第５回　固体のバンド構造Ⅱ

※本日の講義のポイント

固体のバンド構造の基礎として、キャリアの濃度がエネルギー方向の確率分布をあらわすフェルミーディラック分布関数とエネルギー方向の密度をあらわす状態密度関数の積で表せることを学ぶ。

<u>キャリアの濃度</u>

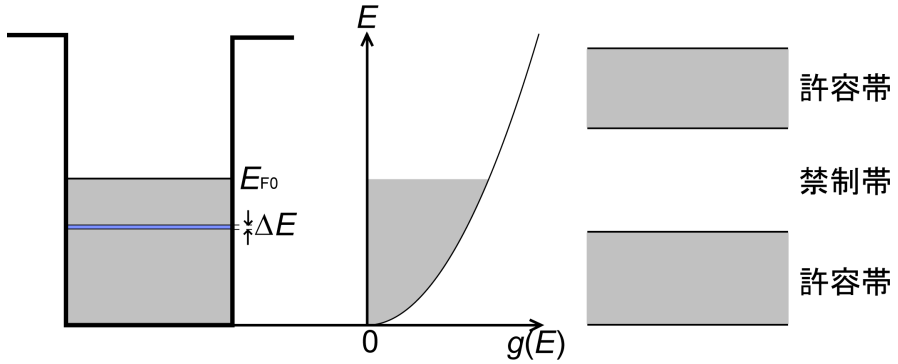
統計的手法で計算する

$$(\text{電子濃度})=\sum_{\text{伝導帯}}(\text{あるエネルギーを電子が占める確率})\times(\text{そのエネルギー準位にある電子の状態数})$$

⇧　　⇧

フェルミーディラック分布則　　状態密度 g(E)

<u>状態密度(単位体積・単位エネルギーあたりのエネルギー準位の数)</u>



$g(E)$ [1/cm^3・eV]

ΔE のエネルギー幅の中に存在する状態の数：$g(E)\times\Delta E$

あるエネルギーE までに電子を収容できる状態数を n とすると

$$n=\int_0^E g(E)dE$$

$$\Rightarrow g(E)=\frac{dn}{dE}$$

3 次元ポテンシャル井戸中の E と n の関係は、第３回の講義で説明したように、

$E=\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{\frac{2}{3}}$ となるので、　$g(E)=\dfrac{1}{2\pi^2}\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}$

と表すことができる。上式より、状態密度は $\sqrt{E}$ に比例する。

分布則：あるエネルギーにどのくらいの確率で存在するかを表したもの(統計的手法)

電子に適用可能な分布則：フェルミーディラック分布則

- 1 つの準位に 1 個の粒子しか入ることができない(パウリの排他律)
- 粒子をお互いに区別できない(フェルミ粒子)

$$f(E,T)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

E：あるエネルギー、

T：温度、k=1.38×10^{-23} J/K：(ボルツマン定数) → kT~26 meV (@ 300 K)

E_F：フェルミエネルギー(フェルミ準位)ーエネルギーの基準点

電子が占める確率が 0.5 であるエネルギー準位

$f(E, T)$の特徴

1. $f(E_F, T)=0.5$
2. E_F を中心に対称
3. 温度が上がると高いエネルギーまで電子が占める(T=0 K だとステップ関数)
4. 値域は 0～1

(E-E_F≫kT のとき)

$f(E, T)$の分母の 1 を無視することが可能

$$f(E,T)\approx\exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right)$$ (マックスウェルーボルツマン分布)

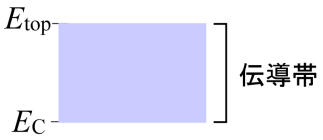
エネルギーE がフェルミエネルギーE_F より十分に離れていれば

フェルミーディラック分布即はマックスウェルーボルツマン分布で近似が可能

$$(\text{電子濃度}\,n) = \sum_{\text{伝導帯}} (\text{電子の分布関数}) \times (\text{状態密度})$$

(E-$E_F \gg kT$)を仮定すると

$$n = \int_{\text{伝導体の底}(=E_C)}^{\text{伝導体の頂上}(=E_{top})} \left[f(E,T) \times g_C(E) \right] dE = N_C \times \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT} \right)$$



N_C：(伝導帯の)有効状態密度 $= 2 \times \left(\frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

(物質定数項)

電子濃度 n は E_C-E_F によって決まる

E_C-E_F：大 → n：小

E_C-E_F：小 → n：大

$$(\text{正孔濃度}\,p) = \sum_{\text{価電子帯}} (\text{正孔の分布関数}) \times (\text{状態密度})$$

(正孔の存在確率)＝1－(電子の存在確率)

→ (正孔の分布関数)＝1－(電子の分布関数))

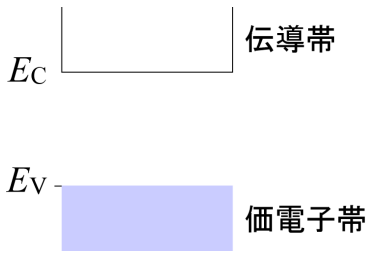
$$(\text{正孔濃度}\,p) = \int_{\text{価電子帯の下端}(=E_{bottom})}^{\text{価電子帯の上端}(=E_V)} \left[(1 - f(E,T)) \times g_V(E) \right] dE$$

$$= N_V \times \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT} \right)$$

N_V：(価電子帯の)有効状態密度 $= 2 \times \left(\frac{2\pi m_h^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

真性キャリア濃度

$$\begin{cases} n = N_C \exp\left(-\dfrac{E_C - E_F}{kT}\right) \\ p = N_V \exp\left(-\dfrac{E_F - E_V}{kT}\right) \end{cases}$$



E_F が E_C に近づくと $n\uparrow$ $p\downarrow$

E_F が E_V に近づくと $n\downarrow$ $p\uparrow$

電荷の中性条件：正電荷と負電荷の数は同じ

(ドーピングしていないとき：真性半導体)

$n = p$

$$N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

$$\exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)\exp\left(\frac{E_F - E_V}{kT}\right) = \frac{N_V}{N_C}$$

$$\exp\left(\frac{2E_F}{kT}\right) = \exp\left(\frac{E_C + E_V}{kT}\right)\cdot\frac{N_V}{N_C}$$

$$\frac{2E_F}{kT} = \frac{E_C + E_V}{kT} + \ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right)$$

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right) = \frac{E_g}{2} + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right)$$

E_C と E_V：の中間（足し算）が、$E_g/2$

$$n \times p = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) \times N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

$$= N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{kT}\right)$$

$$= N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$$

$E_g = E_C - E_V$：禁制帯幅（引き算）

$$\equiv n_i^2$$

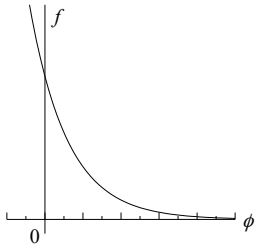
n_i：真性キャリア濃度($n_i = \sqrt{N_C N_V}\exp\left(-\dfrac{E_g}{2kT}\right)$)

Si の場合 300 K において $n_i = 1.5\times10^{10}$ cm^{-3}

【参考】 3つの分布統計

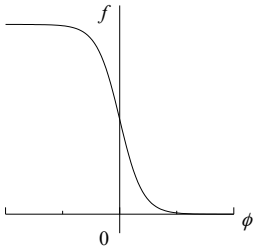
・マクスウェル・ボルツマン統計（古典統計）
個々の粒子は区別でき、
同じエネルギー状態にいくつでも粒子が入ることができる

分布関数 $f \propto \exp\left(\frac{-\phi}{k_B T}\right)$



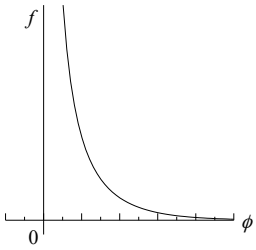
・フェルミ・ディラック統計（量子統計）
個々の粒子は区別できない、
同じエネルギー状態を同時にとることができない（例 パウリの排他則）

分布関数 $f \propto \frac{1}{\exp\left(\frac{\phi}{k_B T}\right)+1}$



・ボーズ・アインシュタイン統計（量子統計）
個々の粒子は区別できない、
同じエネルギー状態にいくつでも粒子が入ることができる

分布関数 $f \propto \frac{1}{\exp\left(\frac{\phi}{k_B T}\right)-1}$



（粒子数）<<（状態数）のときと温度T大の時には、
フェルミ・ディラック分布とボーズ・アインシュタイン分布は、ボルツマン分布と同じ概形になる。