

#### http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/

# 統計力学 · 半導体

## 2020/4/24 課題

以下の4/23の課題について、解答が違っていた人は、理由も含めて 解答せよ

- 1. 厚さ 100 nmの  $a-SiO_2$ の単位面積当たり静電容量  $C_{OX}$ を求めよ。  $a-SiO_2$ の比誘電率は  $\varepsilon_r = 11.9$ とする。
- TransferCurve.xlsxのデータから、飽和移動度を求めよ 電極幅 W = 300 µm, L = 50 µm とする。 飽和移動度を求める際の Vg、Vd は各自で選ぶこと。 その値を選んだ理由も説明せよ。

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



# キャリア輸送に関する参考文献

- 「薄膜トランジスタ」、薄膜材料デバイス研究会編、コロナ社、2010 年第3刷
- •「半導体評価技術」、河東田隆編著、産業図書、1989年
- 「半導体の電子物性工学」、太田英二、坂田亮共著、培風館、 2005年
- Physics of Semiconductor Devices, S.M. Sze, 1981年
- 「太陽電池の物理」、宇佐美徳隆、石原照也、中嶋一雄監訳、丸善、 2010年
- Heavily doped semiconductors, Victor I. Fistul', Plenum Press, 1969
- ・「熱電変換工学ー基礎と応用ー」、坂田亮編、REALIZE INC.
- ・「熱電材料の物質科学」、寺崎一郎、内田老鶴圃、2017年

# Termoelectrics 熱起電力

#### Thermoelectricity: Boltzmann equation 太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

Boltzmann-Bloch equation  $\frac{df(k)}{dt} = -\frac{F}{\hbar} \frac{\partial f(k)}{\partial k} - v_k \frac{\partial f(k)}{\partial r} - \frac{f(k) - f_0(k)}{\tau(k)}$   $v_k = \frac{d\varepsilon(k)}{dk}: \text{ group velocity} \Leftrightarrow v_p = \frac{\varepsilon(k)}{k}: \text{ phase velocity}$ Steady-state  $\frac{df(k)}{dt} = -\frac{F}{\hbar} \cdot \frac{\partial f(k)}{\partial k} - v_k \cdot \frac{\partial f(k)}{\partial r} - \frac{f(k) - f_0(k)}{\tau(k)} = 0$ 

Non-uniform *T* and chemical potential  $\eta$ : depend on position *r*   $f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) = -\tau(\mathbf{k}) \left( \frac{F}{\hbar} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} \right)$   $= -\tau(\mathbf{k}) \left( e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot T\nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right)$  $= -\tau(\mathbf{k}) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \left( e\mathbf{E} + T\nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} \right)$ 

#### Thermoelectricity: Boltzmann equation 太田英二、坂田亮著、半導体の電子物性光学、培風館 (2005)

$$J = en \frac{\int (v_k \otimes v_k) \tau(k) \left( -\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \left[ eE + T\nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} \right] dk}{\int f_0(k) dk}$$
$$(v_k \otimes v_k) = (v_{k,i} v_{k,j}): \text{ Direct product of vectors}$$

$$\nabla \frac{\varepsilon - \eta}{T} = -\frac{\varepsilon - \eta}{T} \nabla T - \nabla \eta$$

Chemical potential  $\eta$  is a function of carrier density n(r) $J = \sigma \cdot E + en \frac{\langle \tau \rangle}{m_e^*} \left[ \frac{1}{T} \left( \frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta + T \frac{\partial \eta}{\partial T} \right) \nabla T + \frac{\partial \eta}{\partial n} \nabla n \right]$   $= \sigma \cdot E + \sigma \left[ S \nabla T + \frac{1}{e} \frac{\partial \eta}{\partial n} \nabla n \right]$ 

$$S = \frac{1}{eT} \left[ \left( \frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta + T \frac{\partial \eta}{\partial n} \right) \right]$$

# 熱起電力(Seebeck係数)

$$S = \frac{1}{eT} \left[ \left( \frac{\langle \tau \varepsilon \rangle}{\langle \tau \rangle} - \eta + T \frac{\partial \eta}{\partial n} \right) \right]$$

$$S = -\frac{k}{e} \frac{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) D(E) v^2 \tau \left[\frac{E-E_F}{kT}\right] dE}{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) D(E) v^2 \tau dE} + \frac{1}{e} \frac{\partial E_F}{\partial T} \quad \text{Seebeck}$$

$$\tau = (m_e^*/2)^{1/2} l_0(T) E^{r-1/2}$$

**縮退半導体**:バンドが自由電子的な単一バンドで、τ=τ<sub>0</sub>+((E-E<sub>F</sub>)/E<sub>F</sub>) τ<sub>1</sub>の場合

$$S \sim -\frac{k}{e} \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{3}{2} + \frac{\tau_1}{\tau_0} \right) \frac{kT}{E_F}$$

非縮退半導体:

$$S \sim -\frac{k}{e} \left( \frac{E_C - E_F}{kT} + r + 2 \right) = -\frac{k}{e} \left( \ln \frac{N_C}{N_e} + r + 2 \right)$$
$$S \sim +\frac{k}{e} \left( \frac{E_F - E_V}{kT} + r + 2 \right) = +\frac{k}{e} \left( \ln \frac{N_V}{N_h} + r + 2 \right)$$

 $\tau = \left(m_e^* / 2\right)^{1/2} l_0(T) E^{r-1/2}$ 

正孔
----

**ホッピング伝導 (small polaron):** エントロピー輸送  $S = \frac{k}{e} \ln \left( \frac{n}{N-n} \right)$ 



非縮退n型半導体:

$$S \sim -\frac{k}{e} \left( \frac{E_C - E_F}{kT} + r + 2 \right) = -\frac{k}{e} \left( \ln \frac{N_C}{N_e} + r + 2 \right)$$

$$n_e = N_C exp(-\beta(E_C - E_F))$$
$$N_C = 2\left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

Jonkerプロット  

$$S = -\frac{k}{e} [\ln N_C + r + 2 - \ln N_e] = -\frac{k}{e} [\ln N_C + r + 2 + \ln e\mu - \ln \sigma]$$

Jonkerプロットから有効質量を求める  
$$S = -\frac{k}{e} \left[ \frac{3}{2} \ln m_e^* + \ln 2 \left( \frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} + r + 2 - \ln N_e \right]$$



G.H. Jonker, Philips Res. Repts 23 (1968) 131; Kamiya et al., Adv. Funct. Mater. 15, 968 (2004)

#### **Mott's formula of Seebeck coefficient**

寺崎一郎著、熱電材料の物質科学、内田老鶴圃 (2017)

$$\alpha_{xx} = \frac{1}{eT} \frac{\int D(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) v_x^2 \tau(E) (E - E_F) dE}{\int D(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) v_x^2 dE}$$

$$\sigma(E) = D(E)v_x^2 \tau \sim \sigma(E_F) + \sigma'(E_F)(E - E_F) + \cdots:$$
  
conductivity-like function (電気伝導率的関数)  
分子  $\int D(E)v_x^2 \tau(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) (E - E_F) dE$   
 $= \int \{\sigma(E_F)(E - E_F) + \sigma'(E_F)(E - E_F)^2\} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE = \frac{\pi^2}{3} (kT)^2 \sigma'(E_F)$   
分母  $\int D(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) v_x^2 dE = \int \sigma(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE = \sigma(E_F)$ 

$$\alpha_{xx} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k}{e} (kT) \frac{d\sigma(E)}{dE} \Big|_{E=E_F} / \sigma(E_F) = \frac{\pi^2}{3} \frac{k}{e} (kT) \frac{d\ln D(E)}{dE} \Big|_{E=E_F}$$
Mottの公式  
自由電子モデル  $\alpha_{xx} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k}{e} \frac{kT}{E_F}$ 

# 局在電子のSeebeck係数符号反転

局在状態でのVRH伝導の場合  
(拡散係数をエネルギーに対して一定とする)。  
Mottの式:
$$S = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{e} \left( \frac{d \ln \sigma(E)}{dE} \right)_{E=E_F}$$
  
 $\sigma(E) = D(E) v_x^2 \tau \sim \sigma(E_F) + \sigma'(E_F)(E - E_F) + \cdots$ :

Γ

$$S = \frac{1}{2} \frac{k_B}{e} \frac{W^2}{k_B T} \left( \frac{d \ln D(E)}{dE} \right)_{E=E_F} = \frac{1}{2} \frac{k_B^2}{e} (T_0 T)^{1/2} \left( \frac{d \ln D(E)}{dE} \right)_{E=E_F}$$

$$W = k_B \left( T_0 T^3 \right)^{1/4}$$

$$\pi v \ell^2 \nu f on \exists tet (t \pm \pi n \nu \vec{\tau} - t \pm \eta \nu) \ell (t \pm \eta \nu) dt = \delta dt =$$

# **Field-effect mobility**

# 電界効果移動度

電界効果トランジスタ(FET)の基本動作

#### トランジスタの基本機能 1. 増幅機能 ゲート電圧に電流が比例する領域を利用 2. スイッチ機能 ゲート電圧による大きな電流の変調を利用





#### MOSFETの電流-電圧特性(第0近似)





### FET特性の解析:線形領域

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} \left[ (V_{GS} - V_{th}) V_{DS} - \frac{V_{DS}^{2}}{2} \right]$$

$$V_{DS} << V_{p} (V_{GS}) (e.g., << 0.1 V)$$

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{DS} (V_{GS} - V_{th})$$

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{DS} (V_{GS} - V_{th})$$

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{DS} (V_{GS} - V_{th})$$

$$I_{DS} = \frac{W}{L} \mu C_{OX} V_{DS} (V_{GS} - V_{th})$$

有効移動度 (effective mobility): μ<sub>eff</sub> 電界効果移動度 (field-effect mobility): μ<sub>FE</sub>

$$\mu_{eff} = g_{DS} \frac{L}{WC_{OX}(V_{GS} - V_{th})} \qquad \qquad \mu_{FE} = g_m \frac{L}{WC_{OX}V_{DS}}$$
$$g_{DS} = \frac{dI_{DS}}{dV_{DS}} \quad \text{Drain conductance} \qquad \qquad g_m = \frac{dI_{DS}}{dV_{GS}} \quad \text{Transconductance}$$

# **Space charge limited current (SCLC)**

# 空間電荷制限電流

# 大電流条件での熱電子放出電流: 空間電荷制限電流(SCLC)(電子放出)

真空に放出された電荷が形成する静電ポテンシャルが「荷電粒子ビーム工学」, コロナ社 無視できない場合

電子の速度 v(x), 真空中の静電ポテンシャル V(x)は x の関数

$$\frac{1}{2}mv(x)^{2} = eV$$
**電流連続の条件**

$$j(x) = en(x)v(x) = j$$
**Poissonの方程式**

$$\frac{d^{2}V(x)}{dx^{2}} = \frac{en_{e}(x)}{\varepsilon_{0}} = \frac{J}{\varepsilon_{0}} \left(\frac{m_{e}}{2eV}\right)^{1/2}$$

$$\frac{dV}{dx}$$
**を両辺にかけて積分**

$$\left(\frac{dV(x)}{dx^{2}}\right)^{1/2} = \frac{4J}{\varepsilon_{0}} \left(\frac{m_{e}}{2e}\right)^{1/2} V^{1/2} + C$$

最大の電流が流れる条件 E(0) = 0 として解く

$$V = \left(\frac{3}{4}\right)^{4/3} \left(\frac{4J}{\varepsilon_0}\right)^{2/3} \left(\frac{m_e}{2e}\right)^{1/3} x^{4/3}$$
$$J = \frac{4\varepsilon_0}{9} \left(\frac{2e}{m_e}\right)^{1/2} \frac{V^{3/2}}{d^2} \quad \begin{array}{c} \text{Child-Langmuirの式}\\ \text{Ohmの法則は成立しない} \end{array}$$

### 空間電荷制限電流(SCLC)

外部から注入された電荷が物質内の 自由電荷密度に比べて無視できない場合

$$w(x) = \mu \frac{dV}{dx} \qquad J(x) = en_e(x)w(x) = J$$
$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{en_e(x)}{\varepsilon_r} = \frac{J}{\varepsilon_r \mu} \left(\frac{dV}{dx}\right)^{-1}$$

$$J = \frac{9}{8} \varepsilon \mu \frac{V^2}{d^3}$$

SCLC with trap state:  $h(E) = \frac{H_t}{E_t} \exp\left(-\frac{E}{E_t}\right)$  $J = e^{1-l} \mu_p N_v \left(\frac{2l+1}{l+1}\right)^{l+1} \left(\frac{l}{l+1}\frac{\varepsilon}{H_t}\right)^l \frac{V^{l+1}}{d^{2l+1}}$ 

$$l = T_c / T = E_t / k / T$$

V. Kumar, S.C. Jain, A.K. Kapoor, J. Poortmans, R. Mertens, *Trap density in conducting organic semiconductors determined from temperature dependence of J-V characteristics*, JAP **94** (2003) 1283.



#### 空間電荷制限電流 vs Ohmic電流



空間電荷制限電流(SCLC) – オーミック

$$\begin{split} &d=200 \text{ nm} \\ &\epsilon_r=3\epsilon_0 \\ &\mu=10^{-4} \text{ cm}^2/\text{Vs} \end{split}$$



#### C12A7e<sup>-</sup>/Cu<sub>x</sub>Se OLEDの例

Yanagi et al., J. Phys. Chem. C 113 (2009) 18379



# **Electronic conduction in polycrystals**

# 多結晶半導体の伝導

#### 移動度のあいまいさ

G = enμ
 任意性なく測定できるのは σ だけ
 ドリフト移動度: μ<sub>d</sub> = μ<sub>drift</sub>/E 物理的な定義
 伝導度移動度: σ = enμ
 μは n の選択によって変わる
 n: Hall効果 => Hall移動度
 光吸収 => 光学移動度
 電界誘起 => 電界効果移動度

非均質材料の場合は?



多結晶シリコンの微構造



# 多結晶半導体における粒界の役割

- アモルファス層 (amorphous tissue): 局所移動度が小さい PECVD低温 微結晶シリコン μc-Si:H 低移動度 <10 cm<sup>2</sup>/Vs 結晶化率と移動度に正の相関
- 多結晶粒界層
  - ・局所移動度が小さい:ひずんだ結合
  - 散乱中心
  - ・ポテンシャル障壁

Setoモデル

粒界欠陥濃度、ドープ濃度により移動度が大きく変化

• 粒界構造:

X線回折rocking curve測定、EBSD (電子後方散乱回折) 結晶粒内の特性

光学移動度(自由キャリア吸収)とHall移動度の比較

- ・高移動度 ELA poly-Siでは比較的小さい影響
- ・低移動度 PECVD μc-Si:Hでは重要

#### **Carrier transport in poly-semiconductors**



### ナノワイアデバイスによる少数粒界の伝導



J.Y.W. Seto, *The electrical properties of polycrystalline silicon films*, J. Appl. Phys. 46 (1975) 5247.

# **Double-Schottky barriercontrolled transport in poly-Si**

$$I(V) = 2qn_P \left(\frac{kT}{2\pi m^*}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{qV_B}{k_B T}\right) \sinh\left(-\frac{qV}{2nk_B T}\right)$$

l<sub>ds</sub> (nA)

0.4

400160K

200

200

400

-0.4

-0.2

0 V<sub>ds</sub> (V) 0.2

Kamiya et al., MRS Proc. 664, A16.2 (2001)



#### Black: experimental data Red: fitting results

0.2

₩9K

200

-200

**4**00

-0.4

-0.2

0

 $V_{ds}$  (V)

I<sub>ds</sub> (nA)

 $E_{\rm a}$ =10meV-80meV

#### **Distribution in poly-Si GB potential height**

(measured using 20-50nm wide nanowires)



T. Kamiya et al, JVSTB 21, 1000(2003)

#### 多結晶ZnOの輸送特性

Ellmer et al., Thin Solid Films 516 (2008) 4620



#### DC mobility (Hall) vs in-grain mobility (FCA)

T. Sameshima, K. Saitoh, N. Aoyama, M. Tanda, M. Kondo, A. Matsuda, S. Higashi, Analysis of free-carrier optical absorption used for characterization of microcrystalline silicon films, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 66 (2001) 389

P- / B-doped mc-Si:H: 100 W RF PECVD, 180°C, SIH4/PH3,B2H6/H2 ELA: 28 ns XeCl excimer laser, 160 to 360 mJ/cm<sup>2</sup>, 5 pulses

