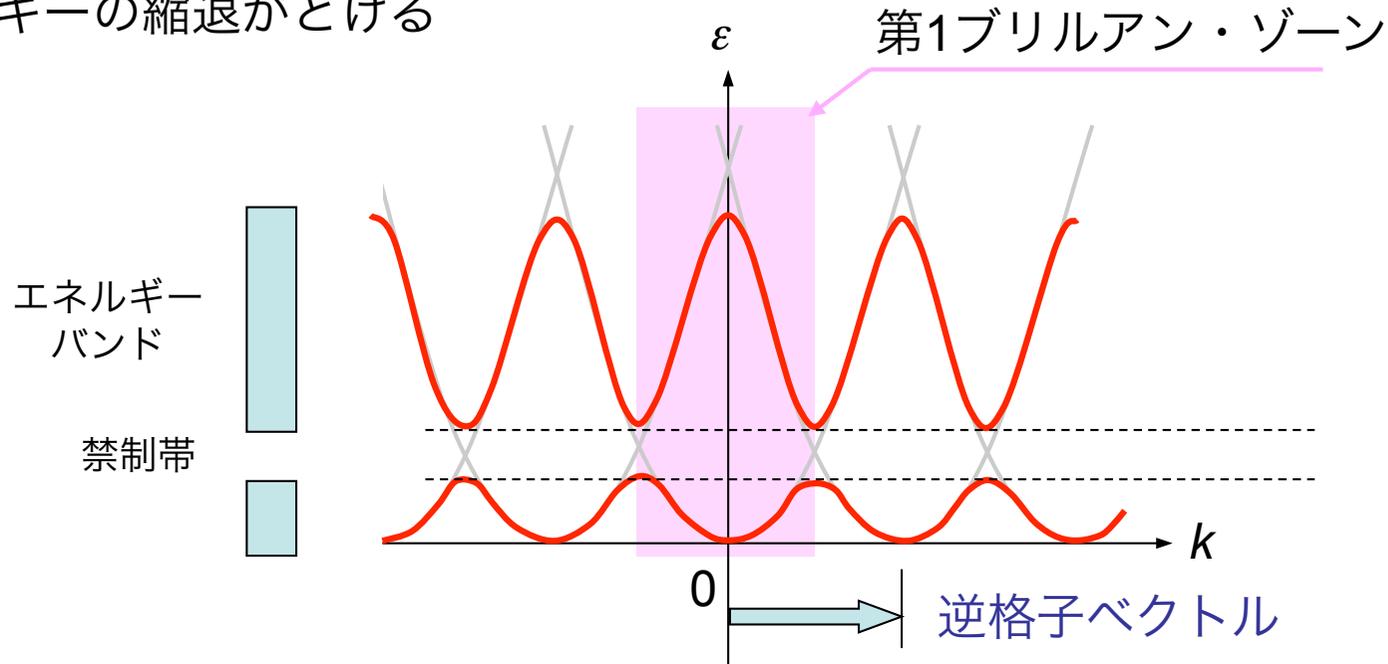


固体電子工学

第 1 1 回 電子の運動と輸送現象

固体の中の電子の運動

- k 空間で逆格子ベクトルの周期性を持つ
 - ブリルアン・ゾーンの境界でエネルギーの縮退がとける
- ⇒ エネルギー・バンド、禁制帯（エネルギー・ギャップ）の形成



電子の速度 $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$

運動方程式 $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F}$

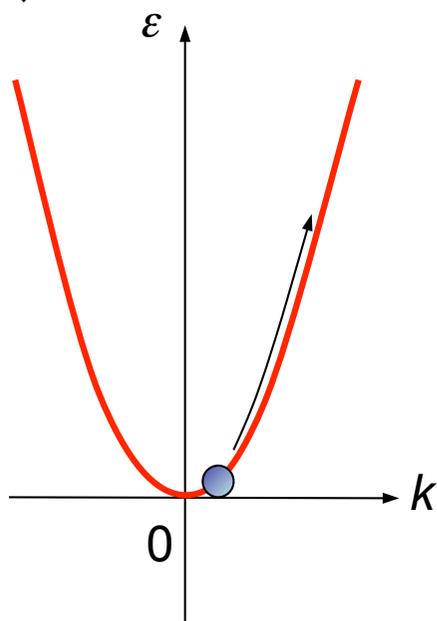
電場の中での電子の運動

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{E}$$

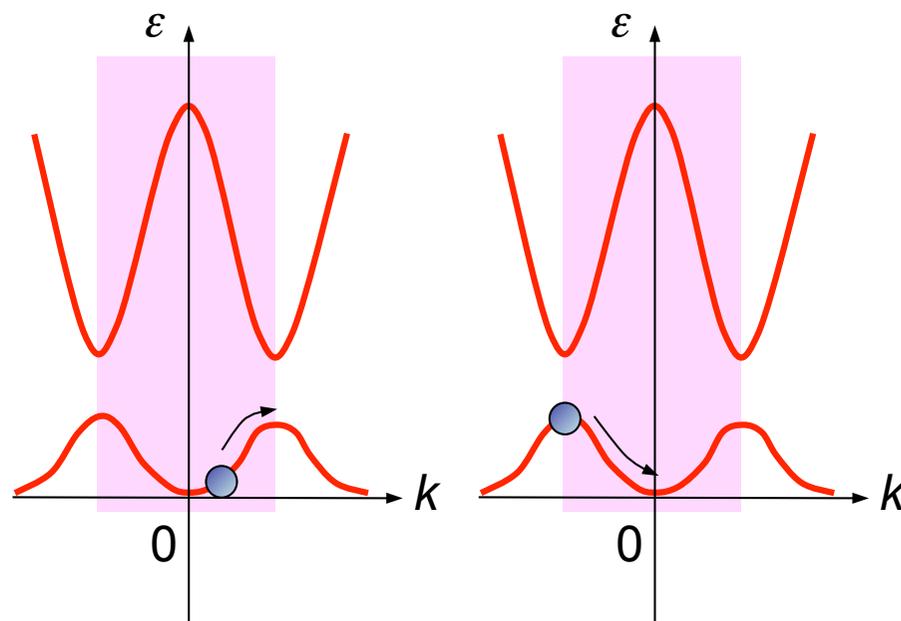
電場 : \vec{E}

素電荷 : q

自由な電子であれば電子はどこまでも加速されていく

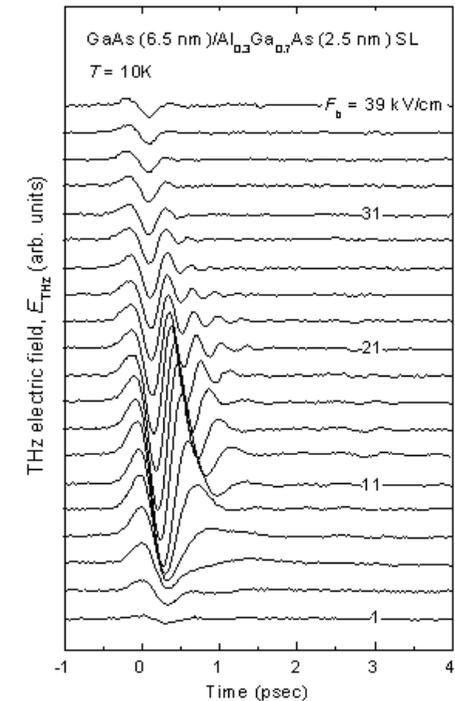
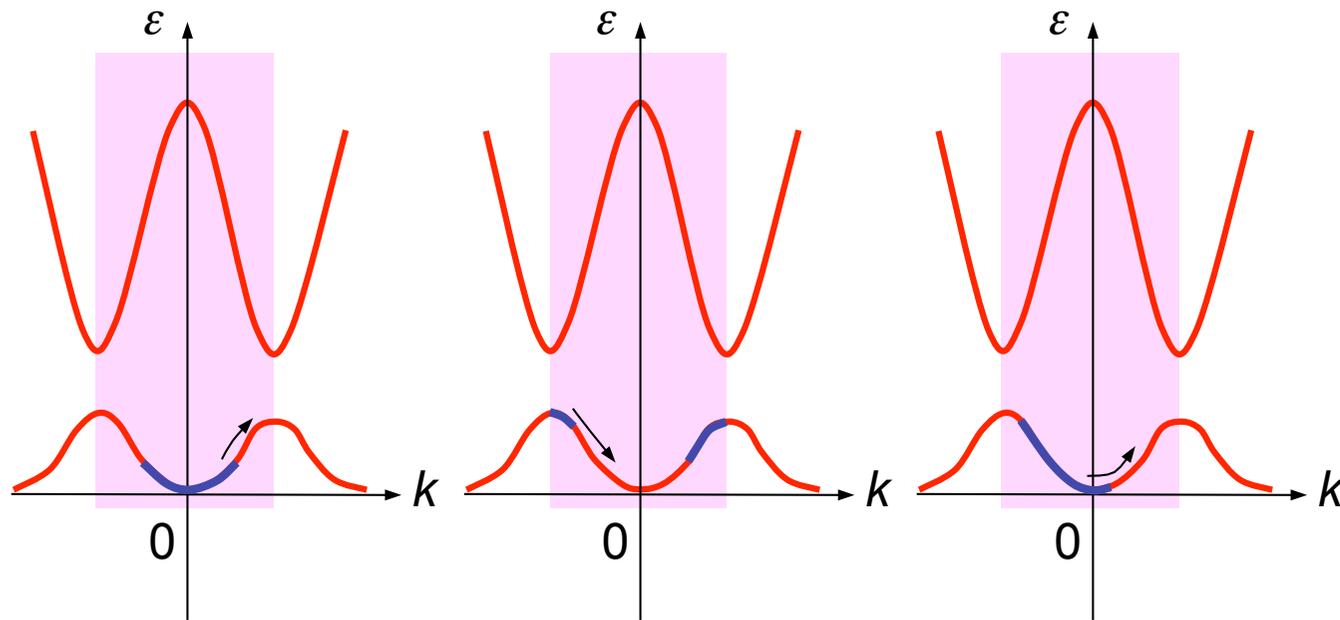


固体の中では電子はバンドの中を周期的に運動（ブロッホ振動）



ブロッホ振動

実際にはある領域の状態を占めた電子の集団がバンドの中を周期的に運動している



GaAs/AlGaAs超格子構造中のブロッホ振動により、外部に放射されたTHz電磁波放射の時間波形。印加電界とともに振動周期が短くなっていることがわかる

(東大平川教授による <http://thz.iis.u-tokyo.ac.jp/>)

電場の中での電子の運動（散乱のある場合）

現実には、固体の中で電子は散乱を受ける

不純物原子
格子振動（フォノン）
電子－電子相互作用

散乱は確率的であり、電子は多数存在するので、電子の分布関数を扱うのが便利

電子の分布関数 $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$

時刻 t において、位置が \vec{r} と $\vec{r} + d\vec{r}$ の範囲にあって、
波数が \vec{k} と $\vec{k} + d\vec{k}$ の範囲にある粒子の数

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) d\vec{r} d\vec{k}$$

ボルツマン方程式

電子の分布関数の時間変化

散乱が無い場合：粒子の運動に伴う分布の変化

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{k}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}, t)\end{aligned}$$

散乱が有る場合：散乱の効果を緩和時間で表わす

$$\frac{d}{dt} f(\vec{r}, \vec{k}, t) = -\frac{1}{\tau} [f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_{eq}(\vec{r}, \vec{k})] \quad f_{eq} : \text{平衡状態の分布関数}$$

⇒ ボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = -\frac{f - f_{eq}}{\tau}$$

電場の中での電子の分布 (散乱のある場合)

ボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\hbar}{m^*} \vec{k} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = -\frac{f - f_{eq}}{\tau}$$

定常状態、均一な物質： f は時間 t 位置 \vec{r} に依らない

$$-\frac{q}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = -\frac{f - f_{eq}}{\tau}$$

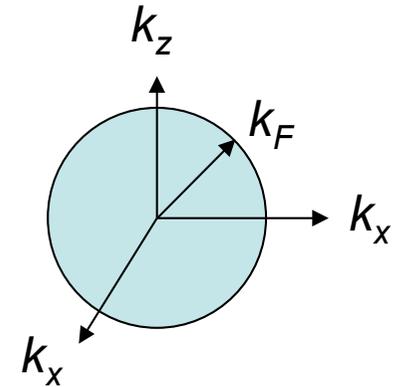
⇒

$$f(\vec{k}) = f_{eq}(\vec{k}) + \frac{q\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \cong f_{eq}\left(\vec{k} + \frac{q\tau}{\hbar} \vec{E}\right)$$

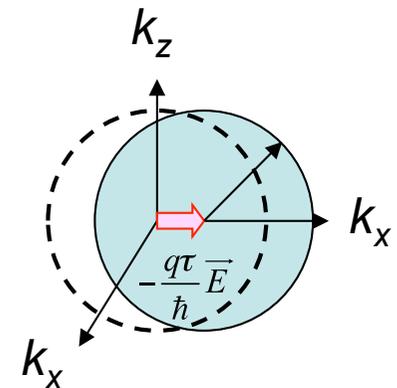
電流密度

$$\vec{j} = -q \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{\hbar \vec{k}}{m^*} f(\vec{k}) d\vec{k}$$

$$= \frac{nq^2\tau}{m^*} \vec{E} \quad \Rightarrow \quad \text{電気伝導度} \quad \sigma = \frac{nq^2\tau}{m^*}$$

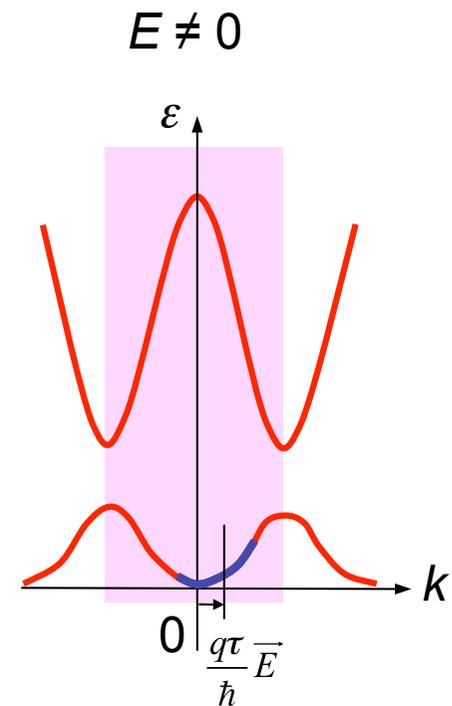
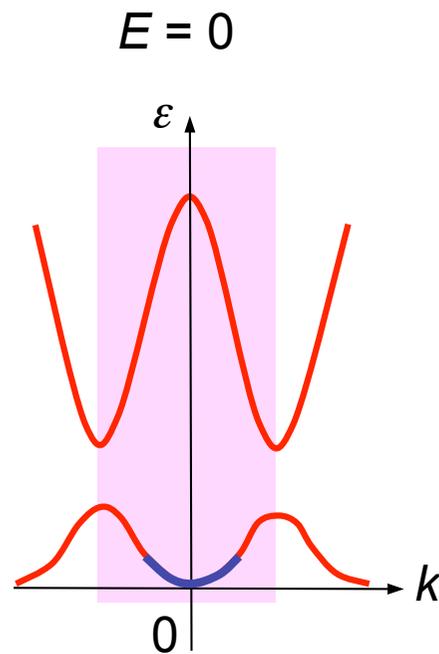


$$f_{eq}(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar^2 k^2 / 2m^* - \mu}{k_B T}} + 1}$$



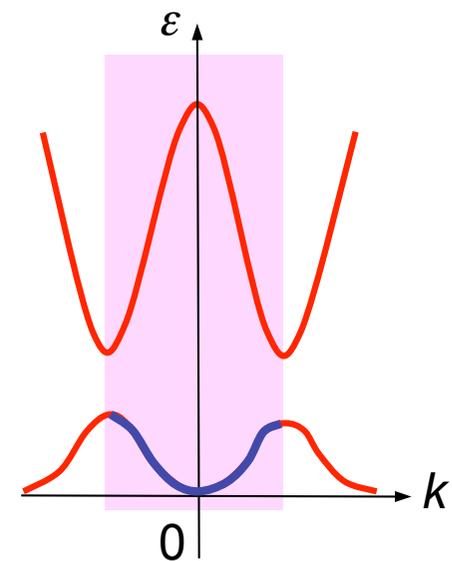
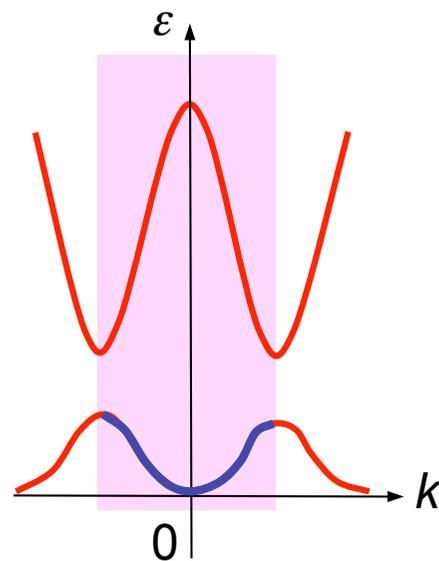
金属

1つのバンドの状態を電子が部分的に占めている



絶縁体

1つのバンドのすべての状態を電子が占めている



ボルツマン方程式と流体方程式

電子の分布関数 $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ を直接求めるのは困難

ゆっくり変化している物理量の平均値を計算する

指針：保存則

電子数の保存 \Rightarrow 電子濃度 n

運動量の保存 \Rightarrow 電流密度 \vec{j}

エネルギーの保存 \Rightarrow 温度 T

これらの物理量を支配している式 = 流体方程式

連続の式 $\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$

輸送方程式 $\vec{j} = -q\mu n \vec{E} + qD \nabla n$

熱伝導の式 $\lambda \frac{\partial}{\partial t} (nT) = \kappa \nabla^2 T + \vec{j} \cdot \vec{E}$

局所平衡状態

f_{eq} : 平衡状態の分布関数

$$f_{eq}(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar^2 k^2 / 2m^* - \mu}{k_B T}} + 1}$$

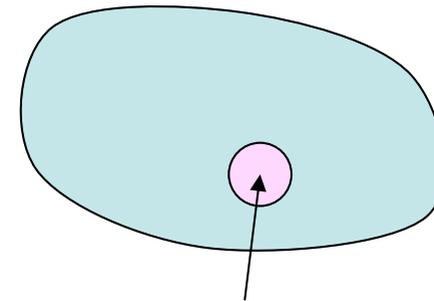
局所平衡状態の分布関数

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar^2 (\vec{k} - \vec{k}_l)^2 / 2m^* - \mu_l}{k_B T_l}} + 1}$$

局所フェルミ準位 μ_l \Leftrightarrow 電子密度

局所波数ベクトル \vec{k}_l \Leftrightarrow 電流密度

局所温度 T_l \Leftrightarrow 温度



電子の分布は、その場所の電子密度、電流密度、温度を持つ平衡分布とする。ただし、電子密度、電流密度、温度は場所・時間の関数である。

ボルツマン方程式に局所平衡状態の分布関数を適用することにより、流体方程式を導出することができる。

電位

電界

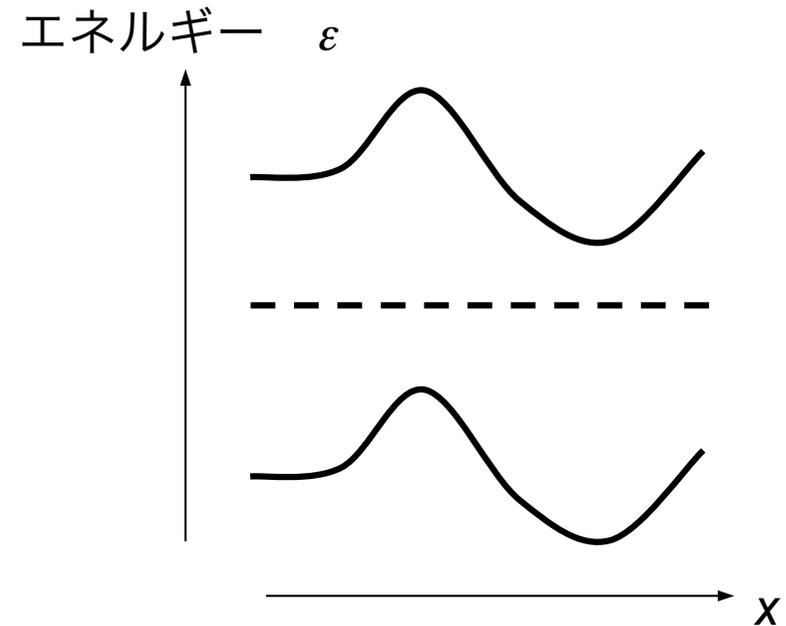
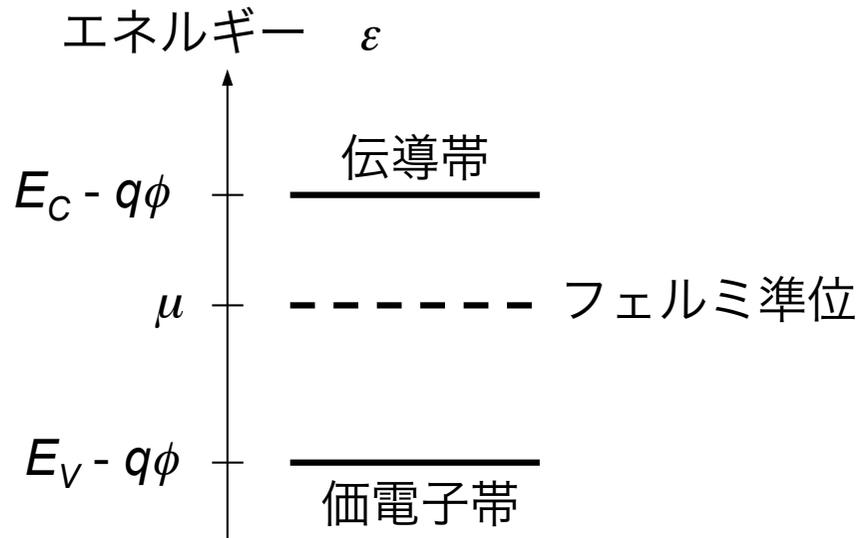
$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$$

ポテンシャル ϕ

電界による電子のエネルギー $= -q\phi$

素電荷 : q

電位が空間的に変化しているとき



* 電流 = 0 \iff フェルミ準位 = 一定

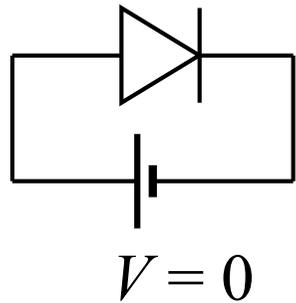
電界の中での電子・ホール密度

$$\begin{array}{ccc} n = n_{ie} \exp\left(-\frac{\mu_i - \mu}{k_B T}\right) & \begin{array}{c} \text{ポテンシャル}\phi \\ \text{がある場合} \end{array} & n = n_{ie} \exp\left(-\frac{-q\phi + \mu_i - \mu}{k_B T}\right) \\ p = n_{ie} \exp\left(\frac{\mu_i - \mu}{k_B T}\right) & \longrightarrow & p = n_{ie} \exp\left(\frac{-q\phi + \mu_i - \mu}{k_B T}\right) \end{array}$$

更に $\mu - \mu_i = -q\phi_F$ とおくと

$$\begin{array}{l} n = n_{ie} \exp\left(q \frac{\phi - \phi_F}{k_B T}\right) \\ p = n_{ie} \exp\left(-q \frac{\phi - \phi_F}{k_B T}\right) \end{array}$$

p n 接合 (電圧 = 0)



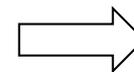
外部電圧 $V =$ フェルミ準位の差
 \neq 電位の差

p 型半導体の領域

$$p = n_{ie} \exp\left(-q \frac{\phi_R - \phi_F}{k_B T}\right) \cong N_A$$

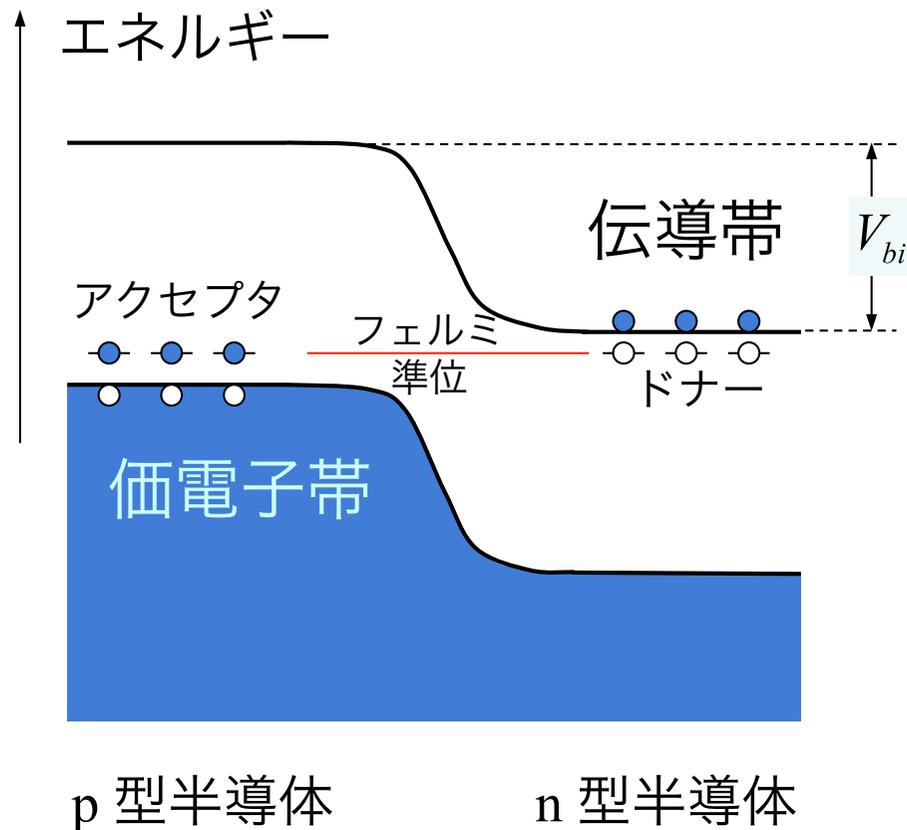
n 型半導体の領域

$$n = n_{ie} \exp\left(q \frac{\phi_L - \phi_F}{k_B T}\right) \cong N_D$$

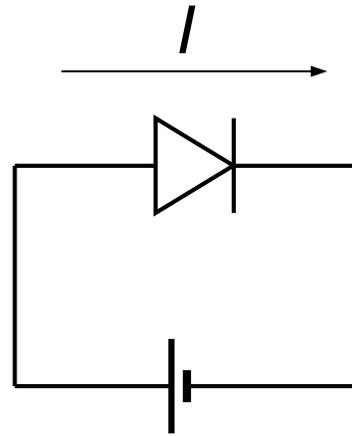


$$V_{bi} = \phi_L - \phi_R \cong \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_{ie}^2}\right)$$

ビルトイン・ポテンシャル



p n 接合 (電圧 $\neq 0$)



$$V \neq 0$$

電流 I はどのように求められるのだろうか？

電流密度

$$\vec{j}_n = -q\mu_n n \vec{E} + qD_n \nabla n$$

$$\vec{j}_p = q\mu_p p \vec{E} - qD_p \nabla p$$

Einstein の関係式

$$D_n = \frac{k_B T}{q} \mu_n \quad D_p = \frac{k_B T}{q} \mu_p$$

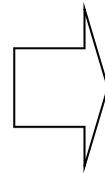
$$\left. \begin{aligned} n &= n_{ie} \exp\left(q \frac{\phi - \phi_n}{k_B T}\right) \\ p &= n_{ie} \exp\left(-q \frac{\phi - \phi_p}{k_B T}\right) \end{aligned} \right\} \text{とおくと}$$
$$\vec{j}_n = -q\mu_n n \nabla \phi_n$$
$$\vec{j}_p = -q\mu_p p \nabla \phi_p$$

擬フェルミ準位

平衡状態

非平衡状態も含む拡張

$$n = n_{ie} \exp\left(q \frac{\phi - \phi_F}{k_B T}\right)$$



$$n = n_{ie} \exp\left(q \frac{\phi - \phi_n}{k_B T}\right)$$

$$p = n_{ie} \exp\left(-q \frac{\phi - \phi_F}{k_B T}\right)$$

$$p = n_{ie} \exp\left(-q \frac{\phi - \phi_p}{k_B T}\right)$$

平衡状態では

$$\phi_n = \phi_p = \phi_F$$

ϕ_F : Fermi 準位

ϕ_n, ϕ_p : Imref (擬フェルミ準位)

境界条件

電極とのコンタクトでは平衡状態にあるとして

$$\phi_n = \phi_p = \phi_F = \text{電極の印加電圧}$$

Drift-Diffusion モデル

ポアソン方程式 $\vec{\nabla} \cdot (\epsilon \vec{\nabla} \phi) = -\rho$

キャリア連続の式 $\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_n + G_n - R_n$ G : 電子・ホール対形成

$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_p + G_p - R_p$ R : 電子・ホール再結合

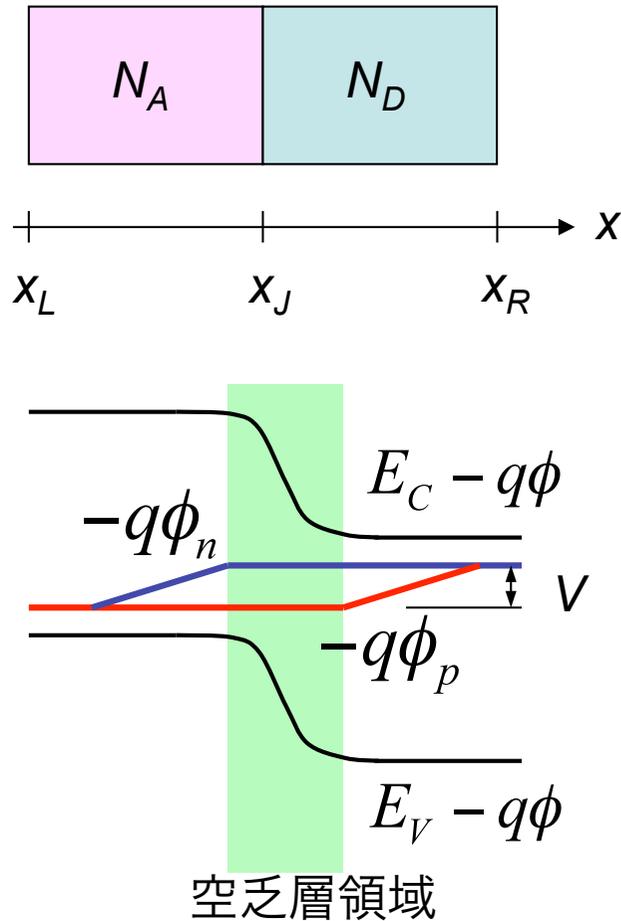
輸送方程式 $\vec{j}_n = -q\mu_n n \vec{\nabla} \phi_n$

$\vec{j}_p = -q\mu_p p \vec{\nabla} \phi_p$

電子・ホールの式 $n = n_{ie} \exp\left(q \frac{\phi - \phi_n}{k_B T}\right)$

$p = n_{ie} \exp\left(-q \frac{\phi - \phi_p}{k_B T}\right)$

p n 接合 (電圧 ≠ 0)



定常状態

電子・ホール対生成、再結合を無視

$$\cancel{\frac{\partial n}{\partial t}} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{j}_n + \cancel{G_n} - \cancel{R_n}$$

$$\cancel{\frac{\partial p}{\partial t}} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{j}_p + \cancel{G_p} - \cancel{R_p}$$

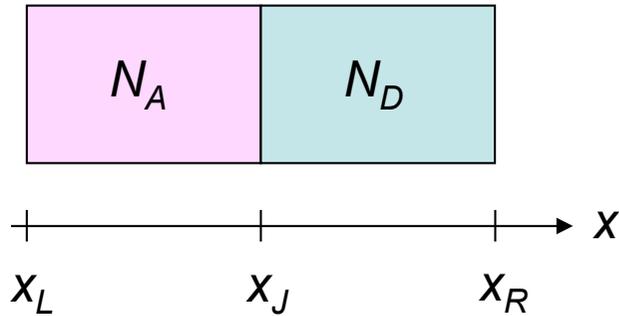
$$\Rightarrow \nabla \cdot \vec{j}_n = 0 \quad \nabla \cdot \vec{j}_p = 0$$

j_n, j_p は場所によらず一定

$$j_n = -q\mu_n n \frac{d\phi_n}{dx}$$

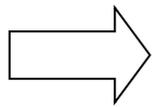
$$j_p = -q\mu_p p \frac{d\phi_p}{dx}$$

p n 接合 (電圧 ≠ 0)



$$j_n = qD_n n_{ie} e^{\frac{q\phi}{k_B T}} \frac{d}{dx} e^{-\frac{q\phi_n}{k_B T}}$$

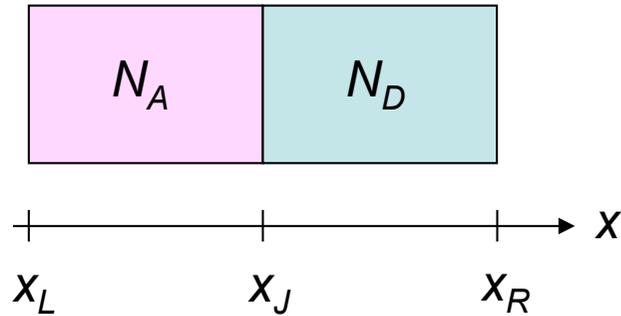
$$j_p = -qD_p n_{ie} e^{-\frac{q\phi}{k_B T}} \frac{d}{dx} e^{\frac{q\phi_p}{k_B T}}$$



$$j_n = \frac{e^{\frac{q}{k_B T} [\phi_n(x_L) - \phi_n(x_R)]} - 1}{\int_{x_L}^{x_R} \frac{e^{-\frac{q}{k_B T} [\phi(x) - \phi_n(x_L)]}}{qD_n n_{ie}} dx}$$

$$j_p = \frac{e^{\frac{q}{k_B T} [\phi_p(x_L) - \phi_p(x_R)]} - 1}{\int_{x_L}^{x_R} \frac{e^{\frac{q}{k_B T} [\phi - \phi_p(x_R)]}}{qD_p n_{ie}} dx}$$

p n 接合 (電圧 ≠ 0)



電極で $\phi_n = \phi_p = \phi_F =$ 外部電圧

$$\phi_n(x_L) = \phi_p(x_L) = V$$

$$\phi_n(x_R) = \phi_p(x_R) = 0$$

$$j_n \cong \frac{e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1}{\int_{x_L}^{x_R} \frac{p}{qD_n n_{ie}^2} dx}$$

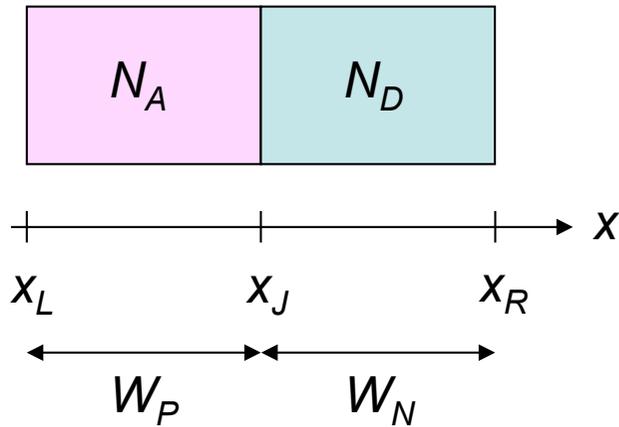
$$j_p \cong \frac{e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1}{\int_{x_L}^{x_R} \frac{n}{qD_p n_{ie}^2} dx}$$

Gummel の式

電流密度

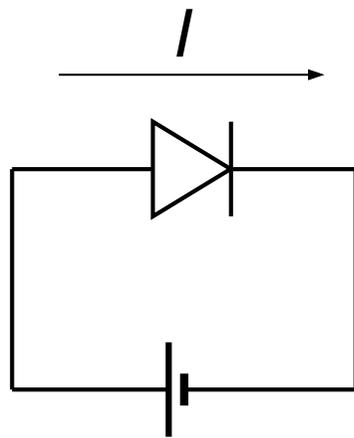
$$j = j_n + j_p \cong \left[\frac{1}{\int_{x_L}^{x_R} \frac{p}{qD_n n_{ie}^2} dx} + \frac{1}{\int_{x_L}^{x_R} \frac{n}{qD_p n_{ie}^2} dx} \right] \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right)$$

pn 接合 (電圧 ≠ 0)

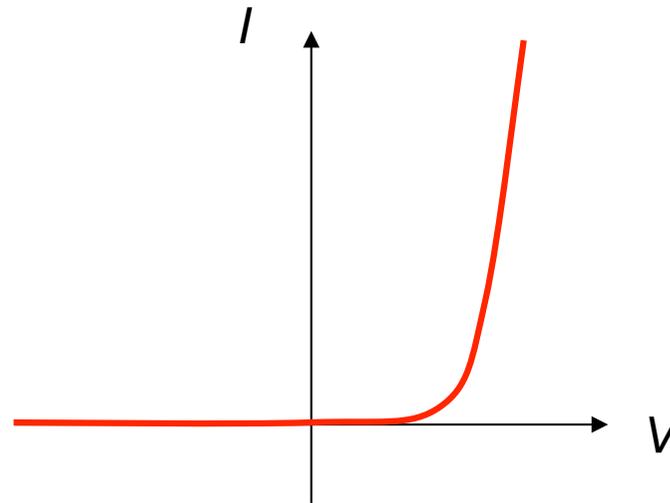


$$j \cong qn_{ie}^2 \left[\frac{D_n}{N_A W_P} + \frac{D_p}{N_D W_N} \right] \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right)$$

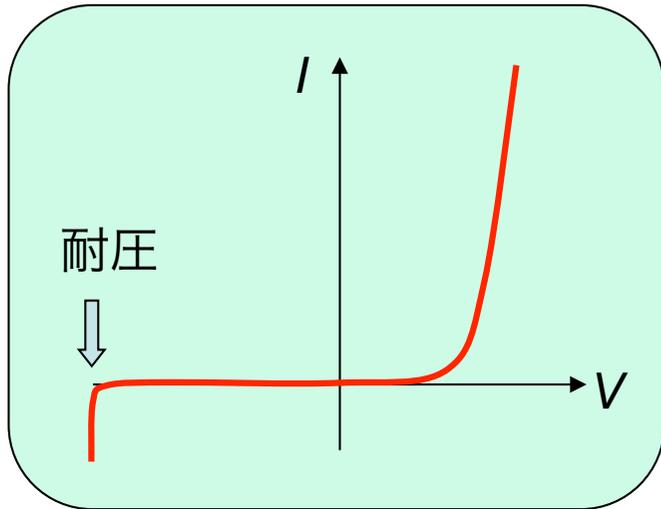
電流 $I = Aj$ A : pn 接合面積



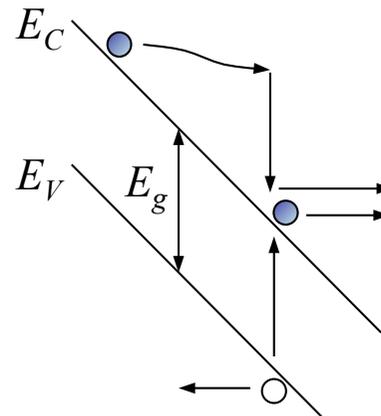
$V \neq 0$



pn 接合の耐圧



なだれ降伏

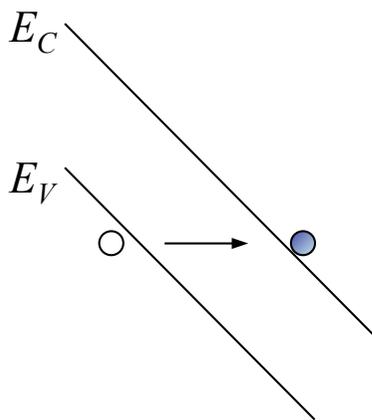


インパクト・イオン化

電子 1 個 ⇨

電子 2 個 + ホール 1 個

ツェナー降伏



バンド間バンド・トンネリング

エネルギーのバランス

電子が電界により加速されてエネルギーを得る

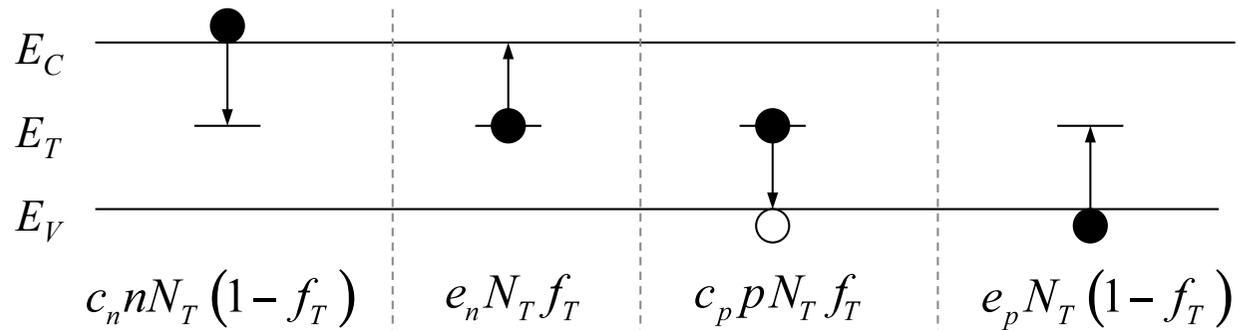
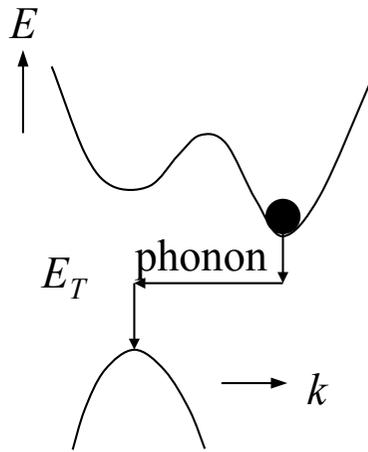
電子が散乱（フォノン）によりエネルギーを失う

電界が強くなると、バランスが崩れ、電子のエネルギーが E_g （バンドギャップ・エネルギー）を超え、インパクト・イオン化が起こる

$$G = \alpha_n J_n + \alpha_p J_p$$

α_n, α_p : インパクト・イオン化
係数

Shockley-Read-Hall (SRH) 再結合



f_T : トラップに電子がある確率
電子減少率 = ホール減少率

$$R = c_n n N_T (1 - f_T) - e_n N_T f_T$$

$$= c_p p N_T f_T - e_p N_T (1 - f_T)$$

$$f_T = \frac{c_n n + e_p}{c_n n + c_p p + e_n + e_p}$$

$$R = N_T \frac{c_n c_p n p - e_n e_p}{c_n n + c_p p + e_n + e_p}$$

熱平衡では更に (詳細釣り合いの法則)

$$c_n n N_T (1 - f(E_T)) = e_n N_T f(E_T)$$

$$c_p p N_T f(E_T) = e_p N_T (1 - f(E_T))$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$$

$$e_n = c_n n_i e^{(E_T - E_i)/kT}$$

$$e_p = c_p n_i e^{-(E_T - E_i)/kT}$$

N_T : トラップ密度

$$c_n = \sigma_n v_{th}$$

$$c_p = \sigma_p v_{th}$$

σ_n, σ_p : 散乱断面積

v_{th} : 熱速度 = $\sqrt{3kT/m^*}$

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p \left(n + n_i e^{(E_T - E_i)/kT} \right) + \tau_n \left(p + n_i e^{-(E_T - E_i)/kT} \right)}$$

$$\tau_p = (N_T c_p)^{-1} \sim 10^{-7} s \quad \tau_n = (N_T c_n)^{-1} \sim 10^{-7} s$$