

現状の不純物・欠陥の評価方法 1

以下、n 型半導体について議論する。

・ドナーが 1 種類だけ存在する場合

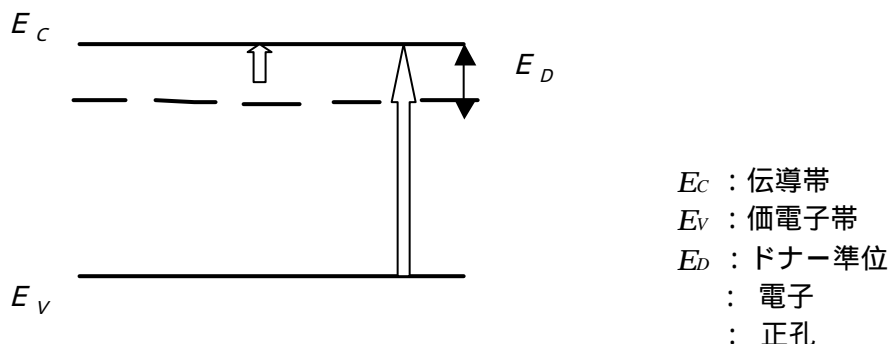


図 1 エネルギー帯図

図 1 において、電荷中性条件は

$$n(T) = N_{D^+} + p \quad (1)$$

$n(T)$ は多数キャリア密度の温度依存性、 N_{D^+} はイオン化したドナー、 p は少数キャリアの密度を表している。図 1 の過程での励起 (少数キャリアの正孔密度が影響を与えない) が無視できる低温では、(1) 式は

$$\begin{aligned} n(T) &= N_{D^+} \\ &= N_D \cdot f_h(E_D) \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 N_D はドナー密度、 $f_h(E_D)$ はドナー準位における正孔の占有確立である。また、Fermi-Dirac の分布関数において

$$f(E_D) + f_h(E_D) = 1 \quad (3)$$

の関係が成り立つ。

ここまでの議論で用いてきた Fermi-Dirac の分布関数は

$$f(E_D) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_F - E_D}{kT}\right)} \quad (4)$$

で表され、 $\frac{1}{2}$ の係数はドナー準位におけるスピンを考慮したものである。

伝導帯の電子濃度 $n(T)$ は伝導帯の下端から上端までの全エネルギーを積分すれば求まる。また、Fermi-Dirac の分布関数 $f(E)$ はフェルミ準位が伝導帯の下端 E_C よりも数 kT 以上離れている場合、Maxwell-Boltzmann の分布関数 $f_M(E_D)$ で近似できる。

$$\begin{aligned}
n(T) &= \int_{E_c}^{\infty} f(E) \cdot N(E) dE \\
&\cong \int_{E_c}^{\infty} f_M(E) \cdot N(E) dE \\
&= \int_{E_c}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_F - E}{kT}\right) \cdot \left\{ \frac{4}{h^3} (2m^*)^{3/2} (-E)^{1/2} \right\} dE \\
&= 2 \left(\frac{2 m^* kT}{h^2} \right)^{3/2} M_c \cdot \exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \quad ()
\end{aligned}$$

$$N_c(T) = 2 \left(\frac{2 m^* kT}{h^2} \right)^{3/2} M_c \quad (5)$$

$N(E)$ は伝導帯の状態密度、 m^* は電子の有効質量、 h はプランク定数、 M_c は伝導帯の等価な谷の数、 $N_c(T)$ は有効状態密度。

()の導出には、 $\int_{E_c}^{\infty} x^{1/2} \exp(-ax) dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ の公式を利用した。

(2)式と(5)式より、

$$N_D \gg \frac{N_c(T)}{8} \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right) \quad (6)$$

(6)式が成り立つ領域では、

$$n(T) \cong T^{3/4} \left(\frac{2 m^* k}{h^2} \right)^{3/4} \sqrt{M_c} \sqrt{N_D} \exp\left(-\frac{E_D}{2kT}\right) \quad (7)$$

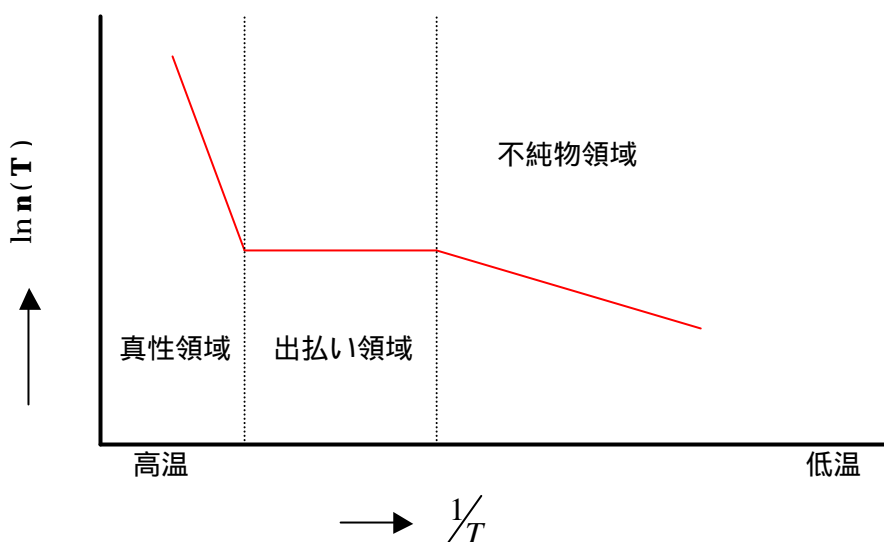


図2 n型半導体における電子濃度の温度依存性

(7)式で表されるのは図2において不純物領域である。傾きから E_D 、切片から N_D がわかる。温度が上がれば $n(T)$ も増加し、やがて傾きが0となる。この原因はドナー準位の電子が0となり励起されなくなったためである。その後、真性領域と呼ばれる領域では急激に $n(T)$ が増加する。これは、高温のため価電子帯にある電子が励起してきたためである。

(ドナー準位の電子濃度 \ll 価電子帯の電子濃度)

(補足) 伝導帯の等価な谷の数 M_c とは

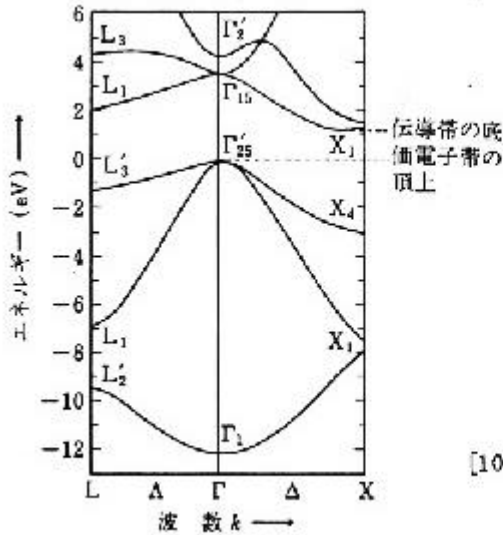


図3 Siのバンド構造

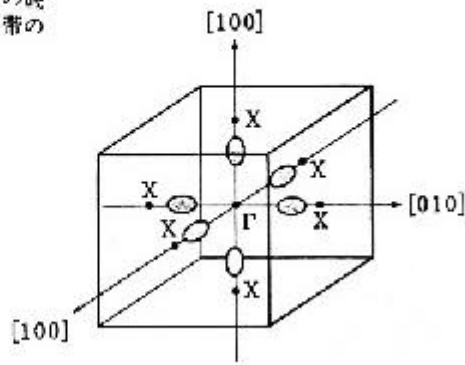


図4 Siの伝導帯の等エネルギー面

価電子帯にある電子は外部からのエネルギーを得て直接伝導帯に励起する。しかし、図3を見てみると、伝導帯の底は価電子帯の頂上と同じ k の値のところがない。電子は低いエネルギー準位から埋めようとするので、図3でいう x の方向のエネルギー（量子的な格子運動）も必要となる。

図3のエネルギー構造と図4の各エネルギー面とは対応しており、同様に考えていくと伝導帯の等価な谷（一番低いエネルギー準位）は6つ存在している事がわかる。

つまり、 M_c とは物質固有の値であり、Siの場合は6である。ちなみに、Geは4である。

参考文献 半導体工学シリーズ 半導体の物理 [改訂版]
西澤潤一編 御子柴宣夫著

図3、図4は参考文献より引用させていただきました。