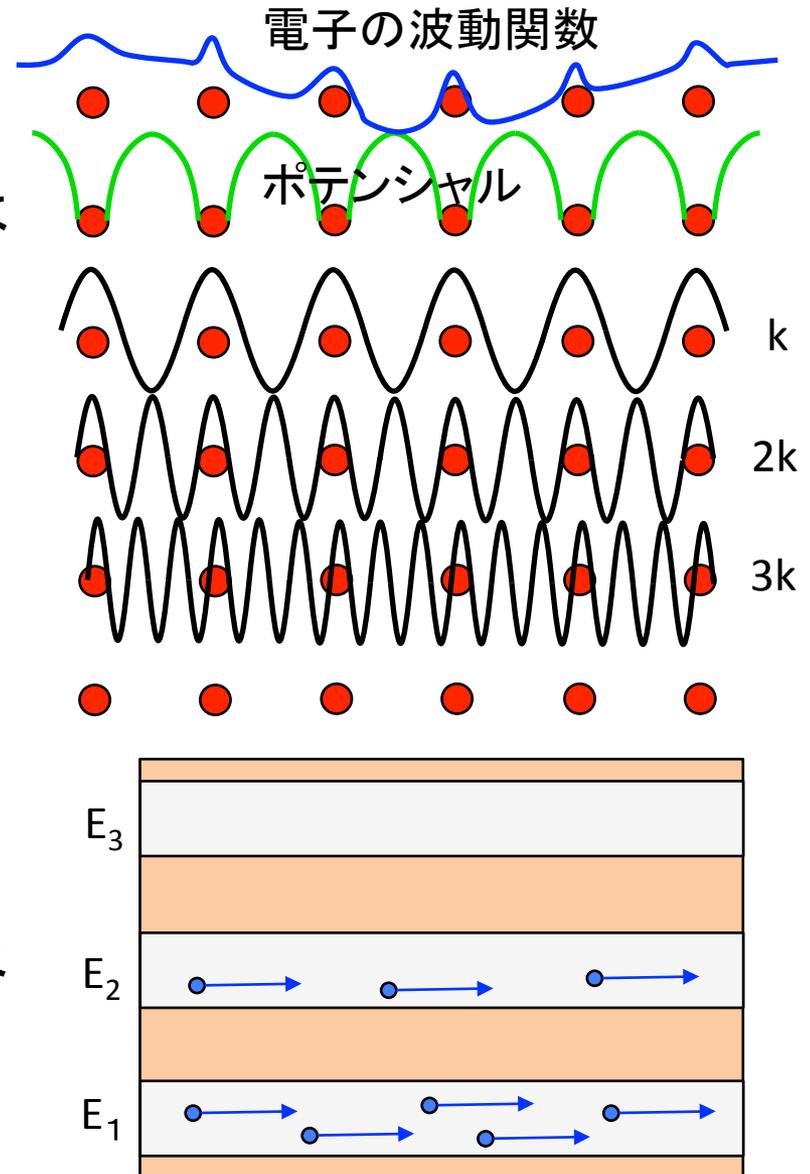
ブロッホ関数

金属のような結晶中では、原子核が周期的な電氣的ポテンシャルを作っている。そこを通過する電子のような荷電粒子は、波動関数がポテンシャルと干渉するため、**結晶周期の整数分の1の波長を持つ**。このような波動関数をブロッホ関数と呼ぶ。

波長とその逆数である波数 k が量子化される(基準波数 \times 整数になる)ため、結晶中の電子は、特定のエネルギー E しか持ち得ない。

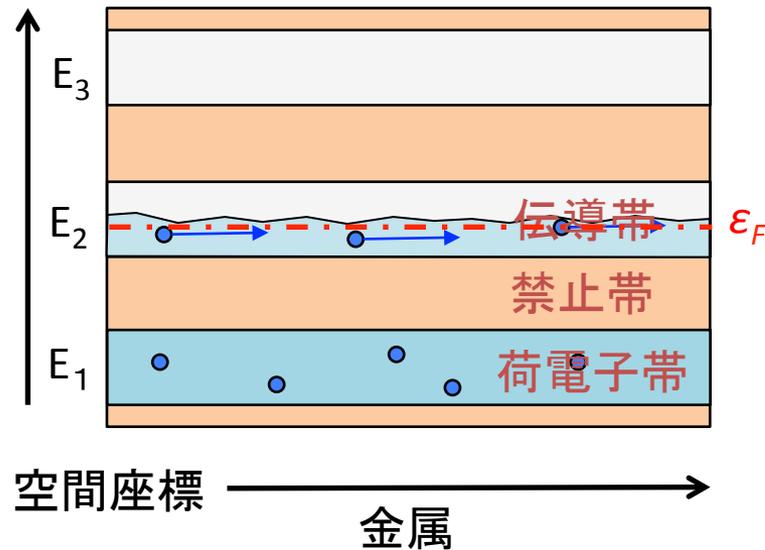
$$E = \hbar\omega = \hbar kc$$

実際の電子のエネルギーは、結晶格子の熱振動により、ある幅を持つ。



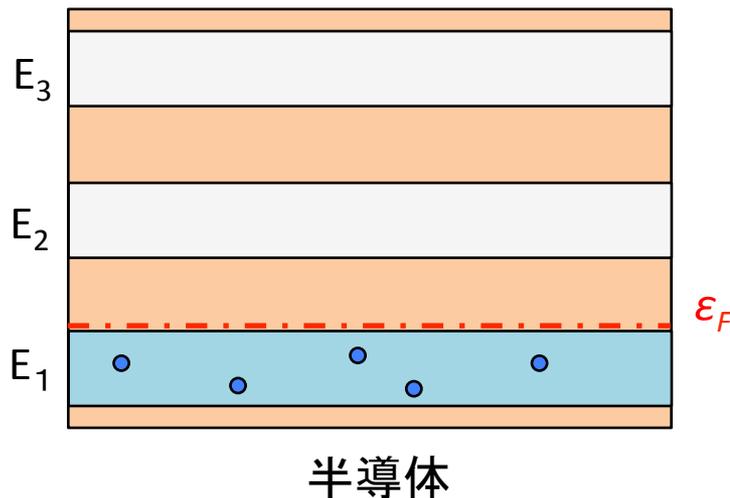
エネルギー・バンド

電子の
エネルギー



結晶中の電子が取り得る、幅のあるエネルギー準位をエネルギーバンドと呼ぶ。金属や半導体の自由電子はバンド構造を取っている。

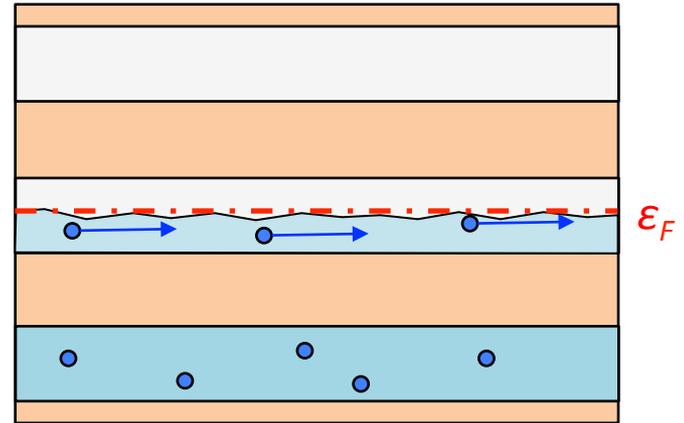
各原子には陽子数の電子が存在するので、一定のエネルギーレベルまでを電子が水のように埋める。その水面をフェルミ準位 ϵ_F と呼ぶ。水面がバンド(伝導体)の途中にあると、電子はそのバンド中を自由に移動できる(金属)。水面がバンドとバンドの間の禁止帯にあると、埋まったバンドの電子は移動できない(半導体)ので、半導体は抵抗が大きい。



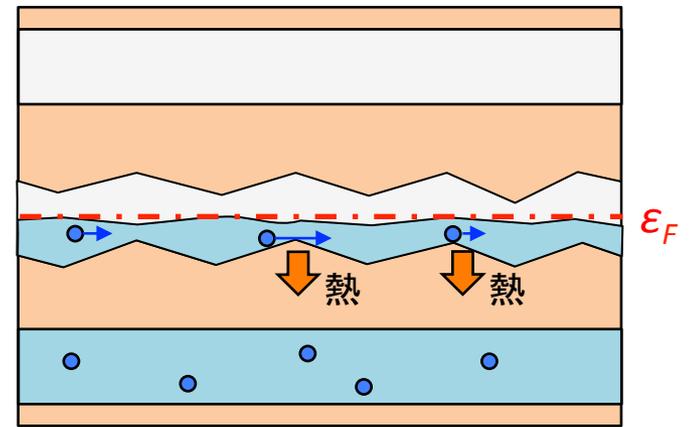
金属

金属中の電子は、半分埋まった最外殻電子軌道を通して、隣接する原子間を渡り歩く。最外殻の軌道が埋まっていると、電子は移れないので金属にはならない。

金属の最上位のバンドは自由に動ける電子が豊富で、伝導帯と呼ばれる。完全な周期構造を正弦波の電子が通過するなら電気抵抗は存在しない(超伝導)はずだが、実際はクーロンポテンシャルとの干渉、結晶構造の欠陥や熱運動によって電子の波が散乱されて、エネルギーの散逸が起こる。このため、金属では温度が上がるほど電気抵抗は増加する。



低温

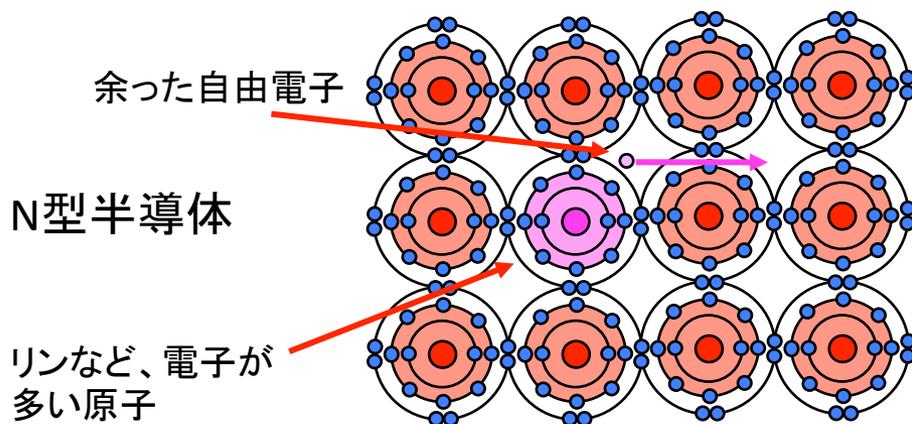


高温

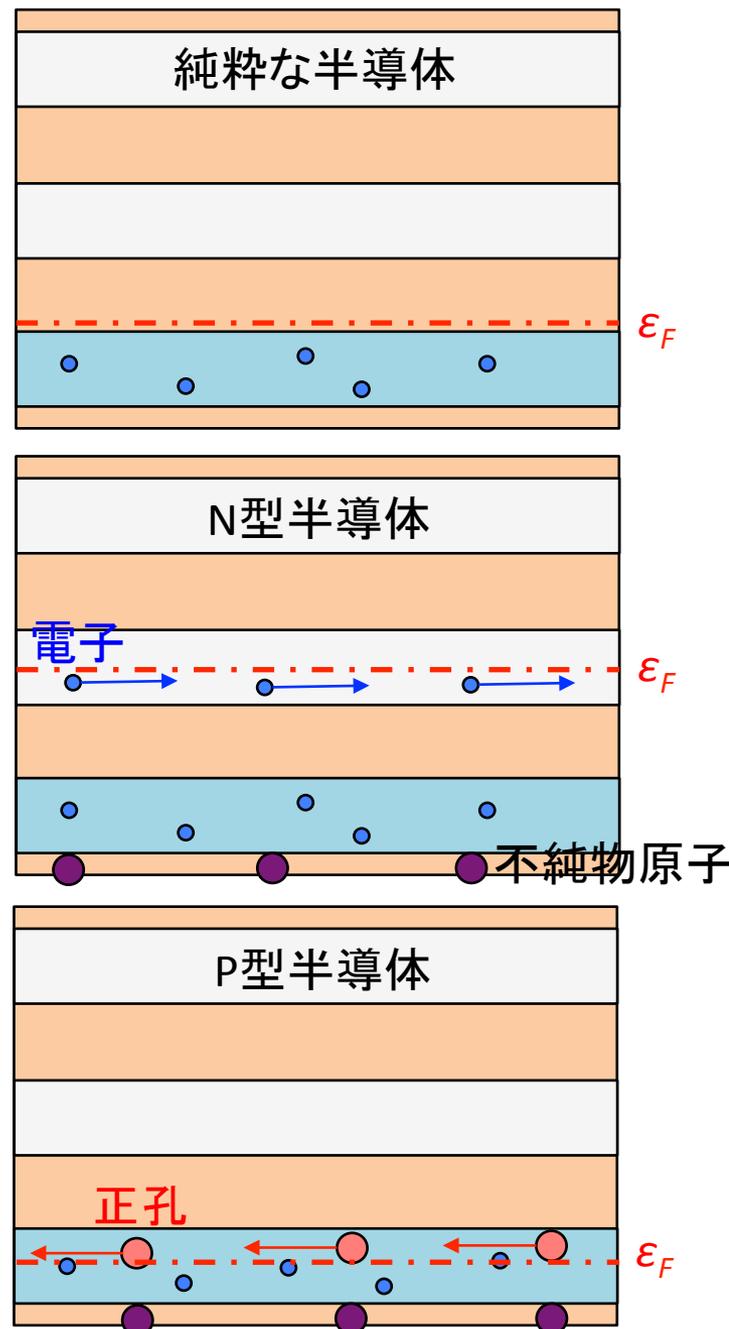
半導体

半導体(C, Si等)は結晶構造を作る際に、電子対が最外殻の電子軌道をぴったり埋めるため、電子が隣り合う軌道間で移動する余地がない。このため、基本的には電流が流れない。

しかし、半導体に電子が多めの不純物原子を少し混ぜ込むと、余った電子が発生して、電流が流れるようになる。(Negative: N型半導体)



逆に電子が不足した原子を混ぜると、電子が不足した穴が発生する。孔は正の電荷を持つ泡のようなもので、正孔と呼ばれる。正孔も電流を流すことができる。(Positive: P型半導体)



おまけ：座標空間と逆格子空間

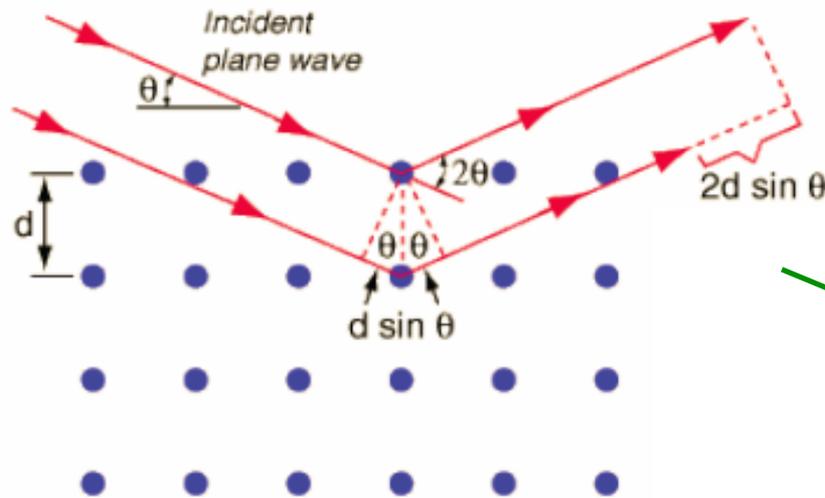
半導体について詳細を勉強したい場合、逆格子空間(波数空間)のイメージを把握することが重要になる。波数は座標の逆数であり、電子の運動量でもある。周期的な格子空間を持つ結晶は、逆格子空間を用いてその性質を考えた方が便利な場合が多い。例えば

X線結晶回折の散乱パターンは逆格子空間の電子分布で、結晶面は逆格子の座標で表される。

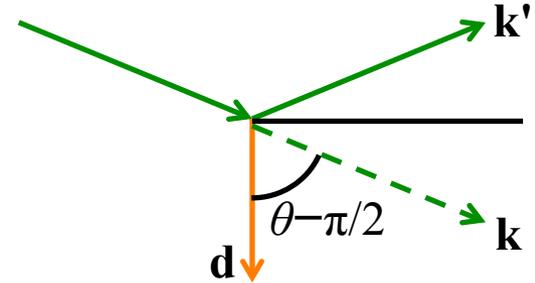
結晶のバンド構造(電子のエネルギー分布)は逆格子空間内の運動量に対するエネルギーで表される。

ブラッグの法則

格子間隔 d の結晶に光が入射角 θ で入射すると、各結晶面で散乱が起きる。



回折パターン
 $\alpha(\mathbf{k})$



ブラッグの法則:
2層からの反射波の通過距離差 $2d \sin(\theta)$ が波長の整数倍なら反射は増強される。

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$$2dk \sin \theta = 2\pi n \quad (k=2\pi/\lambda)$$

格子面の差ベクトルを \mathbf{d} 、入射光、反射光の波数ベクトルを \mathbf{k} 、 \mathbf{k}' とすると、内積 $\mathbf{d} \cdot \mathbf{k}$ は

$\mathbf{d} \cdot \mathbf{k} = dk \cos(\theta - \pi/2) = dk \sin \theta$
になる。同様に

$$\mathbf{d} \cdot \mathbf{k}' = -dk \sin \theta.$$

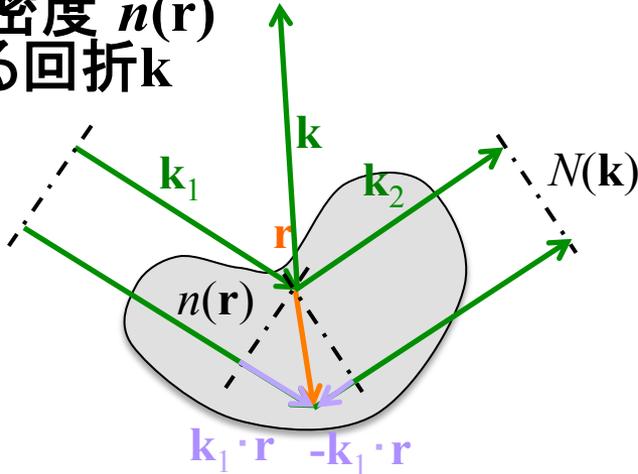
これらをブラッグの式に代入。

$$\mathbf{d} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{k}' = 2dk \sin \theta = 2\pi n$$

$$\mathbf{d} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi n \quad : \text{干渉の条件}$$

X線結晶回折

電子密度 $n(\mathbf{r})$
による回折 \mathbf{k}



X線は電子密度の高い部分で散乱される。位置座標 \mathbf{r} 分離した二点で散乱された光の光路差が波長の整数倍のになると干渉で強め合う。

電子密度分布 $n(\mathbf{r})$ によって回折が起きると、回折パターン $N(\mathbf{k})$ が発生する。

光路差分の位相変化は、波数 \mathbf{k} と位置の差 \mathbf{r} の内積になる。

$$\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$$

\mathbf{k} は波数の変化分、 \mathbf{r} は電子分布の座標である。

回折パターン $N(\mathbf{k})$ は、波の位相変化、 $\exp(-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ を、電子密度関数 $n(\mathbf{r})$ の重みを掛けて足し合わせたもので、全空間の \mathbf{r} による積分になる。

$$N(\mathbf{k}) = \int n(\mathbf{r}) \exp(-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

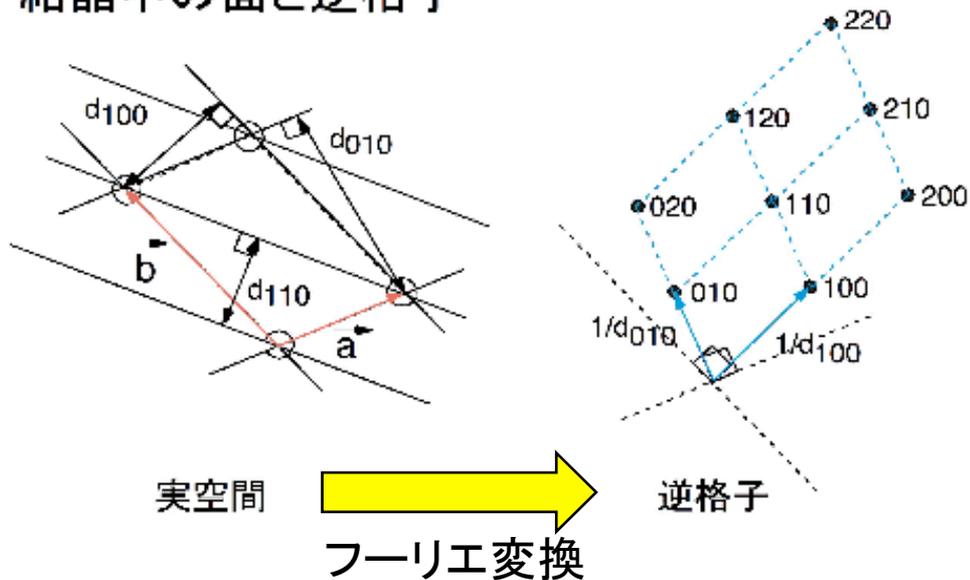
この計算は、実は座標空間 \mathbf{r} から波数空間 \mathbf{k} への空間フーリエ変換を意味する。

光の散乱は、実空間の対象を波数空間に投影する、フーリエ変換なのである。

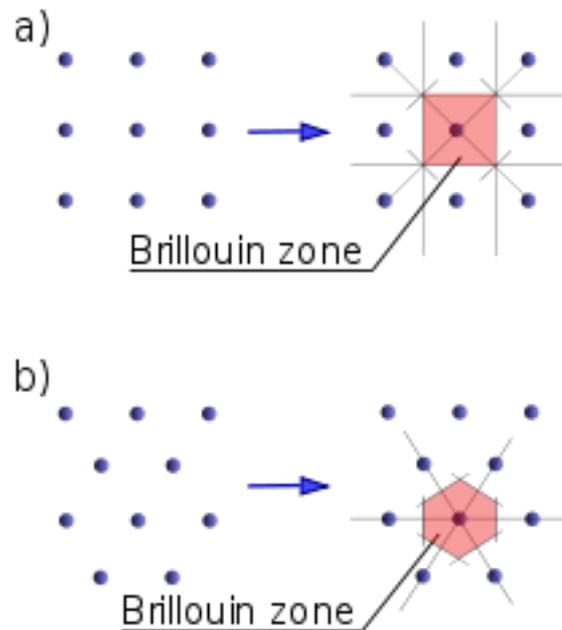
逆格子空間とブリルアンゾーン

逆格子

- 結晶中の面と逆格子

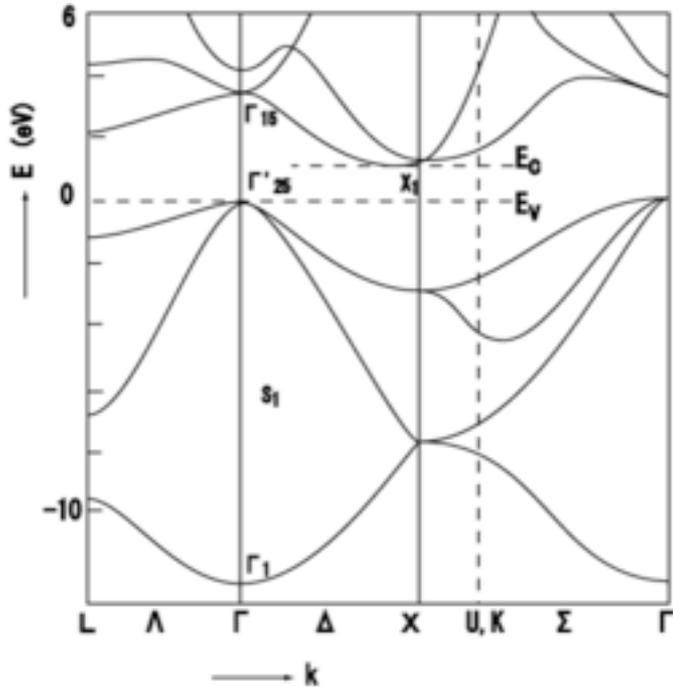


実空間の格子はいくつもの平行な面を作り出す。免ごとに、その周期性に従って、逆格子空間内の回折像ができる。面の方位を逆格子空間の座標で表したのが面指数である。



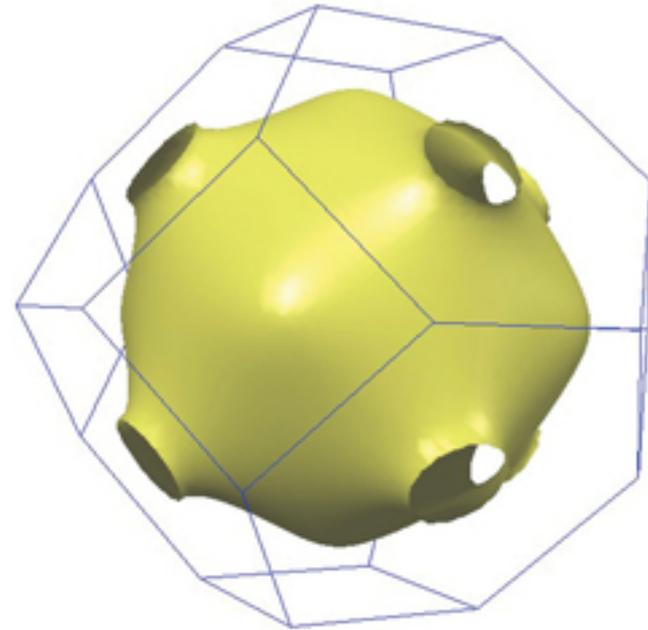
逆格子空間内の単位格子(最小の繰り返し構造)は、実空間の格子定数、以上の波長(以下の運動量)の全電子状態を含んでいる。この逆格子空間内の領域をブリルアンゾーンと呼ぶ。ブリルアンゾーンの外側は、整数倍の運動量を持つ電子状態を表す。

バンド構造



シリコン結晶のバンド構造

横軸は波数 k 、縦軸はバンド内の電子のエネルギー E 。点 Γ を0として、波数=運動量と共にエネルギーが高くなり、ブリルアンゾーンの境界で折り返す。最外殻の電子軌道にはほぼ同じエネルギーと運動量の電子がつかまっていて、そのエネルギーに対応する軌道の半径によって格子定数が定まる。



シリコン結晶のフェルミ面

結晶には多数の対称面があるため、実際のブリルアンゾーンは方向ごとに違っている。その重ね合わせは曲面を作る。フェルミ準位の電子が格子定数を定めるため、最外殻電子の運動量はブリルアンゾーンの境界に分布する。この逆格子空間内の境界面をフェルミ面と呼ぶ。