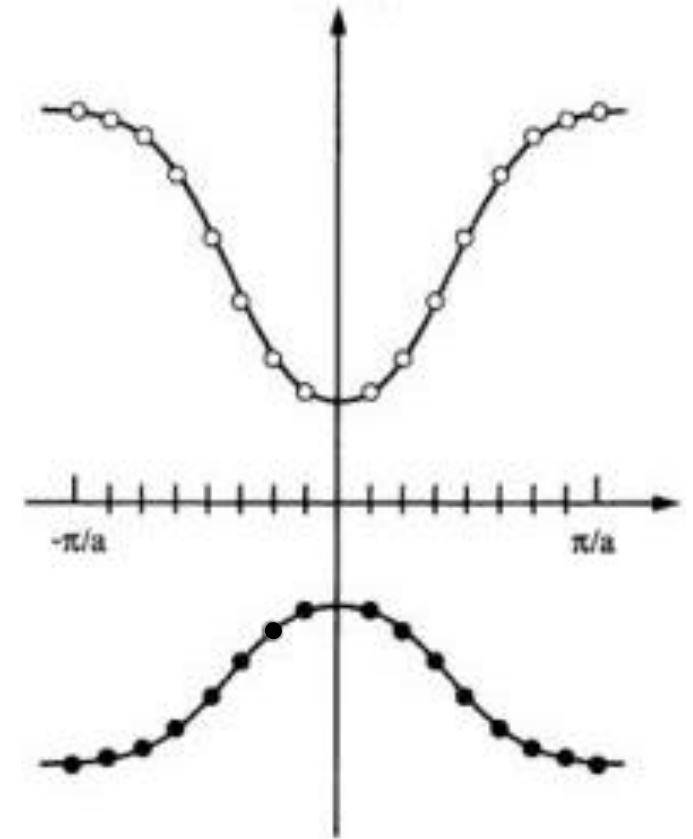


目次

- 8 周期結晶における電子
 - 8.3 半導体材料の概要
 - 8.4 準粒子としての電子・正孔



価電子帯、伝導体

- HOMO
 - 価電子帯(VB)のうち、最上部にあるもの
the Highest Occupied Molecular Orbital
- LUMO
 - 伝導帯(CB)のうち、最下部にあるもの
the Lowest Unoccupied Molecular Orbital
- 以後、特に言及のない場合、価電子帯、伝導体という言葉はそれぞれHOMO、LUMOを指す



IV族半導體

- 半導体分野では(Ⅰ～Ⅷ)
 - 現在のナンバリングとは異なる
- 元素半導体(C,Si,Ge...):Ⅳ族
 - 完全な共有結合
 - 点群 O_h (ダイヤモンド型構造)
 - C :C₆₀(フラーレン)
 - Ti:αスズ

I ^a	II ^a	III ^b	IV ^b	V ^b	VI ^b	VII ^b	VIII ^b			I ^b	II ^b	III ^a	IV ^a	V ^a	VI ^a	VII ^a	VIII ^a
(1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18)
1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mb	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 PoL	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
			<div style="text-align: center;">  </div>														
			58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
<div style="text-align: center;">  </div>																	
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113	114	115	116	117	118
			90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

III - V 族半導體

- 点群 O_h : 2つの副格子からなる
→ 片方をⅢ、もう片方をⅤに
- Ⅲ - Ⅴ 族半導体
 - 共有結合(支配的)+イオン結合
- 点群 T_d (閃亜鉛鉱型)
 - この手順ではこの半導体を得られる
- 点群 C_{6v} (ウルツ鉱型)
 - Ⅲ族の窒化物はよくこの形をとる

I ^a	II ^a	III ^b	IV ^b	V ^b	VI ^b	VII ^b	VIII ^b			I ^b	II ^b	III ^a	IV ^a	V ^a	VI ^a	VII ^a	VIII ^a		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
1 H																			2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne		
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr		
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe		
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn		
		<div><div>▲</div><div>▲</div></div>																	
		58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113	114	115	116	117	118		
		<div><div>▲</div></div>																	
		90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				

II - VI族半導體

- III – V 族半導体に同じ操作を行う
 - $\text{II}^{\text{B}} - \text{VI}^{\text{A}}$:半導体(Hg化合物は半金属)
 - $\text{II}^{\text{A}} - \text{VI}^{\text{A}}$:絶縁体
- 点群 T_d (閃亜鉛鉱型)
- 点群 C_{6v} (ウルツ鉱型)
 - 両方の構造を取るものがある(ZnO)
- I – VII化合物は付録参照

I ^a	II ^a	III ^b	IV ^b	V ^b	VI ^b	VII ^b	VIII ^b			IX ^b	X ^b	III ^a	IV ^a	V ^a	VI ^a	VII ^a	VIII ^a
(1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1																	2
H																	He
3	4											5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
11	12											13	14	15	16	17	18
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mb	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
		<div style="text-align: center;"> </div>															
		58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn						
		<div style="text-align: center;"> </div>															
		90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103		
		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

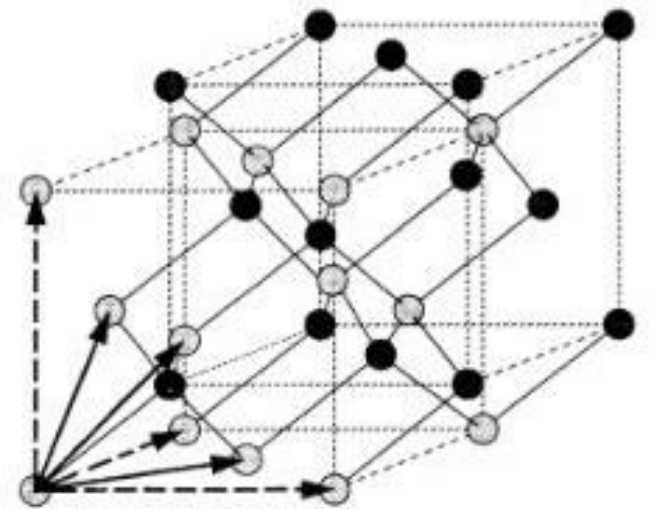
合金化

- ダイヤモンド型、閃亜鉛鉱型結晶構造は2つの副格子からなる
→副格子が異なる原子(イオン)に占められたら？

- 合金化

- 原子 : $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$
- 陽イオン : $\text{CdS}_{1-x}\text{Se}_x$
- 陰イオン : $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$

- CuPt構造:組成(xやy)が0.5に近い秩序構造をとる場合
- 両方の副格子の合金化も可能($\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{N}_x\text{As}_{1-x}$)



バンドギャップ E_g の変化

- E_g は周期表の下に行くほど狭くなる
- E_g は温度依存性を持つ
→ Varshniの公式

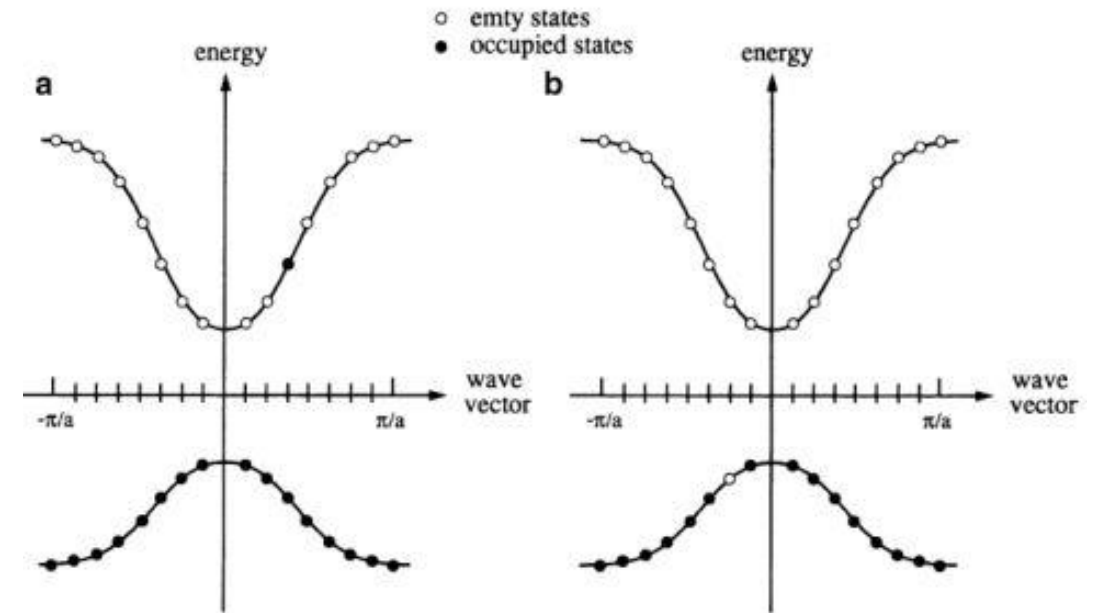
$$\Delta E_g(T) = \frac{\alpha T^2}{\beta + \gamma T}$$

→別の公式

$$\Delta E_g(T) = \frac{\alpha \theta_P}{2} \left[\sqrt[P]{a + \frac{2T}{\Theta_P}} - 1 \right] \quad \left\{ \begin{array}{l} \Theta_P: \text{効果的なフォノン温度} \\ \alpha: \text{エントロピーの高温限界} \\ P: \text{物質固有のパラメータ} \end{array} \right.$$

半導体中の電子と正孔

- VBが満たされていて、CBが空の状態
 - 電子が1個増える
→その電子は伝導帯に位置する
 - 電子が1個減る
→その電子は価電子帯から来た
 - 多数の電子を考える代わりに
僅かな空洞の特性を考える
→”欠陥電子”あるいは”正孔”



電子と正孔の特性

- 正孔と電子の関係
 - 正孔は、取り除かれた電子と比べて
電荷、波数ベクトル、スピン、有効質量
が逆

Property	Hole	Removed electron
Electric charge q	q_h	$= -q_{re}, q_{re} \approx -1.6 \times 10^{-19} \text{ As}$
Wave vector	\mathbf{k}_h	$= -\mathbf{k}_{re}$
Spin	σ_h	$= -\sigma_{re}$
Eff. mass	$m_h > 0$	$= -m_{re}, m_{re} < 0$

付録1:元素半導体、二元半導体

Group IV				Group III-V				Group II-VI				Group I-VII			
SC	Sy	E_g (eV)	dir/indir	SC	Sy	E_g (eV)	dir/indir	SC	Sy	E_g (eV)	dir/indir	SC	Sy	E_g (eV)	dir/indir
C	O_h	5.48	i	AlN	C_{6v}	6.28	d	ZnO	C_{6v}	3.437	d	CuCl	T_d	3.395	d
Si	O_h	1.17	i	AlP	T_d	2.53	i	ZnS	C_{6v}	3.91	d	CuBr	T_d	3.077	d
Ge	O_h	0.744	i	AlAs	T_d	2.228	i	ZnS	T_d	3.78	d	CuI	T_d	3.115	d
Grey Sn	O_h	0	Semimetal	AlSb	T_d	1.696	i	ZnSe	T_d	2.82	d	AgCl	T_d	3.249	i
				GaN	C_{6v}	3.503	d	ZnTe	T_d	2.391	d	AgBr	T_d	2.684	i
				GaP	T_d	2.350	i	CdO	O_h	0.8	i	AgI	C_{6v}	3.024	d
				GaAs	T_d	1.518	d	CdS	C_{6v}	2.583	d				
				GaSb	T_d	0.812	d	CdSe	C_{6v}	1.841	d				
				InN	C_{6v}	0.67 ^a	d	CdTe	T_d	1.60	d				
				InP	T_d	1.424	d	HgS	T_d	0	d				
				InAs	T_d	0.418	d	HgSe	T_d	0	d				
				InSb	T_d	0.237	d	HgTe	T_d	0	d				

^aNew data, see [02D1,02K2]

付録2:様々な半導体

- IV – VI化合物(鉛塩):Pb,SnとS,Se,Teの化合物→IRレーザー
- 元素半導体:P,I(As,Sbは半金属)
- 酸化物半導体:GeO₂などのII^B酸化物(SiO₂は絶縁体)
CuO₂、TiO₂(変形が多数:鋭錘石、金紅石、
板チタン石)
- Tlハロゲン化物半導体
- 有機半導体:アントラセン(C₁₄H₁₀)、ペンタセン(C₂₂H₁₄)、
ジベンゾチオフェン(C₁₂H₈S)、ヘキサチオフェン