

講義資料

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

統計力学・半導体

2020/4/20 課題

MRxx.csv (MRxx.xlsx) のデータ (磁場 B - 抵抗率 ρ) について、

$$\rho(B) = \rho_0 + aB^2$$

を仮定し、定数 ρ_0 と a を求めよ。マニュアルフィッティングしてもよいし、pythonプログラム lsq1.py や csvplot.csv などを参考に線形最少二乗法などで求めてもよい。

参考:

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

- 計算材料学特論 資料

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出

期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

多数の標本点の近似: 最小化問題

実験値 $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ が $f(x) = a + bx$ で表されるとするときに、
実験値をもっともよく再現できる a, b はどのように決めるか

※誤差があるので $y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$ となる

基本的な考え方

誤差の残差関数 S が最小 (最大) になるように a, b を決める

ミニマックス法: $S = \sum |f(x_i) - y_i|$

最小自乗法 : $S = \sum (f(x_i) - y_i)^2$

$$S = \sum (a + bx_i - y_i)^2$$

$$dS/da = 2\sum (a + bx_i - y_i) = 2an + 2b\sum x_i - 2\sum y_i = 0$$

$$dS/db = 2\sum x_i(a + bx_i - y_i) = 2a\sum x_i + 2b\sum x_i^2 - 2\sum x_i y_i = 0$$

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$

$f(x) = a + bx + cx^2 + \dots$ などでも、1度の行列計算で解が得られる

最尤推定法

誤差 $\varepsilon_i = f(x_i, a_i) - y_i$ が分散 σ_i の正規分布に従うとする。データ (x_i, y_i) に対するパラメータ (a_i) の尤度関数は

$$P(a_i) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left[-\frac{\varepsilon_i^2}{2\sigma_i^2}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left[-\sum_i \frac{\varepsilon_i^2}{2\sigma_i^2}\right]$$

尤度を最大化するパラメータを求めるのが「最尤推定法」。

$$\max P(a_i) = \max \ln P(a_i) = \min \sum_i \frac{\varepsilon_i^2}{\sigma_i^2}: \text{最小二乗法に一致する}$$

- 各誤差は標準偏差 σ_i で規格化した方がいい
- あるは、パラメータを平均値 $\langle x_i \rangle$ を用いて $\frac{x_i - \langle x_i \rangle}{\sigma_i}$ で規格化する

線形最小二乗法: 多項式

$$f(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k \quad S = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{k=0}^n a_k x_i^k \right)^2 \quad \frac{dS}{da_l} = - \sum_{i=1}^N x_i^l \left(y_i - \sum_{k=0}^n a_k x_i^k \right) = 0$$

$$\sum_{k=0}^n \sum_{i=1}^N a_k x_i^{k+l} = \sum_{i=1}^N y_i x_i^l \quad (l = 0, 1, \dots, N)$$

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^N \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & & \sum x_i^{N+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & & \sum x_i^{N+2} \\ \vdots & & & \ddots & \\ \sum x_i^N & \sum x_i^{N+1} & \sum x_i^{N+2} & & \sum x_i^{2N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \\ \vdots \\ \sum y_i x_i^N \end{pmatrix}$$

$|x_i| > 1$ のデータが多数あると桁あふれ

$|x_i| < 1$ のデータが多数あると桁落ちが起こる

=> 規格化 例: $\frac{x_i - \langle x_i \rangle}{\sigma_i}$

線形最小二乗法: 一般関数の場合

$$f(x) = \sum_{k=1}^n a_k f_k(x) \quad S = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \sum_{k=1}^n a_k f_k(x_i) \right)^2$$
$$\frac{dS}{da_l} = - \sum_{i=1}^N f_l(x_i) \left(y_i - \sum_{k=1}^n a_k f_k(x_i) \right) = 0$$

$$\begin{pmatrix} \sum f_1(x_i)f_1(x_i) & \sum f_1(x_i)f_2(x_i) & \sum f_1(x_i)f_3(x_i) & \cdots & \sum f_1(x_i)f_N(x_i) \\ \sum f_2(x_i)f_1(x_i) & \sum f_2(x_i)f_2(x_i) & \sum f_2(x_i)f_3(x_i) & & \sum f_2(x_i)f_N(x_i) \\ \sum f_3(x_i)f_1(x_i) & \sum f_3(x_i)f_2(x_i) & \sum f_3(x_i)f_3(x_i) & & \sum f_3(x_i)f_N(x_i) \\ \vdots & & & \ddots & \\ \sum f_N(x_i)f_1(x_i) & \sum f_N(x_i)f_2(x_i) & \sum f_N(x_i)f_3(x_i) & & \sum f_N(x_i)f_N(x_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i f_1(x_i) \\ \sum y_i f_2(x_i) \\ \sum y_i f_3(x_i) \\ \vdots \\ \sum y_i f_N(x_i) \end{pmatrix}$$

$f(x)$ が係数に関して線形であれば、1度の行列計算で最終解が得られる

例: $f(x) = a + b \log x + c/x$

$$f(x, y) = a + bxy + cy/x$$

半導体: フェルミ準位とキャリア濃度

状態密度

物理量 P の統計平均を求める

古典統計力学
$$P = \int P(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(E(\mathbf{r}, \mathbf{p})) d\mathbf{r} d\mathbf{p}$$

多くの場合 (空間が等方的な場合)、 E に関する一次元積分に直せる:

$$P = \int P(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \int P(E) f(E) N(E) dE$$

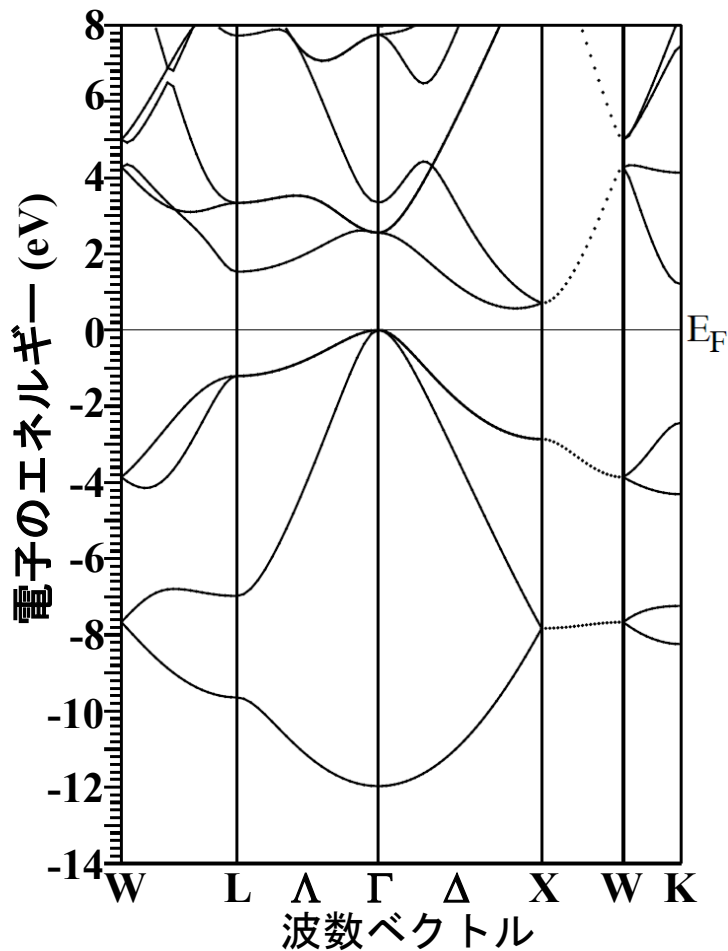
$g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = N(E) dE$ を満たすように状態密度 $N(E)$ を決定する。

量子統計力学
$$P = \sum_i P_i f(E_i)$$

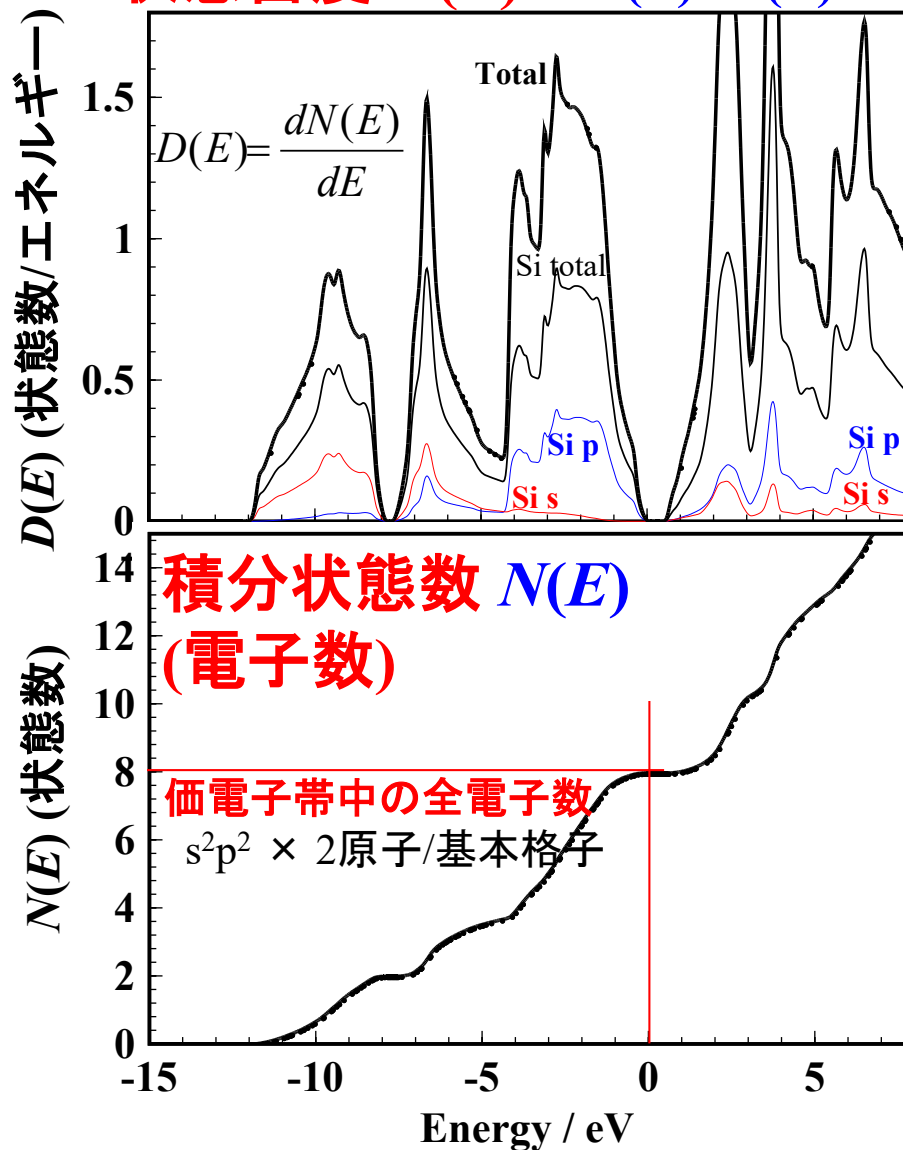
E_i の分布が密であれば、和は積分で近似できる。

$$P = \sum_i P_i f(E_i) = \int P(E) f(E) N(E) dE$$

状態密度 (Density Of States: DOS)



状態密度 $D(E)$: $dN(E)=D(E)dE$



状態密度 $D(E)$:

$E \sim E+dE$ の範囲の状態数

$$dN(E)=D(E)dE$$

E を ΔE 毎のメッシュに区切り、

第一B.Z.内の $E \sim E+\Delta E$ 内にある準位数を足し合わすことで計算される

状態密度の計算手順

状態密度 $D(E)$: $E \sim E + dE$ の範囲の状態数 $= D(E)dE$

1. 第一ブリルアンゾーンを均一に分割し、量子方程式を解いて、各 k 点 k_i における固有エネルギー $E_j(k_i)$ を求める
2. 状態密度の配列 $D[i]$ を用意し、すべての要素を 0 で初期化する。
状態密度のエネルギーを幅 h で分割する。
計算するエネルギーの下限を E_{\min} とすると、 $D[i]$ に対応するエネルギー E_i は
$$E_i = E_{\min} + h * i$$
3. すべての固有状態について、固有エネルギー $E_j(k_i)$ から対応する i を求める。
$$i = \text{int}((E_j(k_i) - E_{\min}) / h + 0.000001)$$
対応する $D[i]$ に状態数 1 を加える。
4. **単位は 状態数/単位格子体積** になっているので、 h [eV] で割って**状態数/単位格子体積/eV** になおす。
5. 必要に応じて単位を**状態数/cm³/eV** などになおす。

§ 7.2 自由粒子の状態密度の求め方

変数変換して、計算しやすい形で平均を取る

$$P = \sum_i P_i f(E_i) = \int P(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(E(\mathbf{r}, \mathbf{p})) d\mathbf{r} d\mathbf{p} = \int P(k) f(k) g'(k) dk = \int P(e) f(e) N(e) de$$

$g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = g'(|k|) d|k| = N(e) de$ を満たすように選ぶ

$g'(|\mathbf{k}|)$ 波数に関する状態密度
 $N(e)$ (エネルギーに関する) 状態密度

1. 状態数を数えるため、一辺 L の立方体に粒子が閉じ込められている場合を考え、 $L \Rightarrow \infty$ の極限を取る。

1つの量子状態が k 空間中で占める体積 $v_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$

2. 体積 $dk_x dk_y dk_z$ 中の状態数 $(2S + 1) \frac{dk_x dk_y dk_z}{v_k} = \frac{(2S+1)V}{(2\pi)^3} d\mathbf{k}$ (7.38)

3. 変数変換 $g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \frac{(2S+1)V}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z = \frac{(2S+1)V}{(2\pi)^3} 4\pi |\mathbf{k}|^2 d|k| = g'(|k|) d|k|$ (7.38)

4. 変数変換 自由粒子のエネルギー $e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ から、 $\frac{d|k|}{de} = \left(\frac{\hbar^2}{m} |k|\right)^{-1}$

$$g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = g'(|k|) d|k| = \frac{(2S+1)V}{(2\pi)^3} 4\pi |\mathbf{k}|^2 d|k| = N(e) de$$

$$N(e) = (2S + 1)V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{e} \qquad (9.41) \text{ エネルギーに関する状態密度}$$

§ 8.4 有限温度での粒子数、エネルギー

$$N(e) = (2S + 1)V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{e}$$

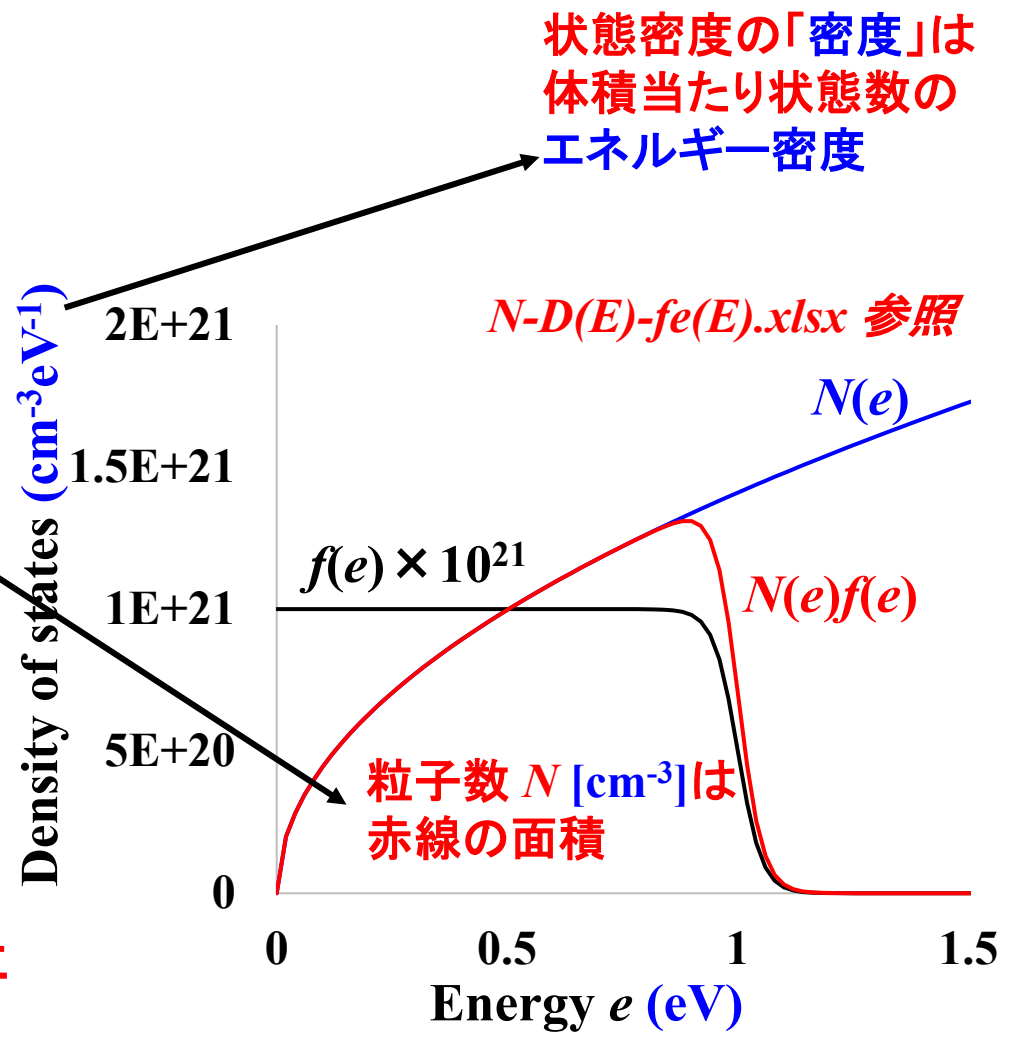
$$N = \int_0^\infty N(e)f(e) de \quad (8.32)$$

$$U = \int_0^\infty e(k)N(e)f(e) de \quad (8.33)$$

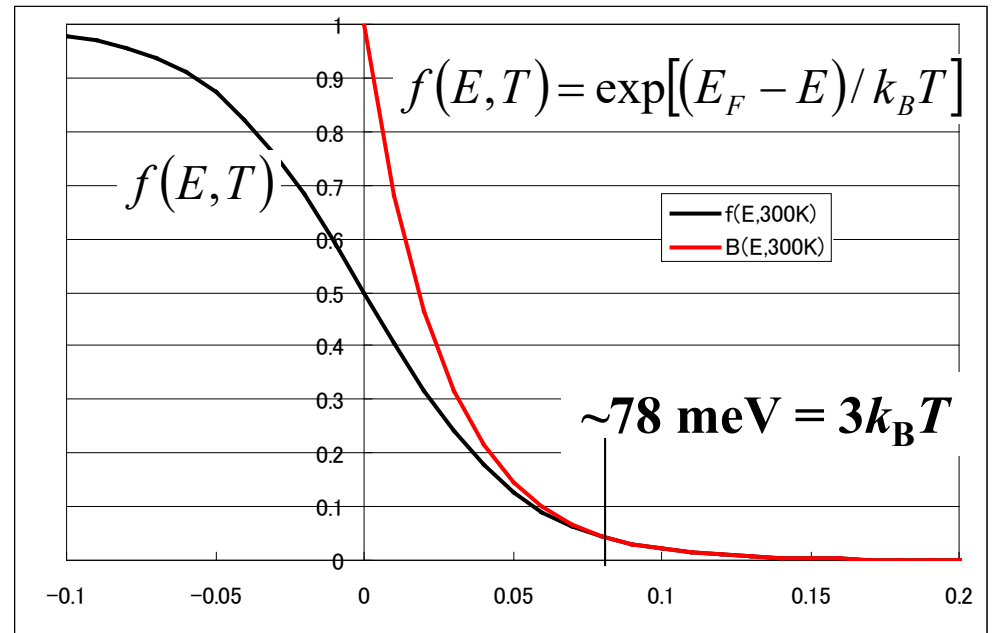
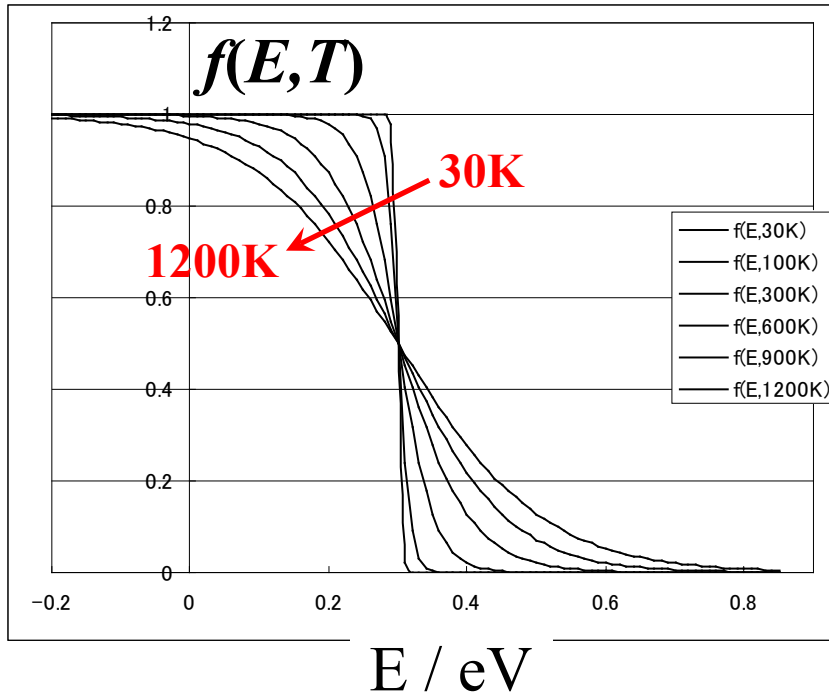
$$f(e) = \frac{1}{\exp(\beta(e-E_F))+1} \quad (8.34)$$

E_F の決定

(8.32)式で求めた N が実際の電子数に等しくなる E_F をさがす



有限温度のFermi-Dirac分布関数の形



$$f(E, T) \Rightarrow 1 \quad (E - E_F \ll k_B T)$$

$$f(E, T) = 1/2 \quad (E = E_F)$$

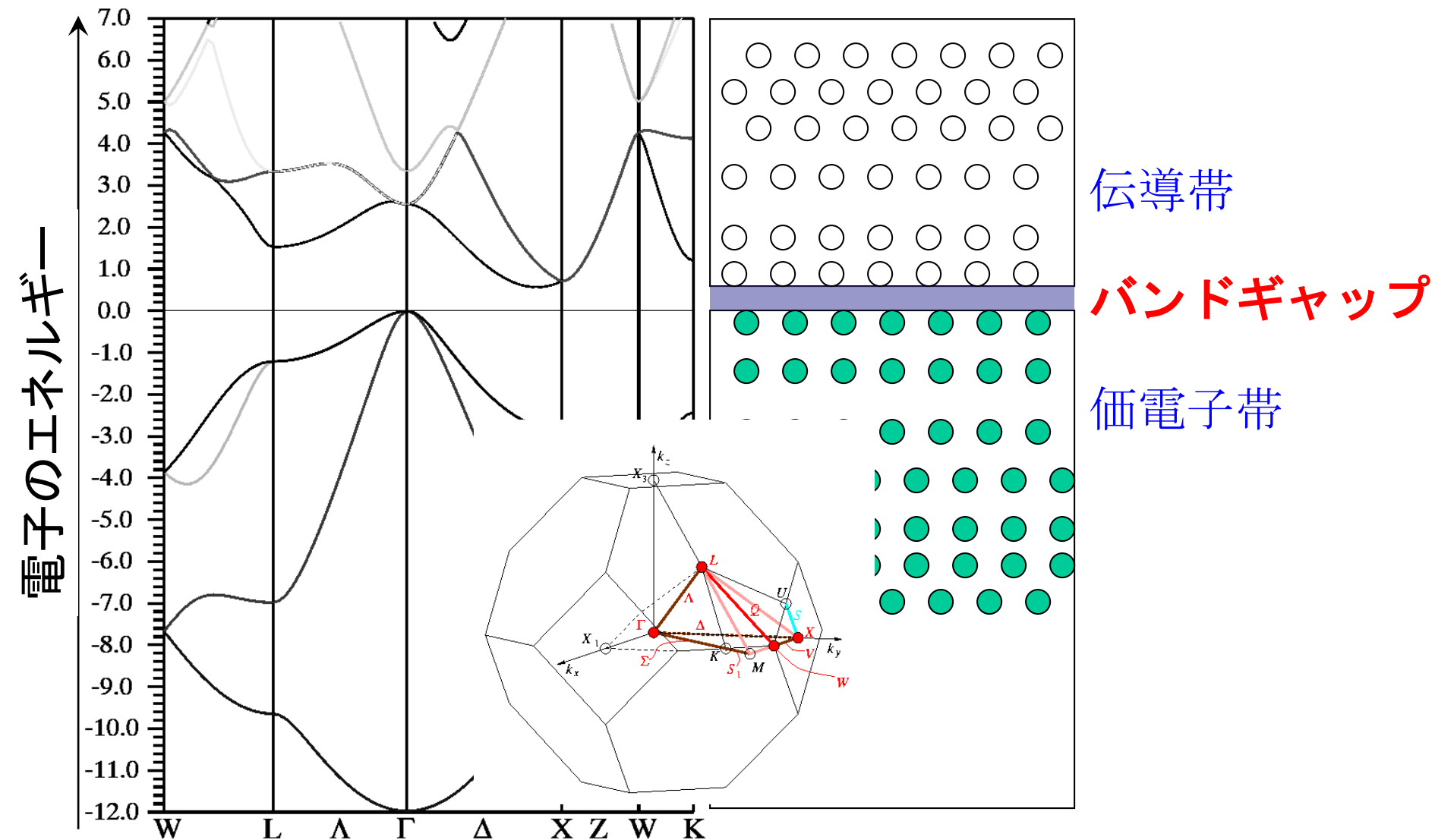
$$f(E, T) = \exp[(E_F - E)/k_B T] \Rightarrow 0 \quad (E - E_F \gg k_B T)$$

$(E - E_F)/k_B T$ が大きい高温では Boltzmann 分布と同じ振る舞いをする

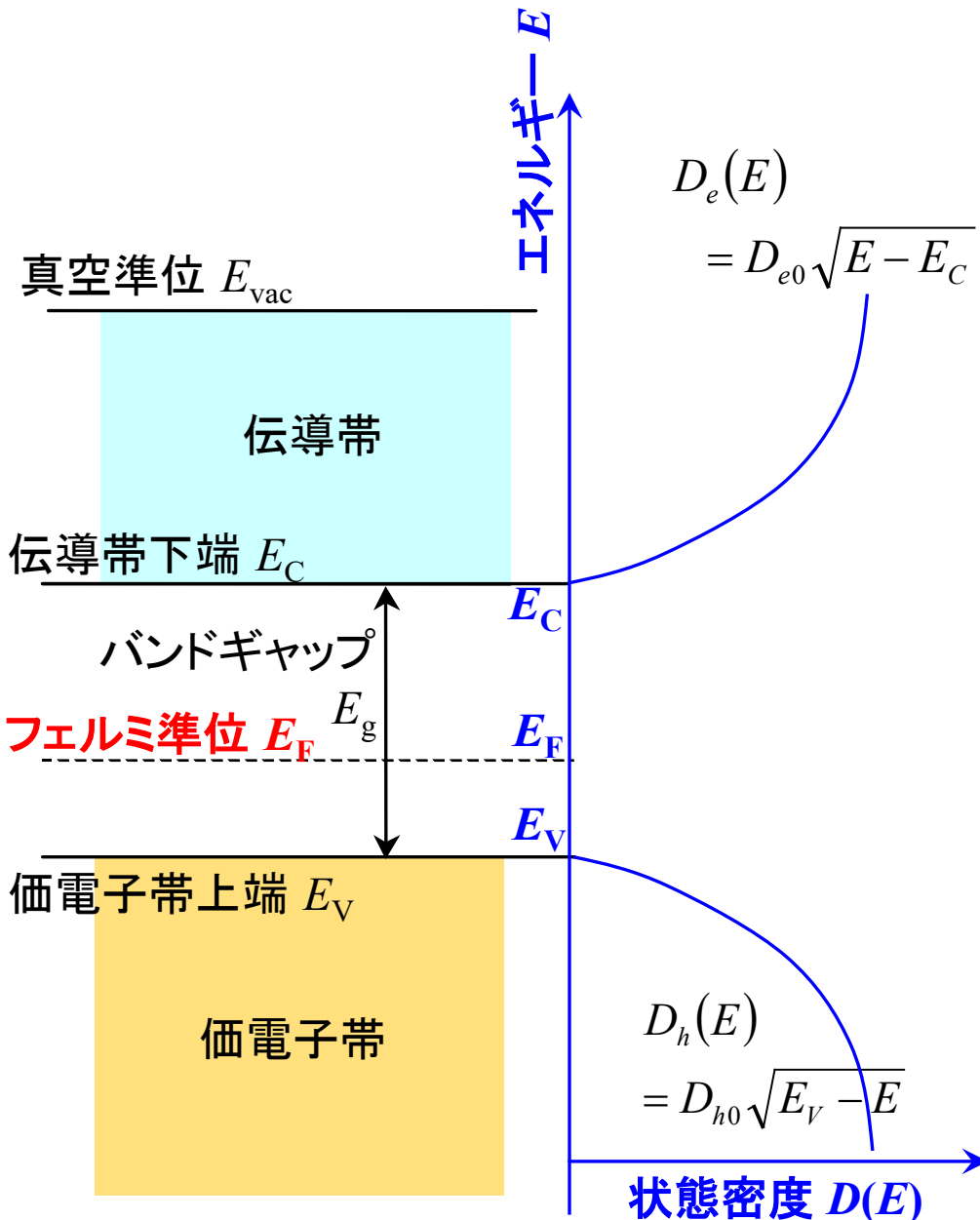
「非縮退電子ガス」

⇔ 「統計的に縮退した電子ガス」

シリコンの電子構造 (バンド構造)



半導体の電子構造



$$E(k) \sim E_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$$

E に関する状態密度

$$D(E) = N(E)/V = \frac{2\pi(2m^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E} \quad (9.41)$$

Fermi-Dirac分布関数

$$f(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1} \quad (8.5)$$

半導体中:

原子核の総電荷 $Z = \sum Z_i$ と

総電子数 N_e

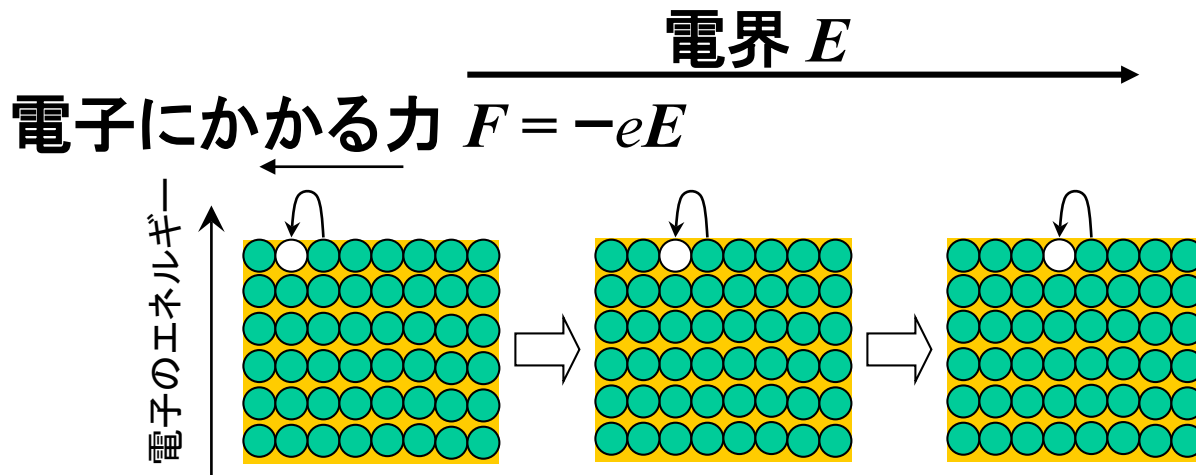
が等しく、**電荷中性条件**を満たす

- ・ 電子数の条件 (電荷中性条件)

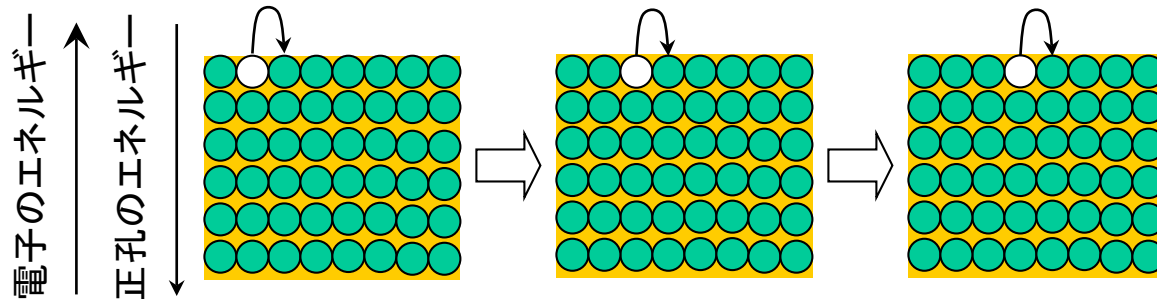
$$N_e = \int D(E) f(E) dE$$

- ・ 真性半導体では、0 Kでは価電子帯上端 E_V まで電子が詰まっている

正孔: 直観的な説明



電子の孔にかかる見かけの力 $F = +eE$



多数の電子の中に少数の”孔”があるとき、孔だけを扱う方がわかりやすい

=> 力と”孔”の加速の向きを合わせるため、電荷を正にする

電子と正孔: 電荷中性条件の書き換え

0 Kにおける全電子数の条件 $N_e = \int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE = \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E)dE$

有限温度における全電子数の条件 \Rightarrow 電荷中性条件に置き換える

$$N_e = \int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE$$

N_e は N_A 程度の大きな数なので、扱いにくい

$$\Rightarrow N'_e = \int_{-\infty}^{\infty} f(E)D(E)dE - N_e = 0 \text{ を基準に考える}$$

$$N'_e = \int_{-\infty}^{E_V} f(E)D_h(E)dE - \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E)dE + \int_{E_C}^{\infty} f(E)D_e(E)dE = -n_h + n_e = 0$$

$$n_h = \int_{-\infty}^{E_V} (1 - f(E))D_h(E)dE = \int_{-\infty}^{E_V} f_h(E)D_h(E)dE$$

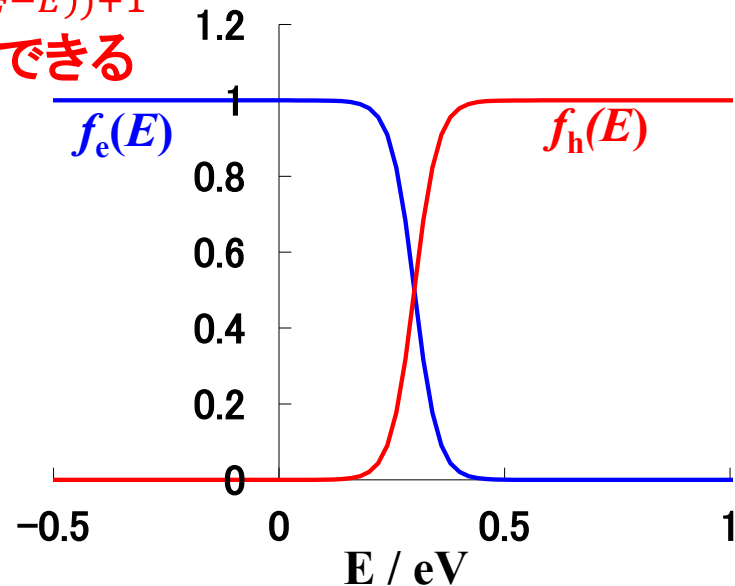
$$f_h(E) = 1 - f(E) = \frac{\exp(\beta(E - E_F))}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1} = \frac{1}{\exp(\beta(E_F - E)) + 1}$$

※ 正孔は電子が空いた“孔”とみなすことができる

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E)D_e(E)dE$$

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

$$N'_e = -n_h + n_e = 0 \Rightarrow n_h = n_e: \text{電荷中性条件}$$



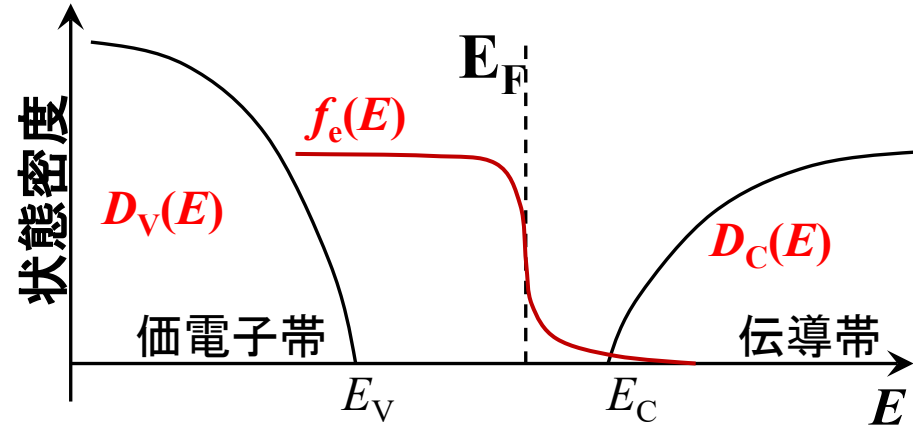
自由電子密度

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E) D_e(E) dE$$

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

$$D_e(E) = D_{C0} \sqrt{E - E_C} \quad (9.41)$$

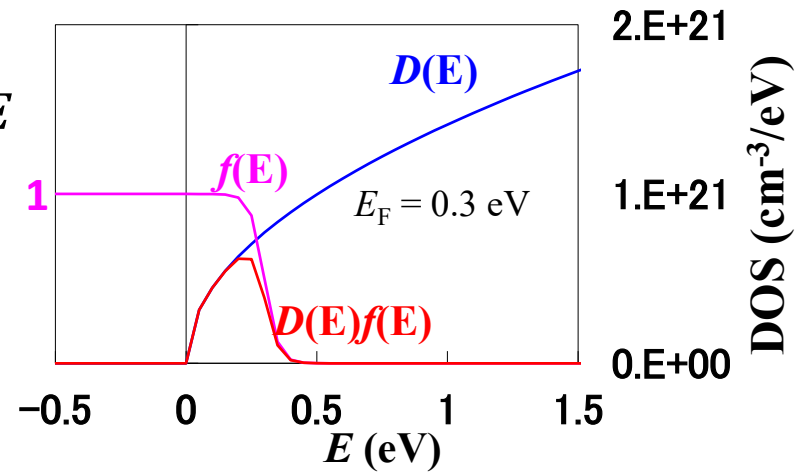
$$D_{C0} = \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$



非縮退半導体 $\beta(E - E_F) \gg 1$ では

$$n_e \sim \int_{E_C}^{\infty} \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} \exp(-\beta(E - E_F)) dE$$

$$= \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^{\infty} \sqrt{e} \exp(-\beta e) de$$



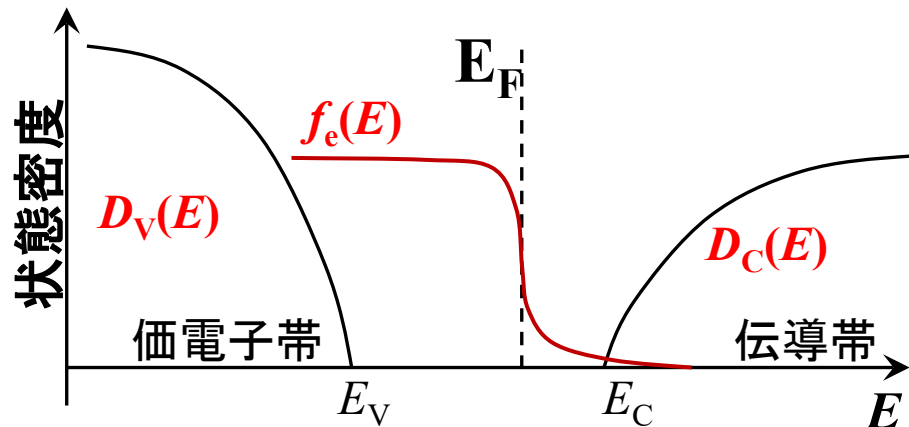
自由電子密度、自由正孔密度

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E) D_e(E) dE$$

$$f_e(E) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

$$D_e(E) = D_{C0} \sqrt{E - E_C} \quad (9.41)$$

$$D_{C0} = \frac{\sqrt{2} m_e^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$



非縮退半導体 $\beta(E - E_F) \gg 1$ では

$$n_e \sim \int_{E_C}^{\infty} \frac{\sqrt{2} m_e^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_C} \exp(-\beta(E - E_F)) dE$$

$$= \frac{\sqrt{2} m_e^*{}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^{\infty} \sqrt{e} \exp(-\beta e) de$$

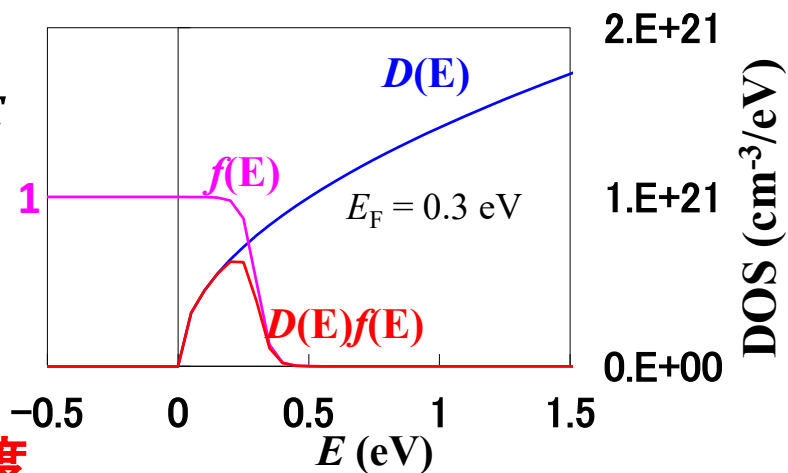
$$n_e = N_C \exp(-\beta(E_C - E_F))$$

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{伝導帯有効状態密度}$$

同様に

$$n_h = N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{価電子帯有効状態密度}$$



自由電子密度: 積分式の導出

$$n_e \sim \frac{\sqrt{2} m_e^{*2/3}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^\infty \sqrt{e} \exp(-\beta e) de$$

$$\sqrt{e} = x, e = x^2, de = 2x dx$$

$$\int_0^\infty \sqrt{e} \exp(-\beta e) de = \int_0^\infty 2x^2 \exp(-\beta x^2) dx$$

$$\int_0^\infty x^2 \exp(-x^2) dx = \frac{1}{4} \sqrt{\pi}$$

$$n_e \sim \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)} \int_0^\infty 2x^2 \exp(-\beta x^2) dx = \frac{1}{2\pi^{3/2}} \frac{1}{\beta^{3/2}} \frac{m_e^{*3/2}}{\hbar^3} e^{-\beta(E_C - E_F)}$$

$$n_e = N_C \exp(-\beta(E_C - E_F))$$

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{伝導帯有効状態密度}$$

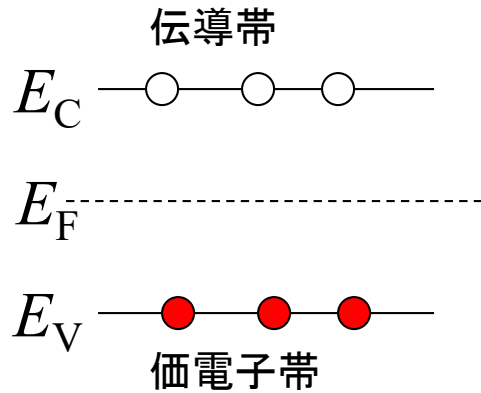
同様に

$$n_h = N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

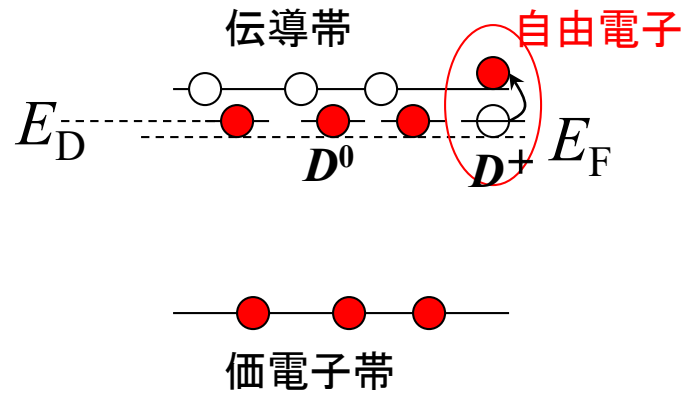
$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{価電子帯有効状態密度}$$

不純物 (ドーピング) 半導体

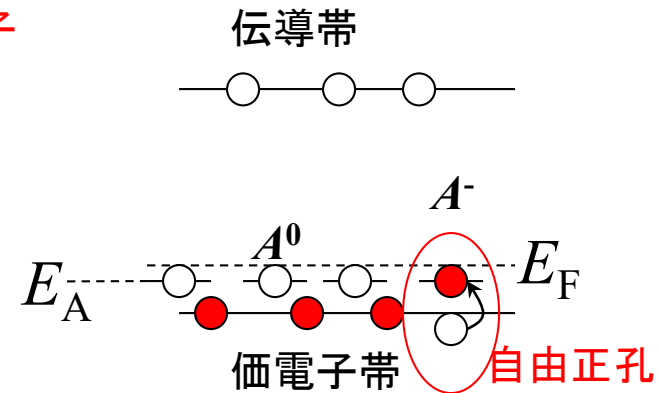
真性半導体



n型半導体



p型半導体



ドナー (donor): 電子を与える (donate) ことができる電子状態

はき出せる電子をもっている状態が電気的中性 : D^0

一部のドナーは電子をはき出してイオン化している: D^+

ドナー準位 E_D ドナー密度 N_D

アクセプター (acceptor): 電子を受け取る (accept) ことができる電子状態

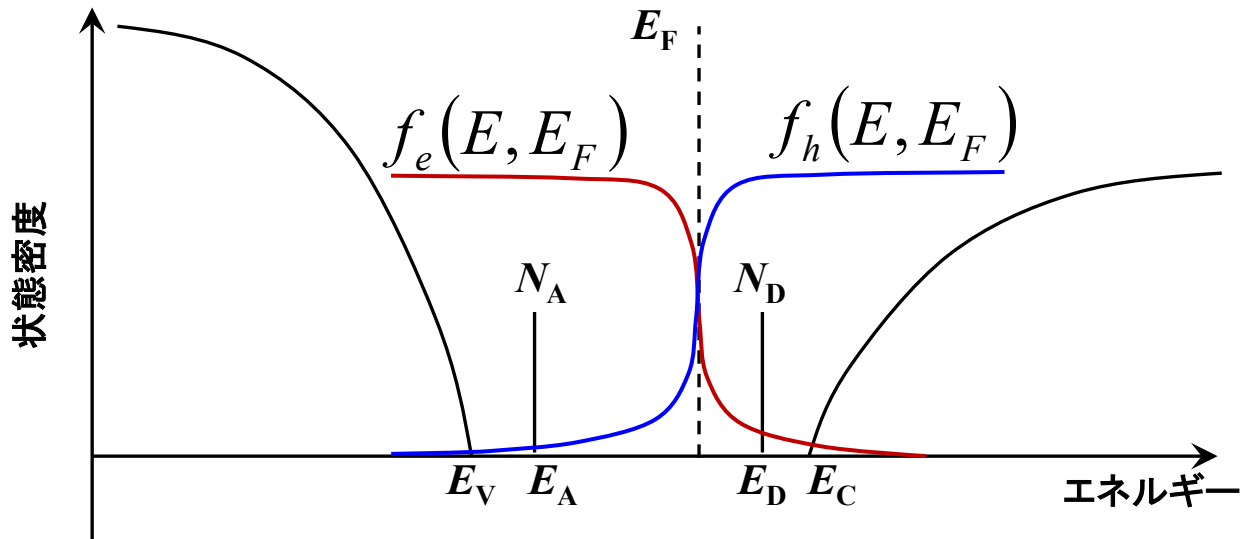
電子を受け取れる状態が電気的中性 : A^0

一部のアクセプターは電子を受け取ってイオン化している: A^-

アクセプター準位 E_A アクセプター密度 N_A

半導体の状態密度、電子、正孔

全状態密度: $D(E) = D_e(E) + D_h(E) + D_D(E) + D_A(E)$



価電子帯側

$$D_h(E) = D_{V0} \sqrt{E_V - E}$$

$$D_A(E) = N_A \delta(E - E_A)$$

$$f_h(E, E_F) = \frac{1}{\exp(\beta(E_F - E)) + 1}$$

自由正孔密度

$$n_h = \int_{-\infty}^{E_V} f_h(E, E_F) D_h(E) dE$$

非縮退半導体密度

$$n_h \sim N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

イオン化アクセプター密度

$$N_A^- = N_A (1 - f_h(E_A, E_F))$$

伝導帯側

$$D_e(E) = D_{C0} \sqrt{E - E_C}$$

$$D_D(E) = N_D \delta(E - E_D)$$

$$f_e(E, E_F) = \frac{1}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1}$$

自由電子密度

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} f_e(E) D_e(E) dE$$

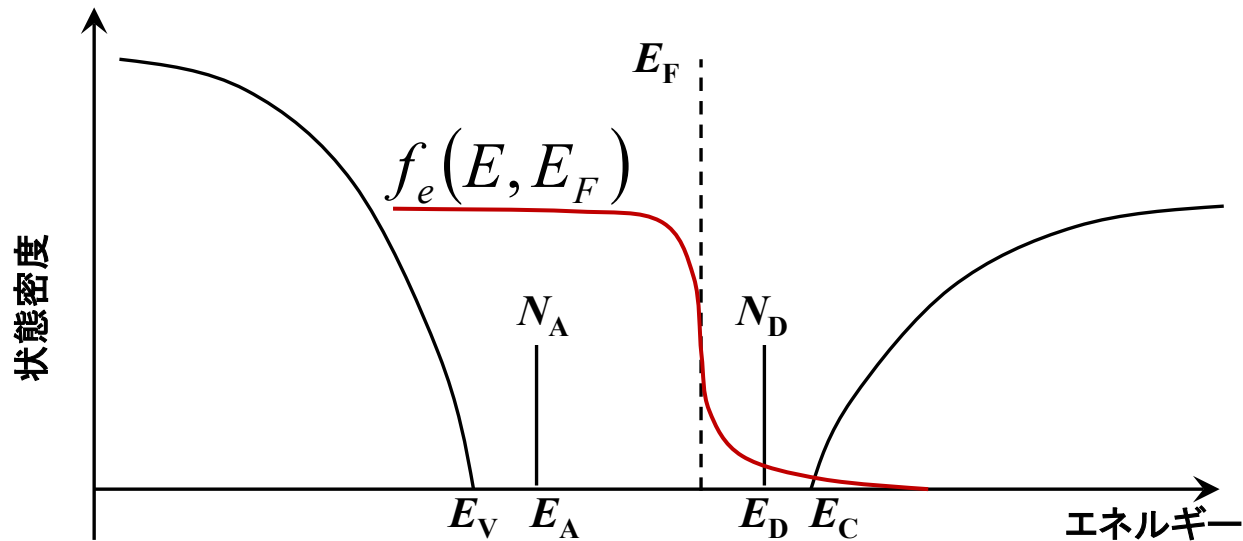
非縮退半導体密度

$$n_e \sim N_C \exp(-\beta(E_C - E_F))$$

イオン化ドナー密度

$$N_D^+ = N_D (1 - f_e(E_D, E_F))$$

ドナー準位、アクセプター準位の状態



中性ドナー密度 $N_D^0 = N_D - N_D^+$

$$N_D^0 = N_D \frac{1}{\exp(\beta(E_D - E_F)) + 1}$$

イオン化ドナー密度 N_D^+

$$\sim N_D \exp(-\beta(E_D - E_F)) \quad (\beta(E_D - E_F) \gg 1)$$

$$N_D^+ = N_D \left(1 - \frac{1}{\exp(\beta(E_D - E_F)) + 1} \right) \sim N_D (1 - \exp(-\beta(E_D - E_F))) \quad (\beta(E_D - E_F) \gg 1)$$

$$\sim N_D \exp(-\beta(E_F - E_D)) \quad (\beta(E_F - E_D) \gg 1)$$

イオン化アクセプター密度 N_A^-

$$N_A^- = N_A \frac{1}{\exp(\beta(E_A - E_F)) + 1}$$

中性アクセプター密度 $N_A^0 = N_A - N_A^-$

$$\sim N_A \exp(-\beta(E_A - E_F)) \quad (\beta(E_A - E_F) \gg 1)$$

$$N_A^0 = N_A \left(1 - \frac{1}{\exp(\beta(E_A - E_F)) + 1} \right) \sim N_A (1 - \exp(-\beta(E_A - E_F))) \quad (\beta(E_A - E_F) \gg 1)$$

$$\sim N_A \exp(-\beta(E_F - E_A)) \quad (\beta(E_F - E_A) \gg 1)$$

Fermi準位の求め方: 図解

$$n_e = \int_{E_C}^{\infty} D_e(E) f_e(E, E_F) dE$$

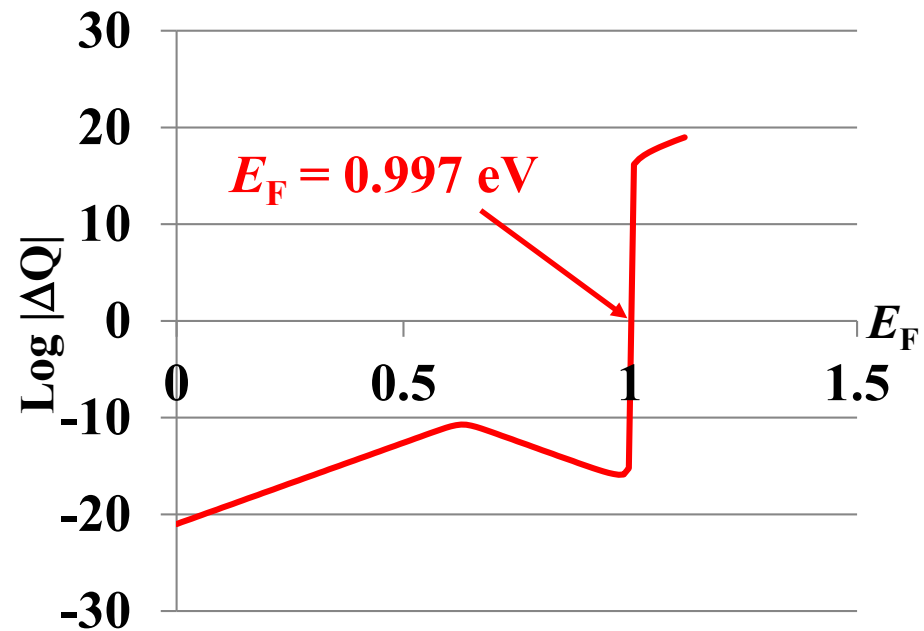
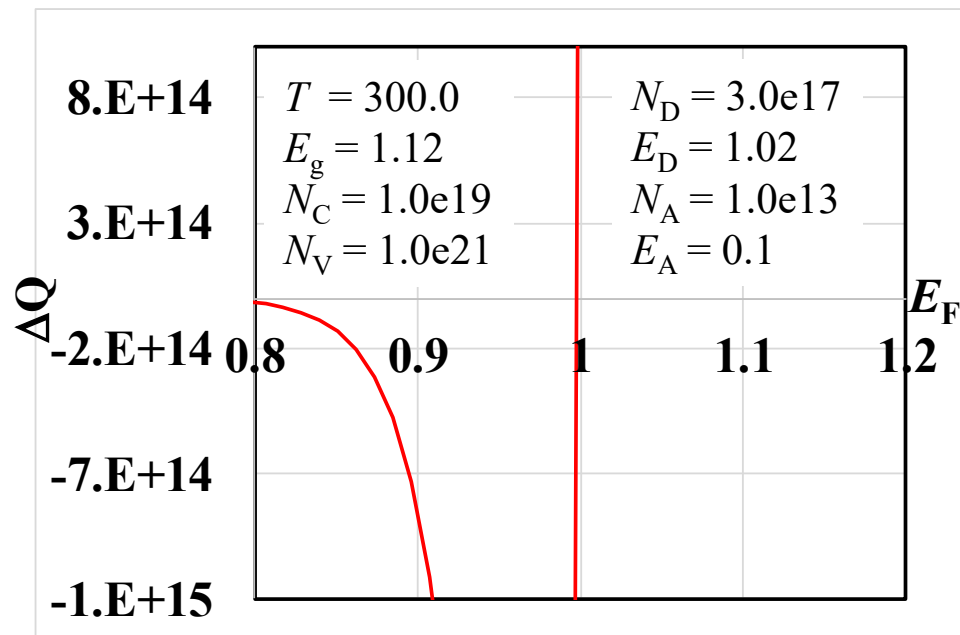
$$n_h = \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E) f_h(E, E_F) dE$$

$$N_D^+ = N_D [1 - f_e(E_D, E_F)]$$

$$N_A^- = N_A [1 - f_h(E_A, E_F)]$$

$$f_h(E, E_F) = 1 - f_e(E, E_F)$$

$\Delta Q = (n_e + N_A^-) - (n_h + N_D^+)$ を E_F に対してプロットし、ゼロ点を求める



Newton-Raphson法

$f(x) = 0$ の解を求める

$$f(x_0 + dx) = f(x_0) + dx f'(x_0) \sim 0$$

$$\Rightarrow x_1 = x_0 + dx = x_0 - f(x_0) / f'(x_0)$$

計算では $f'(x_0)$ を差分計算で置き換えられる

割線法 (セカント法、はさみうち法):

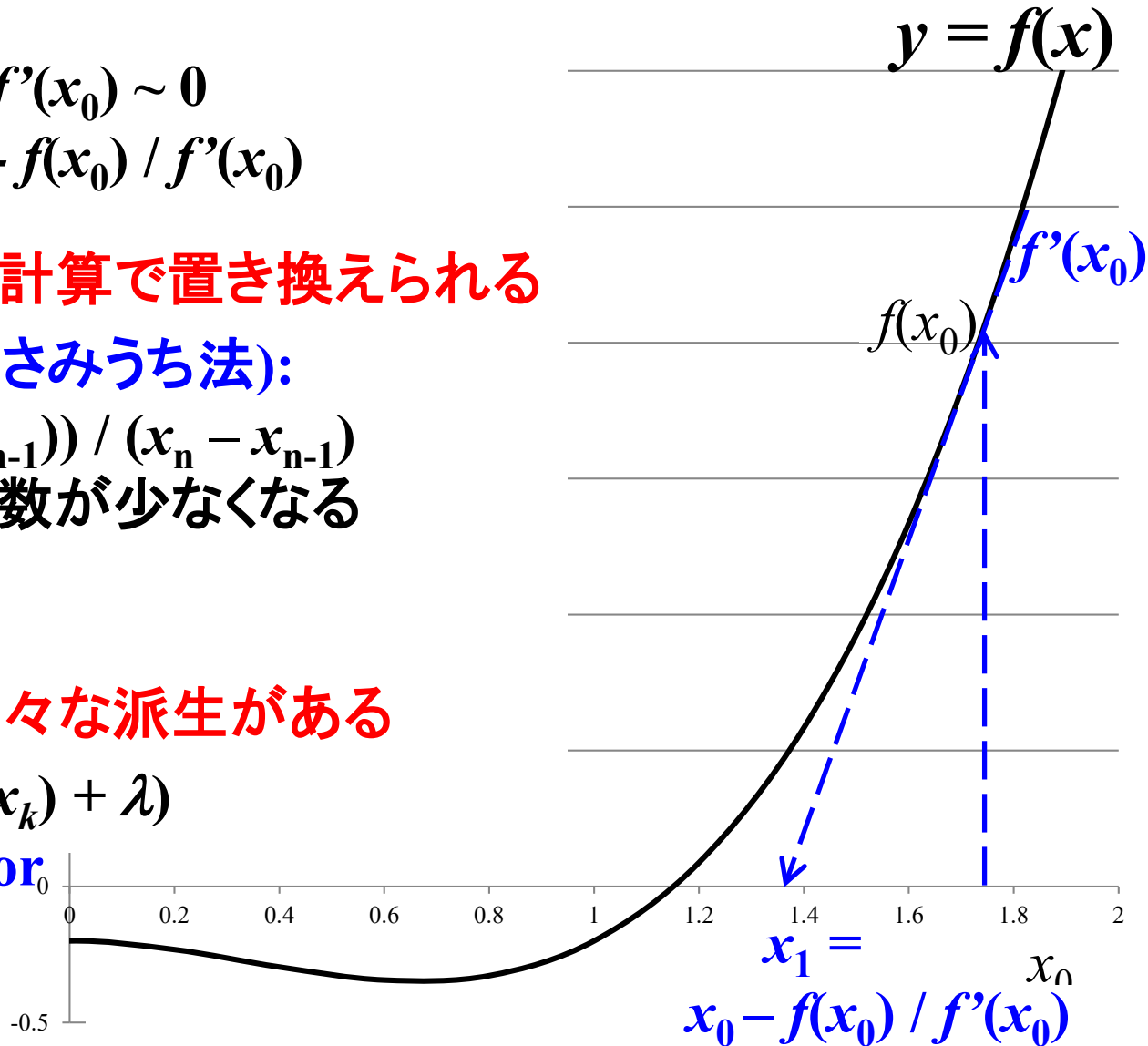
$$f'(x) = (f(x_n) - f(x_{n-1})) / (x_n - x_{n-1})$$

を使う。 $f(x)$ の計算回数が少なくなる

発散を抑える工夫で様々な派生がある

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) / (f'(x_k) + \lambda)$$

λ : Dumping Factor



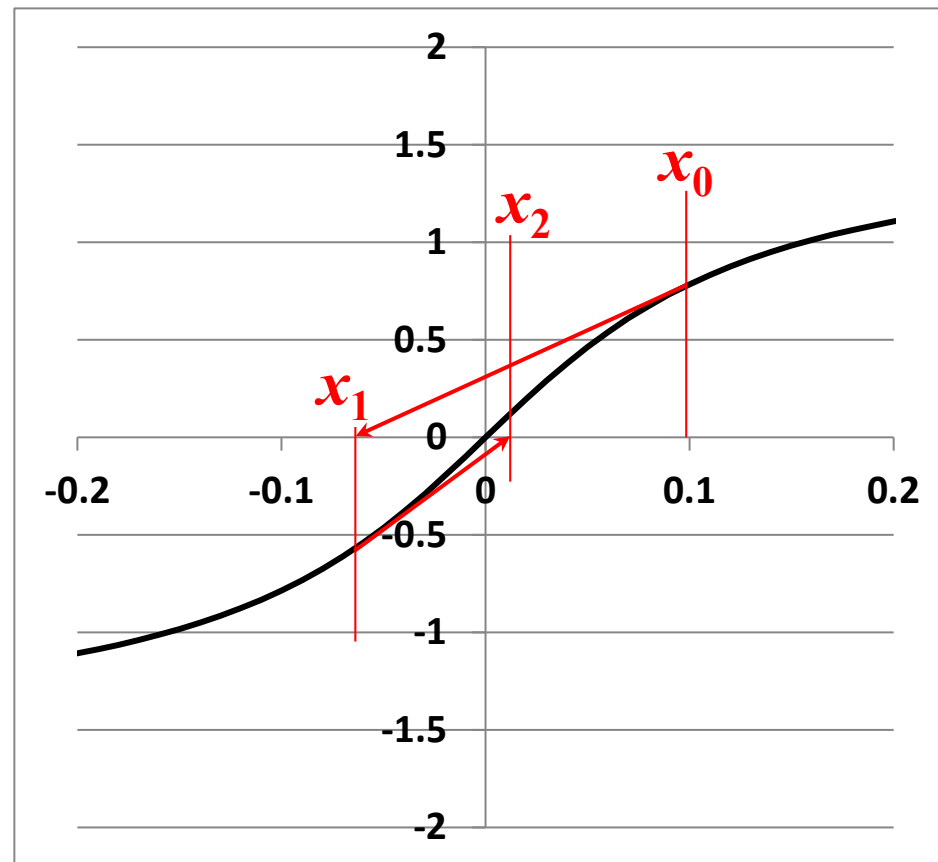
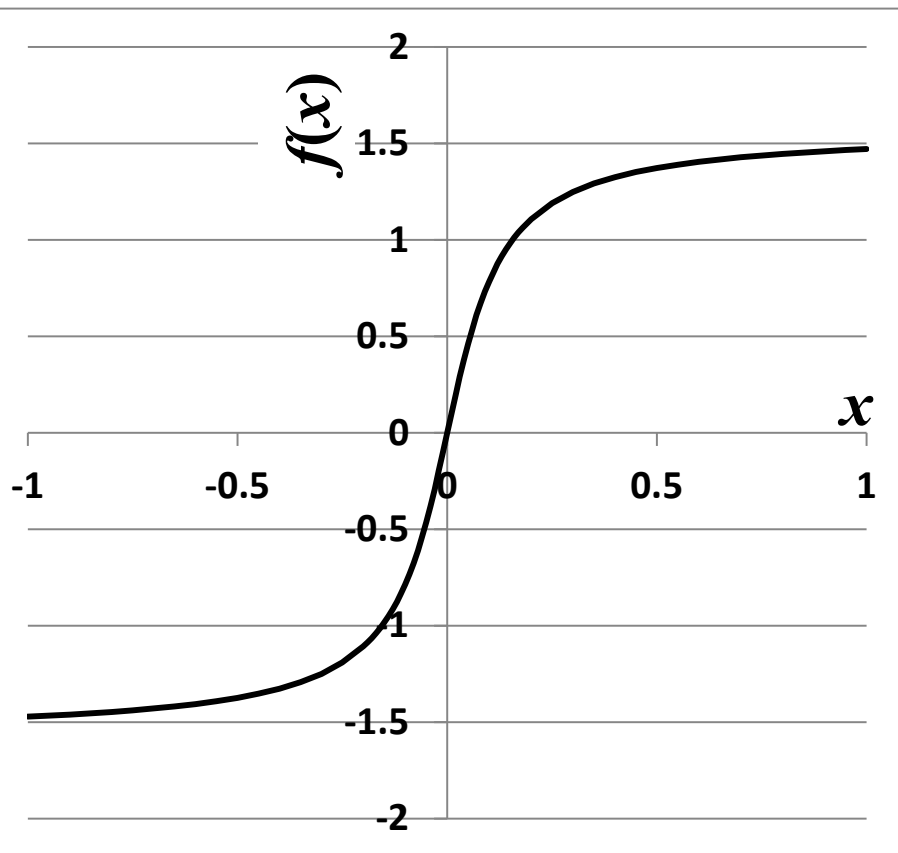
Newton法が難しい例

$$f(x) = \tan^{-1}(10x)$$

初期値 $x = 0.1$

収束する場合

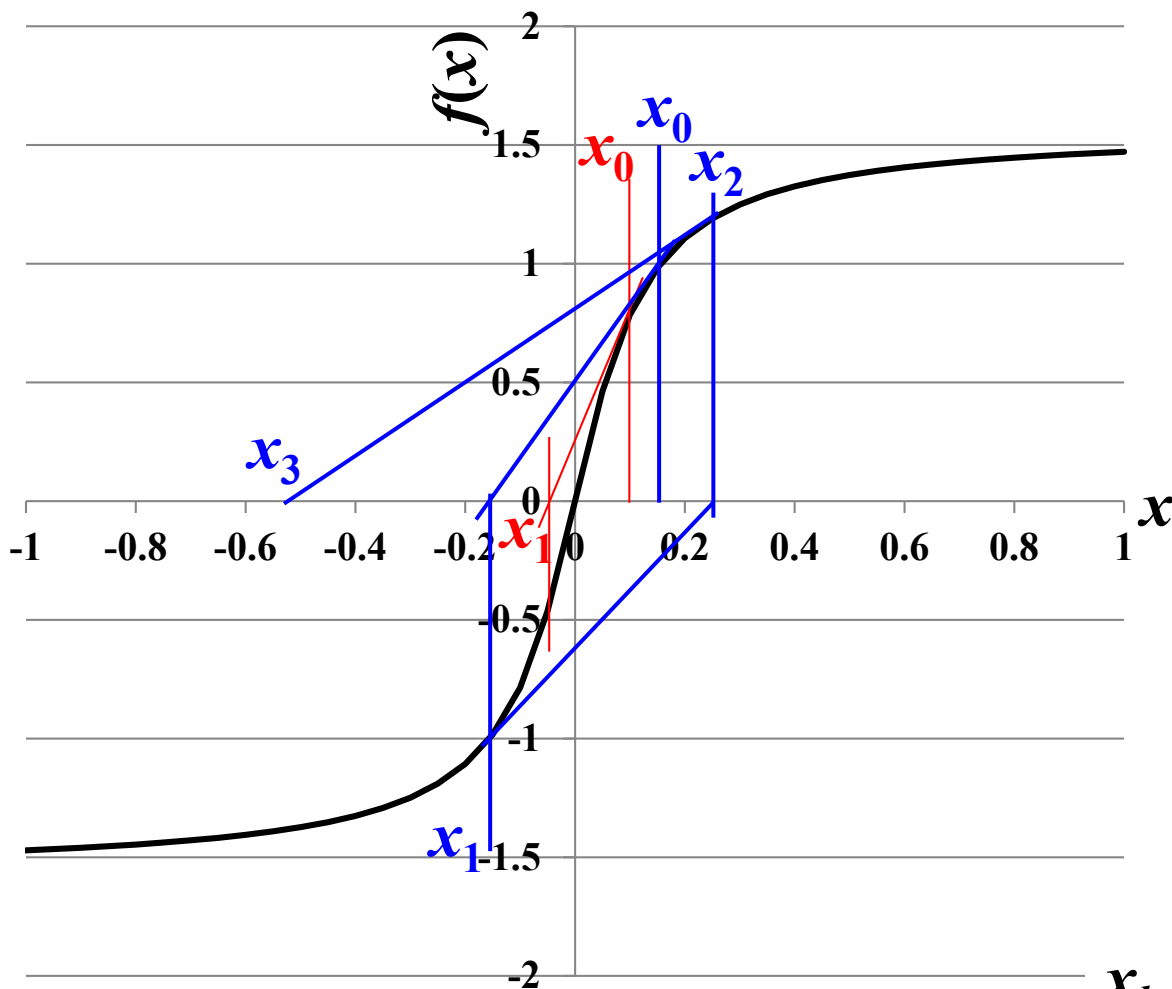
i	x	f(x)	df/dx	dx
0	0.1	0.7854	5	-0.1571
1	-0.05708	-0.5187	7.54257	0.06877
2	0.011686	0.11633	9.86527	-0.0118
3	-0.00011	-0.0011	9.99999	0.00011
4	1.15E-10	1.2E-09	10	-1E-10



Newton法が難しい例

$$f(x) = \tan^{-1}(10x)$$

初期値 $x = 0.15$



発散する場合 ($\lambda = 0$)

i	x	f(x)	df/dx	dx
0	0.15	0.98279	3.07692	-0.3194
1	-0.16941	-1.0375	2.58404	0.40152
2	0.232112	1.164	1.56553	-0.7435
3	-0.51141	-1.3777	0.36827	3.74095
4	3.229546	1.53984	0.00958	-160.76
5	-157.529	-1.5702	4E-06	389644
6	389486.7	1.5708	1.1E-12	-1E+12

ダンピングファクターで
収束を安定化 ($\lambda = 1$)

i	x	f(x)	df/dx	dx
0	0.15	0.98279	3.07692	-0.2411
1	-0.09106	-0.7387	5.46675	0.11422
2	0.023161	0.2276	9.49088	-0.0217
3	0.001466	0.01466	9.99785	-0.0013
4	0.000133	0.00133	9.99998	-0.0001
5	1.21E-05	0.00012	10	-1E-05
6	1.1E-06	1.1E-05	10	-1E-06
7	1E-07	1E-06	10	-9E-08
8	9.09E-09	9.1E-08	10	-8E-09
9	8.27E-10	8.3E-09	10	-8E-10

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) / (f'(x_k) + \lambda)$$

λ : Damping Factor

Fermi準位の計算: プログラム

$\Delta Q(E_F) = (n_e + N_A^-) - (n_h + N_D^+) = 0$ を満たす E_F を求める。

Newton法は発散しやすい \Rightarrow 二分法を使う

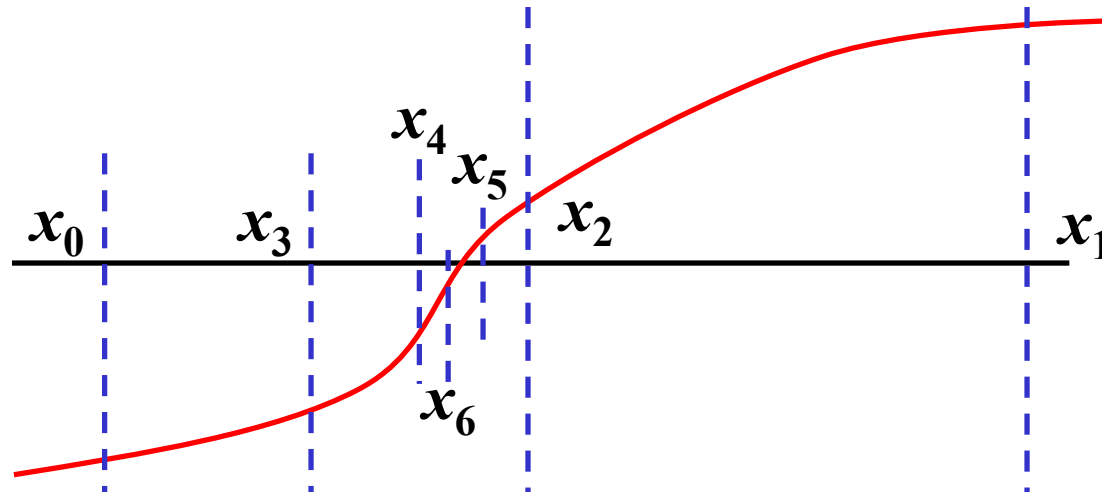
数値積分の講義資料: <http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/python/index-numericalanalysis.html>

原理: $f(x)$ が単調関数であれば、解 x は $f(x_0) < 0$ かつ $f(x_1) > 0$

(あるいは $f(x_0) > 0$ かつ $f(x_1) < 0$) を満たす区間 $[x_0, x_1]$ に1つ存在する。

手順: $f(x_0) < 0$ かつ $f(x_1) > 0$ の場合を考える ($f(x_0) \cdot f(x_1) < 0$ で判断)。

1. $x_2 = (x_0 + x_1) / 2.0$
2. $f(x_2) > 0$ ($f(x_0) \cdot f(x_2) < 0$) であれば、 x_1 を x_2 で置き換える
 $f(x_2) < 0$ ($f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$) であれば、 x_0 を x_2 で置き換える
3. $|x_1 - x_0|, |f(x_1) - f(x_0)|$ が必要な精度以下になったら、
解を x_2 にして反復終了
4. 1. に戻って反復



Fermi準位の計算: プログラム

プログラム: EF-T-semiconductor.py

使用法: python EF-T-semiconductor.py EA NA ED ND Ec Nv Nc

使用例: python EF-T-semiconductor.py 0.05 1.0e15 0.95 1.0e16 1.0 1.2e19 2.1e18

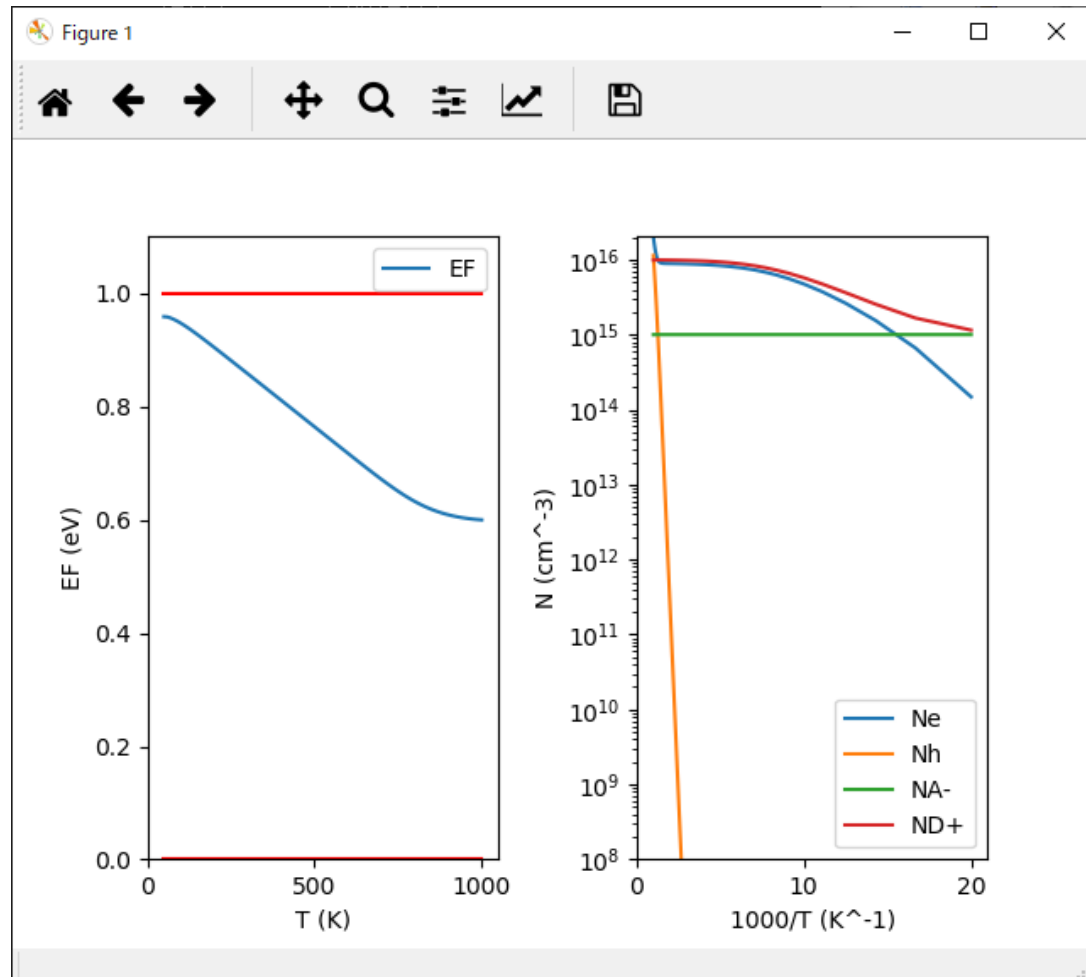
$E_c = 0$, $E_v = 1.0$ eV (= バンドギャップ)

$E_A = 0.05$ eV, $N_A = 10^{15}$ cm⁻³,

$E_D = 0.95$ eV, $N_D = 10^{16}$ cm⁻³

$N_c = 1.2 \times 10^{19}$ cm⁻³

$N_v = 2.1 \times 10^{18}$ cm⁻³



Fermiエネルギーの温度依存性

真性半導体 $N_D = N_A = 0$

電荷中性条件 $n_e = n_h$

$$N_C \exp(-\beta(E_C - E_F)) = N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

$$E_F = \frac{E_V + E_C}{2} + \frac{k_B T}{2} \log \left(\frac{N_V}{N_C} \right)$$

$$n_e = n_h = \sqrt{N_V N_C} \exp \left(-\frac{E_C - E_V}{2k_B T} \right) = \sqrt{N_V N_C} \exp \left(-\frac{E_g}{2k_B T} \right)$$

N型半導体 $n_h \sim 0, N_A = 0$

電荷中性条件

$$n_e = N_D^+ \sim N_D \exp(-\beta(E_F - E_D))$$

$$(\beta(E_F - E_D) \gg 1)$$

$$E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{k_B T}{2} \log \left(\frac{N_D}{N_C} \right)$$

$$n_e = \sqrt{N_C N_D} \exp \left(-\frac{E_C - E_D}{2k_B T} \right)$$

P型半導体 $n_e \sim 0, N_D = 0$

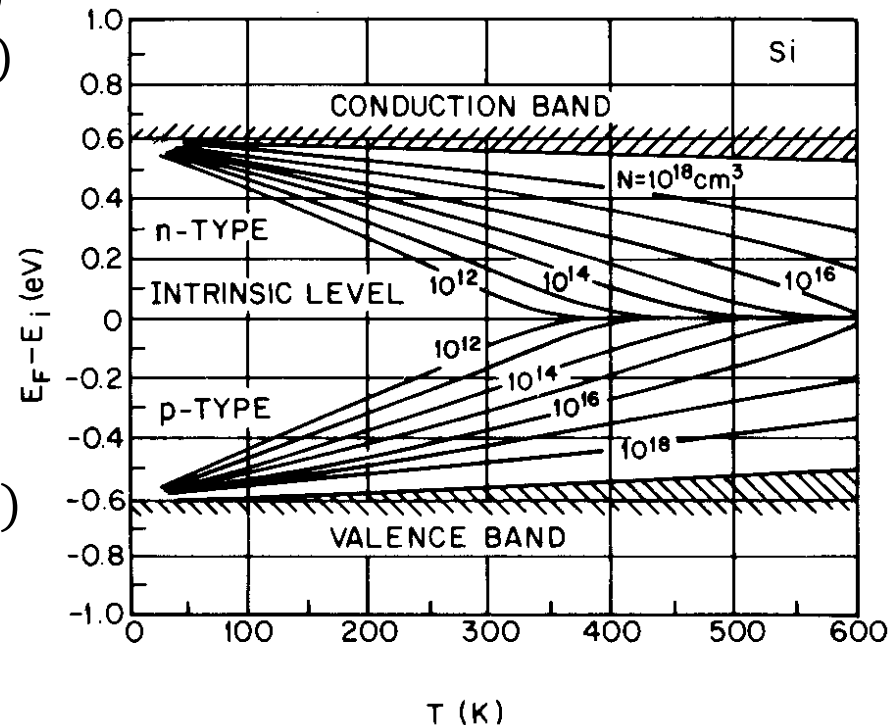
電荷中性条件

$$n_h = N_A^- \sim N_A \exp(-\beta(E_A - E_F))$$

$$(\beta(E_A - E_F) \gg 1)$$

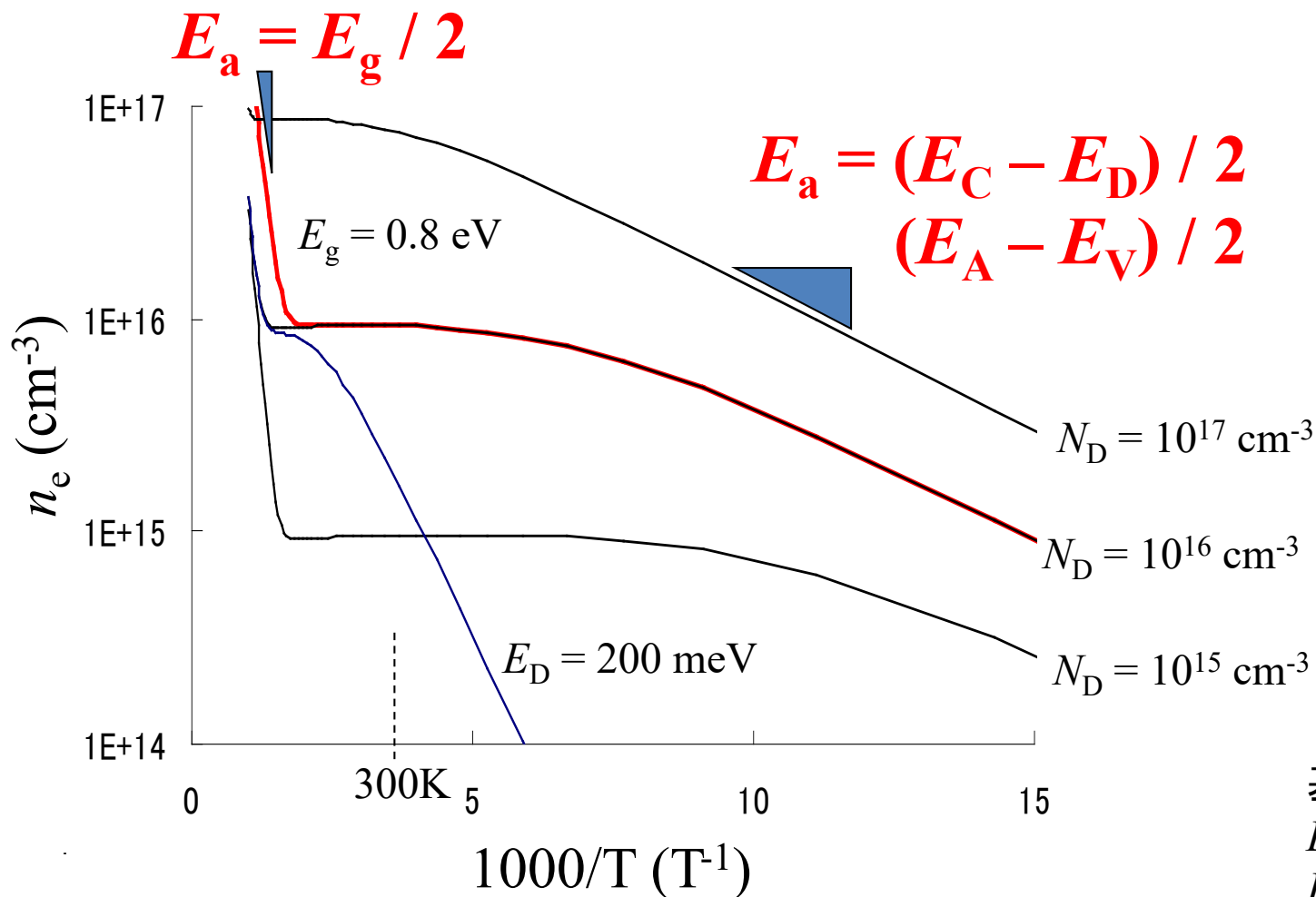
$$E_F = \frac{E_V + E_A}{2} - \frac{k_B T}{2} \log \left(\frac{N_A}{N_V} \right)$$

$$n_h = \sqrt{N_V N_A} \exp \left(-\frac{E_A - E_V}{2k_B T} \right)$$



キャリア密度の温度依存性とドナー準位

真性領域 – 出払い領域 – 不純物領域



基本パラメータ

$$E_g = 1.12 \text{ eV}$$

$$E_D = 45 \text{ meV}$$

$$N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

半導体: キャリア輸送

移動度とは？

$$\sigma = en\mu$$

Definition in solid-state physics

一電子の運動方程式 $F = m_e \left(\frac{d}{dt} v - \frac{1}{\tau} v \right) = qE$

m_e : 有効質量

τ : 運動量緩和時間 (散乱時間)

電子が持っている運動量が散乱を受けて
0 になる平均時間

定常状態での速度 $v = \mu E = \frac{e}{m_e} \tau E$

ドリフト速度 v_d : 電界によって駆動される速度

⇔ 熱速度、Fermi速度、拡散速度

ドリフト移動度 $\mu_d = \frac{v_d}{E} = \frac{e}{m_e} \tau$

バンド伝導の極限条件

$$v_{th} = \sqrt{2m_e^* k_B T} = 2 \times 10^5 \text{ m/s}$$

$$l_{th} = v_{th} \tau \gg \text{最近接原子間距離}$$

a-IGZO中のIn-In距離: 3.1 Å

$$\Rightarrow \tau \gg 1.5 \text{ fs}$$

$$\mu = \frac{e\tau}{m_e^*} \xrightarrow{m_e^* = 0.35 m_e} \mu \gg 8 \text{ cm}^2/\text{Vs}$$

バンド伝導に必要

ところが、IGZOでは $\sim 0.2 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ の

Hall移動度が測定可能 $l_{th} = 0.1 \text{ Å} ???$

Simple model of carrier transport

簡単なモデル解析

Hall効果

電荷 q (電子: $-e$, 正孔: $+e$)

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x = q(E + Bv_y)$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_z = 0$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y = q(-Bv_x)$$

$$v_x = -\frac{e\tau}{m^*} E - \omega_c \tau v_y$$

$$v_y = \omega_c \tau v_x \quad v_z = 0 \quad \omega_c = eB/m^*c$$

$$m^* \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y = q(E_{Hall} - Bv_x)$$

$$E_{Hall} = \frac{H}{c} v_x = \frac{qH\tau}{m^*c} E \quad j_x = \frac{nq^2\tau}{m^*} E_x$$

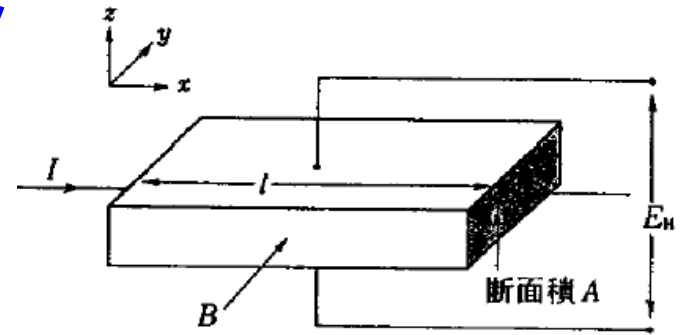
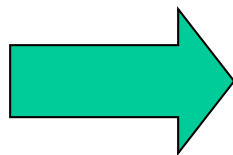


図 3.24 Hall 効果の実験

$$R_H = \frac{E_{Hall}}{j_x B} = \frac{1}{nq}$$



キャリア極性(R_H の符号)、キャリア濃度 n_{Hall} 、移動度 μ_{Hall}

Hall effect

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

$-e$: Electron charge, Under E_x and B_z

Motion of dynamics
$$m_e^* \left(\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} + \frac{\mathbf{v}_i}{\tau} \right) = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B})$$

Average velocity
$$\langle \mathbf{v} \rangle = \sum \mathbf{v}_i / n$$

$$m_e^* \left(\frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} + \frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{\tau} \right) = -e(\mathbf{E} + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B})$$

$$m_e^* \langle \mathbf{v} \rangle_x = -e\tau (E_x + \langle \mathbf{v} \rangle_y B_z)$$

$$m_e^* \langle \mathbf{v} \rangle_y = -e\tau (E_y - \langle \mathbf{v} \rangle_x B_z)$$

$$m_e^* \langle \mathbf{v} \rangle_z = -e\tau E_z$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle_x = -\frac{e\tau}{m_e^*} \frac{E_x + \frac{e\tau}{m_e^*} B_z E_y}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*} \right)^2 B_z^2}$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle_y = -\frac{e\tau}{m_e^*} \frac{E_y - \frac{e\tau}{m_e^*} B_z E_x}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*} \right)^2 B_z^2}$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle_z = -\frac{e\tau}{m_e^*} E_z$$

Hall effect

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

$$\begin{aligned}
 \text{Current } \mathbf{J} = -en\langle \mathbf{v} \rangle &= \frac{e^2 n \tau}{m_e^*} \begin{pmatrix} \frac{1}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & \frac{\left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right) B_z}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & 0 \\ -\frac{\left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right) B_z}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & \frac{1}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \\
 &= \sigma_{xx} \left[\mathbf{E} + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 \mathbf{B}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}) + \frac{e\tau}{m_e^*} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \right] \\
 &\quad \omega_c = \left(\frac{e}{m_e^*}\right) B_z: \text{cyclotron frequency}
 \end{aligned}$$

Hall効果

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

Hall効果測定の場合 $J_y = 0$ ($\mu = \frac{e\tau}{m_e^*}$) より

$$en\mu \begin{pmatrix} \frac{1}{1+\mu^2 B_z^2} & \frac{\mu B_z}{1+\mu^2 B_z^2} \\ -\frac{\mu B_z}{1+\mu^2 B_z^2} & \frac{1}{1+\mu^2 B_z^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1+\mu^2 B_z^2} \begin{pmatrix} 1 & \mu B_z \\ -\mu B_z & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}$$

$$E_x = \frac{1}{\sigma_0} \frac{J_x \sigma_{xx}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{yx}\sigma_{yx}} = \frac{1}{\sigma_0} J_x$$

$$E_y = -\frac{1}{\sigma_0} \frac{J_x \sigma_{yz}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{yx}\sigma_{yx}} = \frac{1}{\sigma_0} \mu B_z J_x = \frac{1}{en} B_z J_x = R_H B_z J_x$$

$$R_H = -\frac{E_y}{B_z J_x} = -\frac{V_H W d}{W I_x B_z} \frac{1}{B_z} = -\frac{V_H d}{I_x B_z} = -\frac{1}{en} \text{ (for electron)}$$

Hall effect: Two-carrier model

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

$$\text{Current } \mathbf{J} = -e\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{e^2 n \tau}{m_e^*} \begin{pmatrix} \frac{1}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & \frac{\left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right) B_z}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & 0 \\ -\frac{\left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right) B_z}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & \frac{1}{1 + \left(\frac{e\tau}{m_e^*}\right)^2 B_z^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

Two carrier model

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_e + \mathbf{J}_h = (\sigma_e + \sigma_h) \mathbf{E} + (-\sigma_e \mu_e + \sigma_h \mu_h) \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h + n_e \mu_e) + (n_h \mu_h + n_e \mu_e) \mu_h \mu_e B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}$$

$$\rho_{yx}(B) = B \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) + (n_h - n_e) \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}$$

Hall effect: Two-carrier model with $n_e \sim n_h$

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

Two carrier model

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h + n_e \mu_e) + (n_h \mu_h + n_e \mu_e) \mu_h \mu_e B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}$$

$$\rho_{yx}(B) = B \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) + (n_h - n_e) \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}$$

$$n_e \sim n_h \sim n$$

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{en} \frac{1 + \mu_h \mu_e B^2}{\mu_h + \mu_e}$$

$$\rho_{yx}(B) = B \frac{1}{en} \frac{\mu_h - \mu_e}{\mu_h + \mu_e}$$

Hall effect: Two-carrier model with $\mu_h \sim \mu_e$

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

Two carrier model

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h + n_e \mu_e) + (n_h \mu_h + n_e \mu_e) \mu_h \mu_e B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}$$

$$\rho_{yx}(B) = B \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) + (n_h - n_e) \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}$$

$$\mu_h \sim \mu_e \sim \mu$$

$$\begin{aligned} \rho_{xx}(B) &= \frac{1}{e \mu (n_h + n_e)} \frac{1 + \mu^2 B^2}{1 + (n_h - n_e)^2 / (n_h + n_e)^2 \mu^2 B^2} \\ &\sim \rho_0 (1 + \mu^2 B^2 - (n_h - n_e)^2 / (n_h + n_e)^2 \mu^2 B^2) \\ &\sim \rho_0 (1 + \mu^2 B^2) \end{aligned}$$

$$\rho_{yx}(B) = B \frac{1}{e (n_h + n_e)} \frac{1 + \mu^2 B^2}{1 + (n_h - n_e)^2 / (n_h + n_e)^2 \mu^2 B^2} \sim B \frac{1}{e (n_h + n_e)}$$

Hall effect: Two-carrier model

太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

When electrons and holes coexist

$$\mathbf{J}_e = \sigma_e \mathbf{E} - \sigma_e \mu_e \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{J}_h = \sigma_h \mathbf{E} + \sigma_h \mu_h \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_e + \mathbf{J}_h = (\sigma_e + \sigma_h) \mathbf{E} + (-\sigma_e \mu_e + \sigma_h \mu_h) \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

$$R_H = \frac{n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2}{e(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2}$$

- (i) Only holes: $n_e = 0 \Rightarrow R_H = \frac{1}{en_h}$
- (ii) Same mobility: $\mu_h = \mu_e = \mu \Rightarrow R_H = \frac{n_h - n_e}{e(n_h + n_e)^2}$
- (iii) Nearly intrinsic: $n_h \sim n_e \sim n_i \Rightarrow R_H = \frac{1 - \mu_e / \mu_h}{en_i(1 + \mu_e / \mu_h)}$

多バンド、狭いバンドギャップのHall係数

多バンド、多層膜

$$R_H = \gamma \sum \frac{\text{sgn}_i n_i \mu_i^2}{q \left(\sum n_i \mu_i \right)^2} \quad \sigma = q \sum n_i \mu_i$$

電子・正孔が共存

$$R_H = \gamma \sum \frac{p \mu_p^2 - n \mu_n^2}{q \left(n \mu_n + p \mu_p \right)^2} \quad \sigma = q \sum n_i \mu_i$$

Two carrier model of MR

MR-TwoCarriermodel.py (available at our Lab only web)

e.g. in APL 107, 182411 (2015)

$$\rho_{xx}(B) = \text{Re}(\rho) = \frac{1}{e} \frac{(n_h \mu_h + n_e \mu_e) + (n_h \mu_e + n_e \mu_h) \mu_h \mu_e B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2},$$

$$\rho_{yx}(B) = -\text{Im}(\rho) = \frac{B}{e} \frac{(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) + (n_h - n_e) \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 + (n_h - n_e)^2 \mu_h^2 \mu_e^2 B^2}.$$

of parameters must be larger than # of constraints,

of parameters: four n_h, μ_h, n_e, μ_e

of constraints: three

For parabolic $\rho_{xx}(B)$: $a_{xx}^0 = \rho_{xx}(0)$, and a_{xx}^2

For linear $\rho_{xy}(B)$: a_{xy}^1 only

At least two parameter sets give similar residuals S^2

$$n_h = 2.09 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$$

$$\mu_h = 0.074 \text{ m}^2/\text{Vs}$$

$$n_e = 2.72 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$$

$$\mu_e = 0.018 \text{ m}^2/\text{Vs}$$

$$S^2 = 3.2 \times 10^{-14}$$

$$n_h = 9.23 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$$

$$\mu_h = \mu_e = 0.012 \text{ m}^2/\text{Vs}$$

$$n_e = 7.68 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$$

$$S^2 = 3.0 \times 10^{-14}$$

