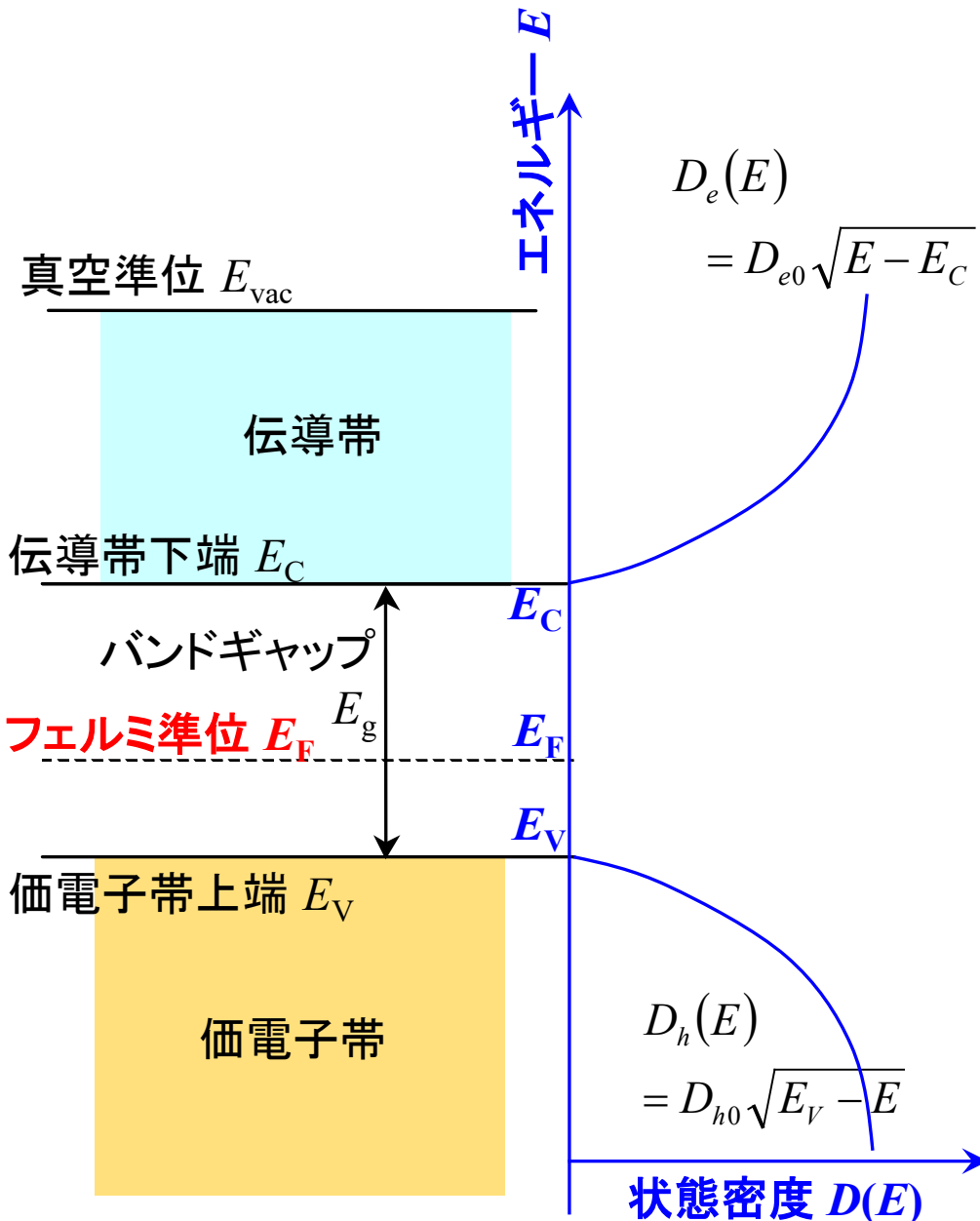


半導体の電子構造



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

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

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

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

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

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

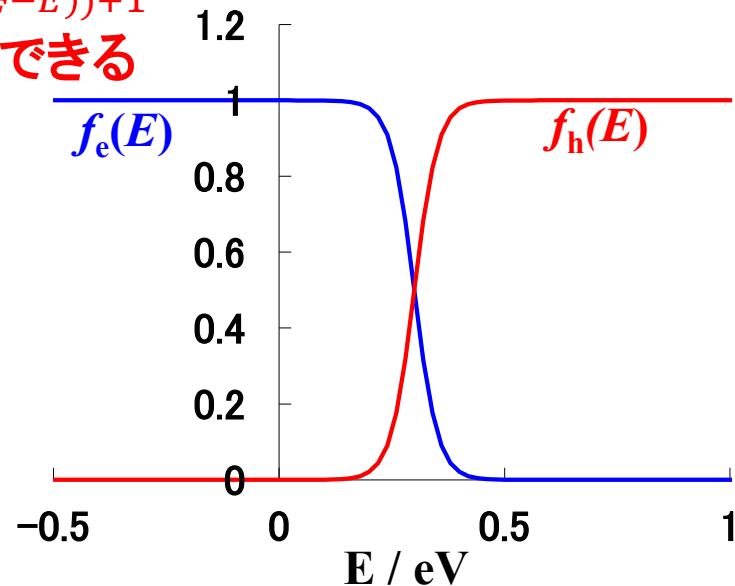
$$f_h(E) = 1 - f(E) = \frac{\exp(\beta(E - E_F))}{\exp(\beta(E - E_F)) + 1} = \frac{1}{\exp(\beta(E_F - E)) + 1}$$

※ 正孔は電子が空いた“孔”とみなすことができる

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

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

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



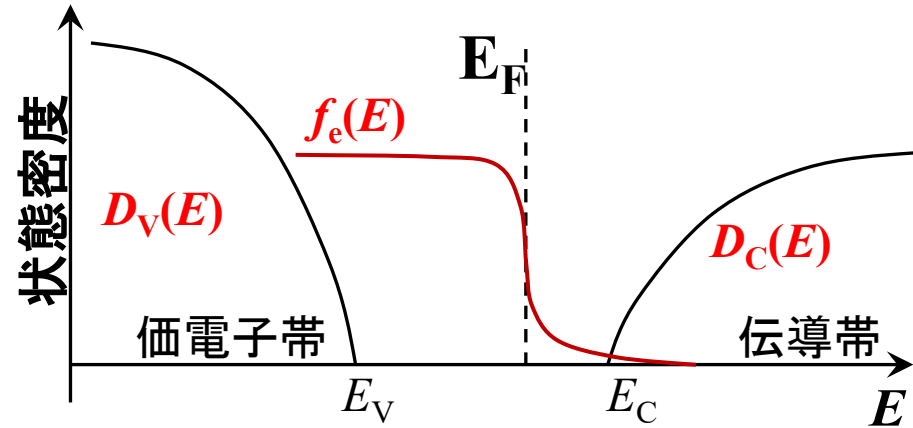
自由電子密度

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

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

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

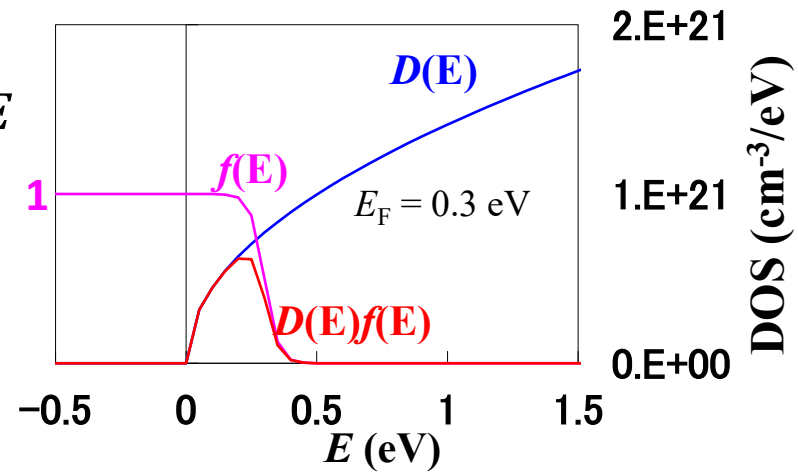
$$D_{C0} = \frac{\sqrt{2} m_e^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$



非縮退半導体 $\beta(E - E_F) \gg 1$ では

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

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



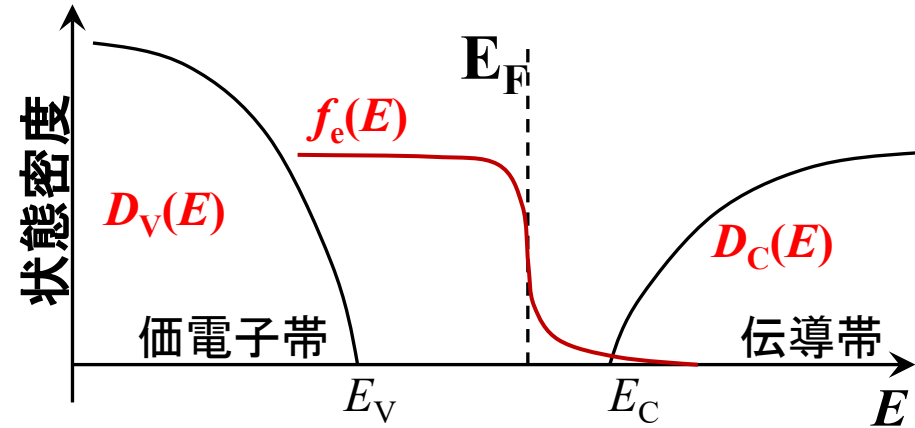
自由電子密度、自由正孔密度

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

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

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

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



非縮退半導体 $\beta(E - E_F) \gg 1$ では

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

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

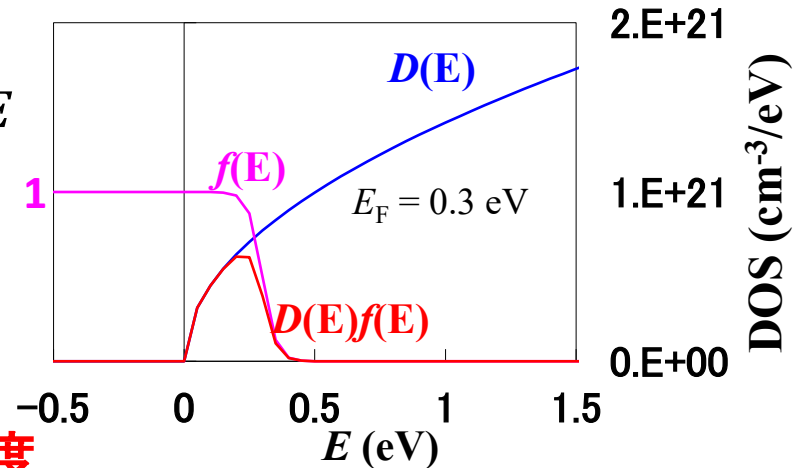
$$n_e = N_C \exp(-\beta(E_C - E_F))$$

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

同様に

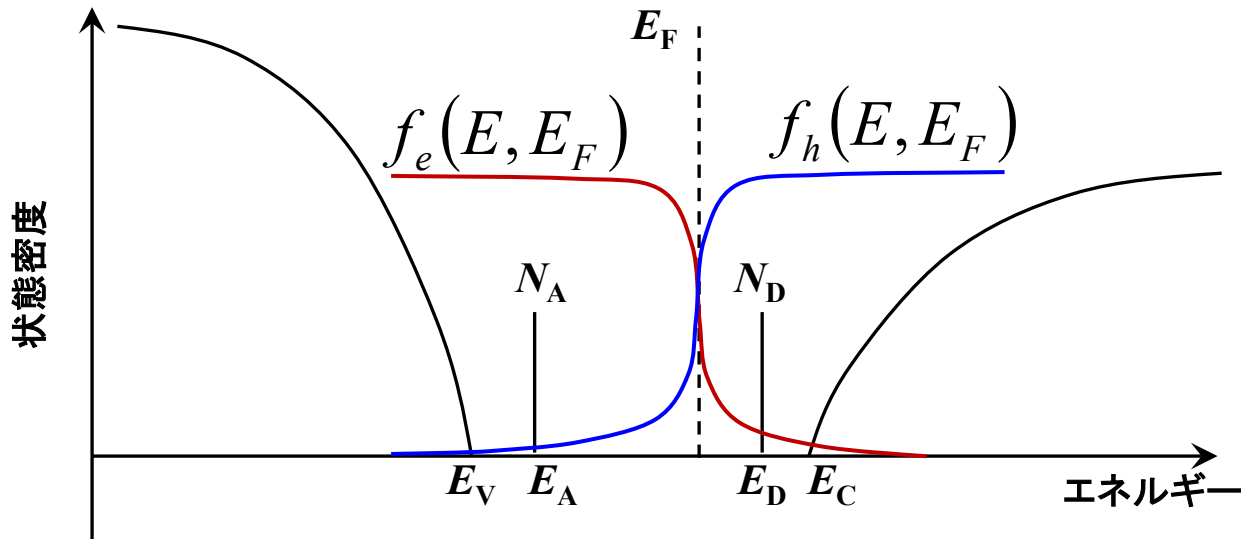
$$n_h = N_V \exp(-\beta(E_F - E_V))$$

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



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

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

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

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

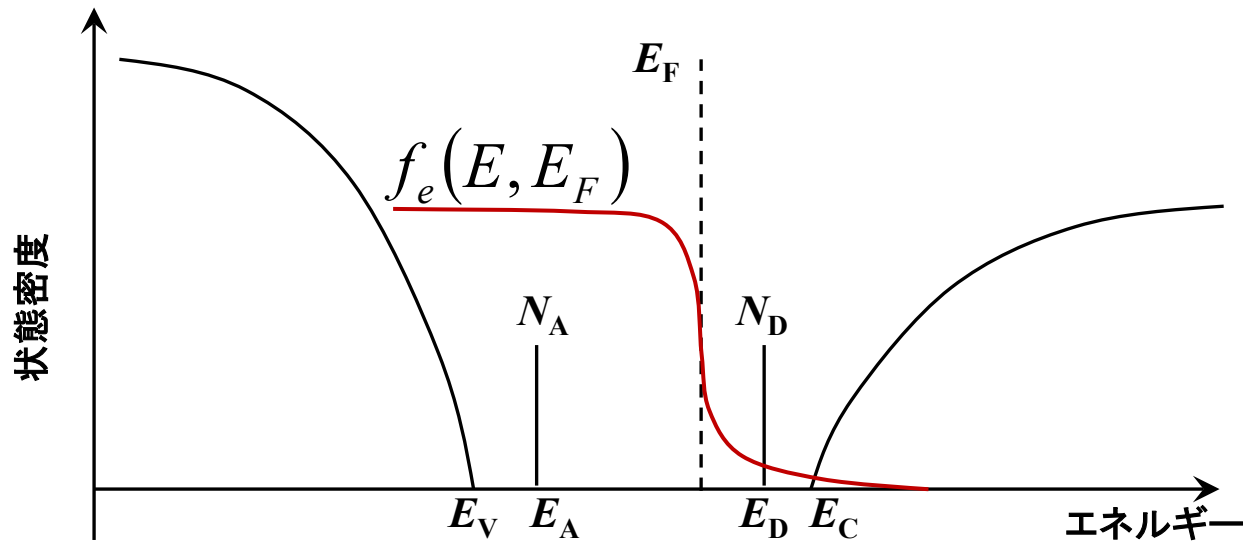
非縮退半導体密度

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

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

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

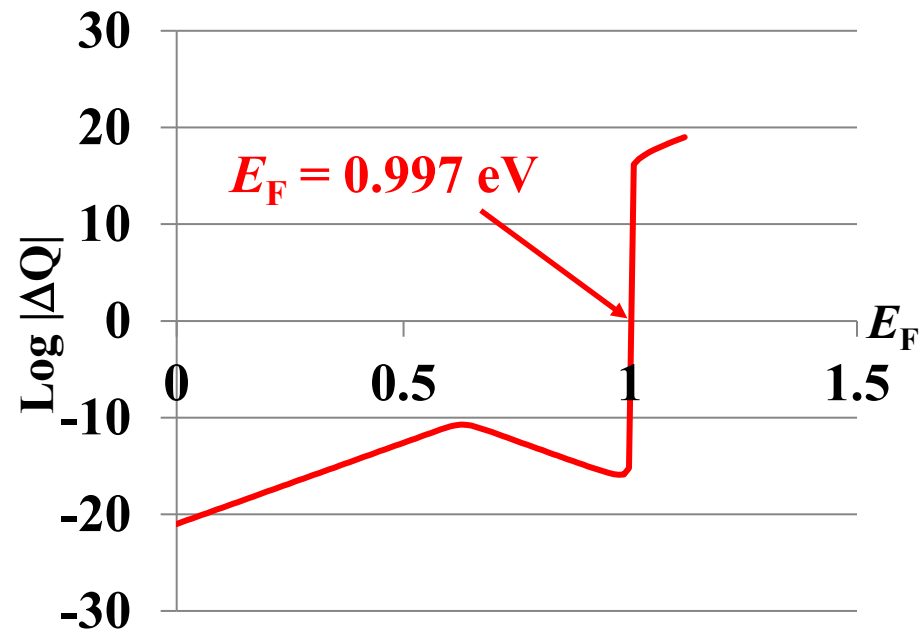
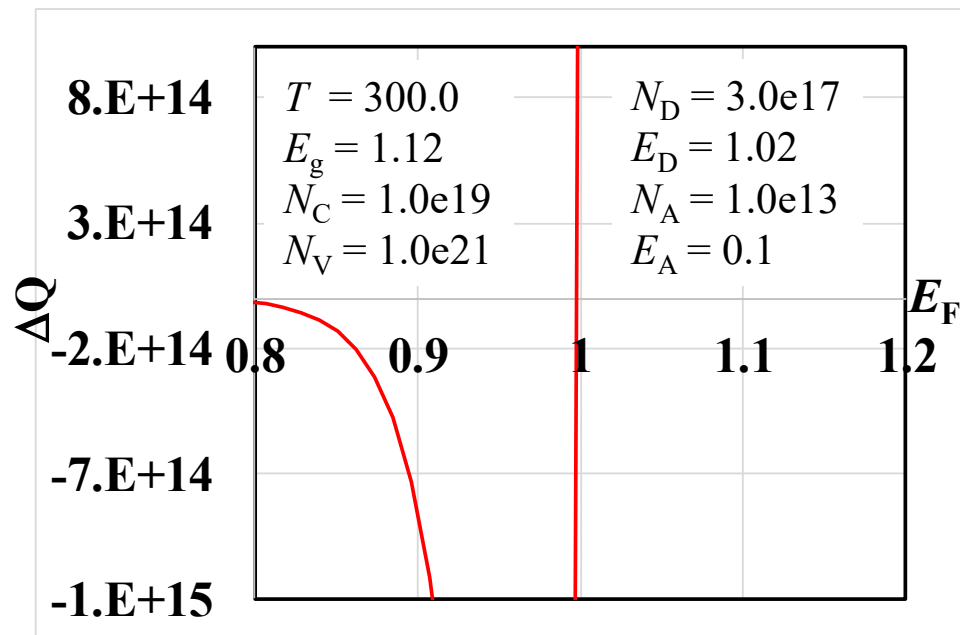
$$n_h = \int_{-\infty}^{E_V} D_h(E) f_h(E, E_F) dE$$

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

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

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

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



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。

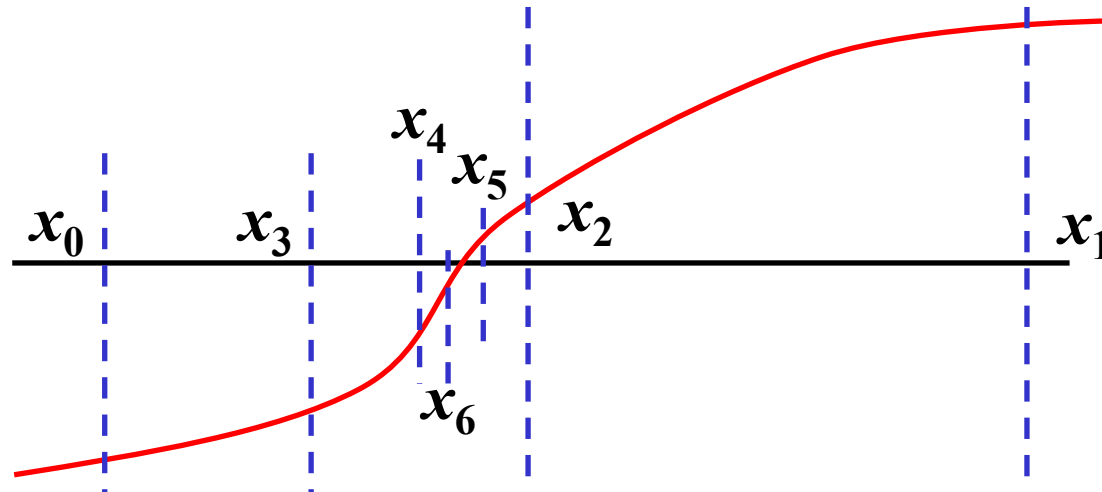
Newton法は発散しやすい \Rightarrow 二分法を使う

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

<http://conf.msl.titech.ac.jp/jsap-crystal/>

半導体の統計物性の温度依存性

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`

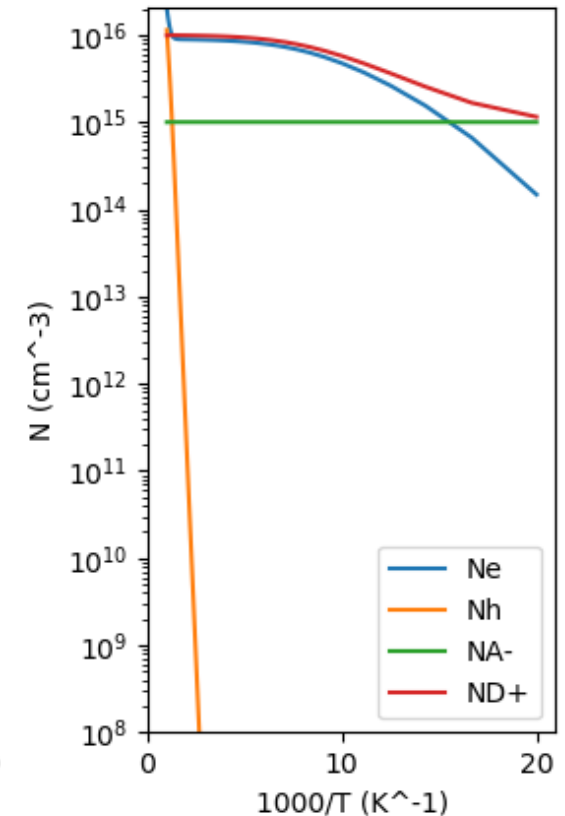
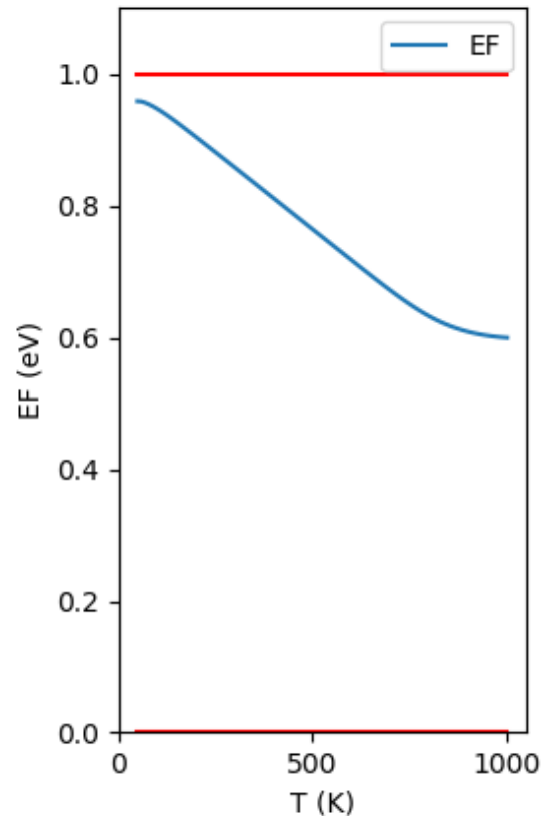
$E_c = 0$, $E_v = 1.0$ eV (= バンドギャップ)

$E_A = 0.05$ 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



VASPの $D(E)$ を使って計算

$$N_e = \int_{E_C}^{\infty} D_C(E) f_e(E, E_F) dE \quad N_h = \int_{-\infty}^{E_V} D_V(E) f_h(E, E_F) dE$$

$$N_D^+ = N_D [1 - f_e(E_D, E_F)] \quad N_A^- = N_A [1 - f_h(E_A, E_F)]$$

$$\Delta Q = (N_A^- + N_e) - (N_D^+ + N_h) = 0$$

<http://conf.msl.titech.ac.jp/jsap-crystal/> [EF-T-DOS.py](#), [TotalDOS-SnSe.dat](#)

全状態密度 $D(E)$ から半導体の統計物性を計算

使用方法

(i) `python EF-T-DOS.py T file Tmin Tmax nT`

実行例: `EF-T-DOS.py T DOS.dat 300 600 11`

温度依存性を300~600Kの区間で11分割して計算

(ii) `python EF-T-DOS.py EF file nEF)`

実行例: `EF-T-DOS.py EF DOS.dat 50`

EF依存性を50分割して計算し、

ミッドギャップの $N_e(E_F)$, $N_h(E_F)$ から有効状態密度を計算する

VASPの $D(E)$ を使って計算

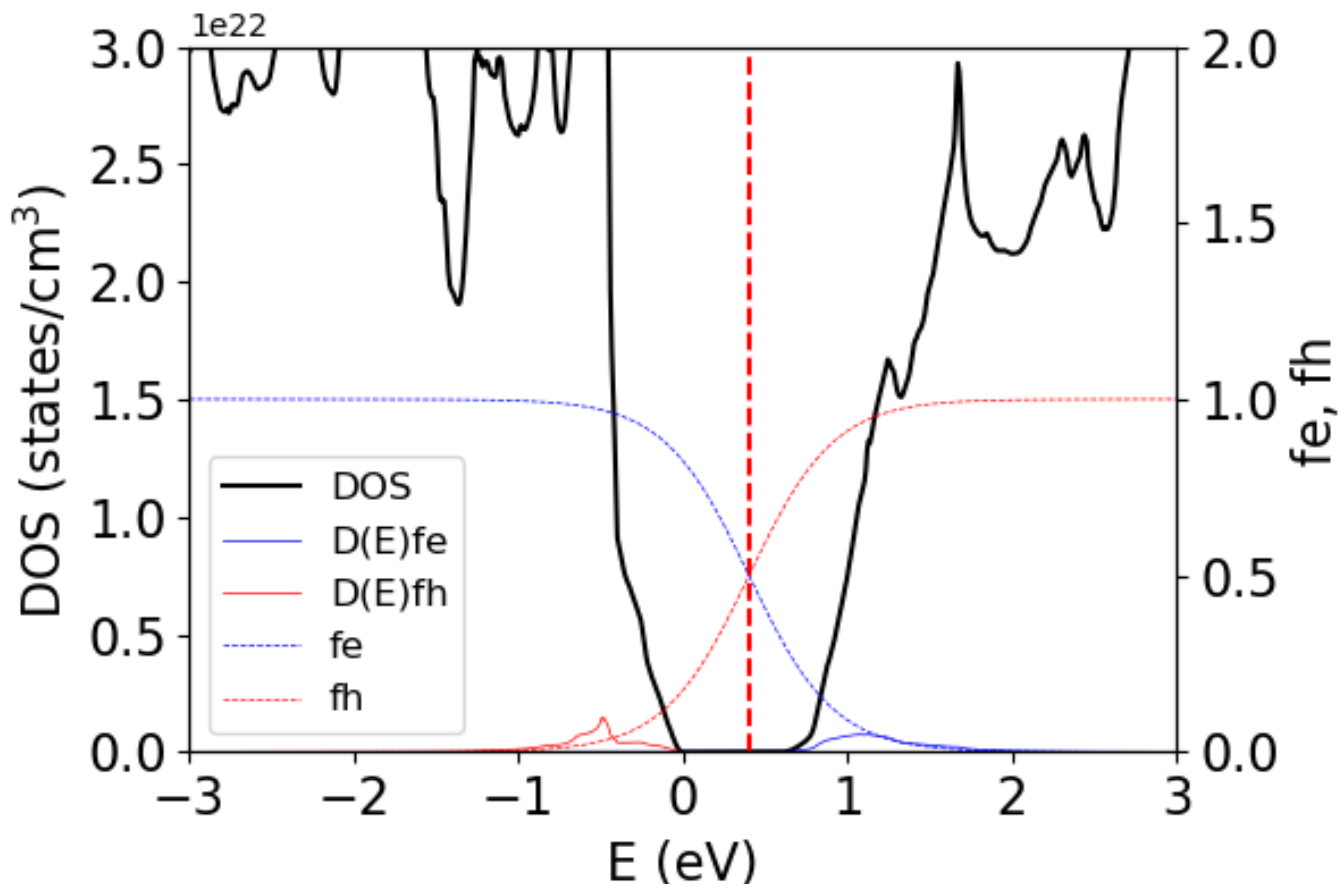
実行例: `python EF-T-DOS.py EF`

$T = 3000$ K , $E_F = 0.4$ eV

(温度はプログラム中の $T0$ 、 E_F は $EF0$ を書き換えてから実行する

$T0 = 3000$ # K

$EF0 = 0.4$ # EF at charge neutral)

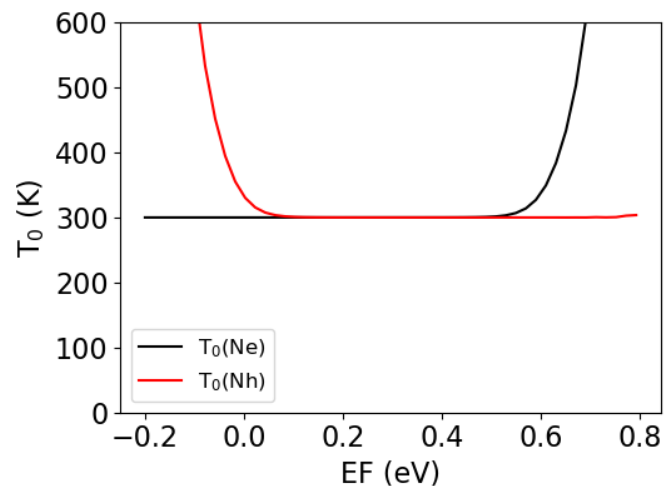
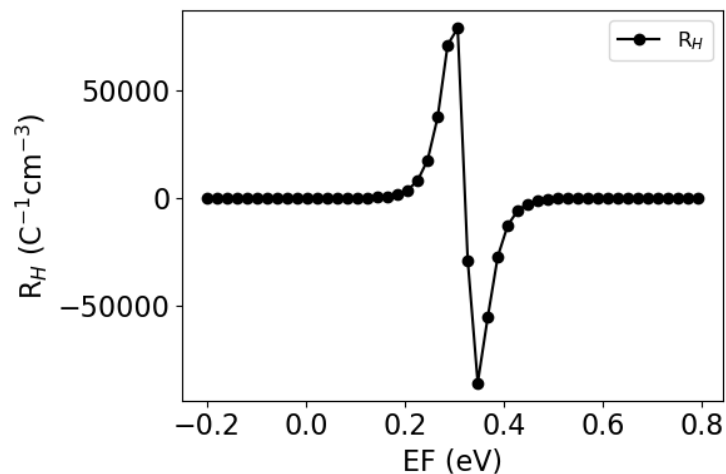
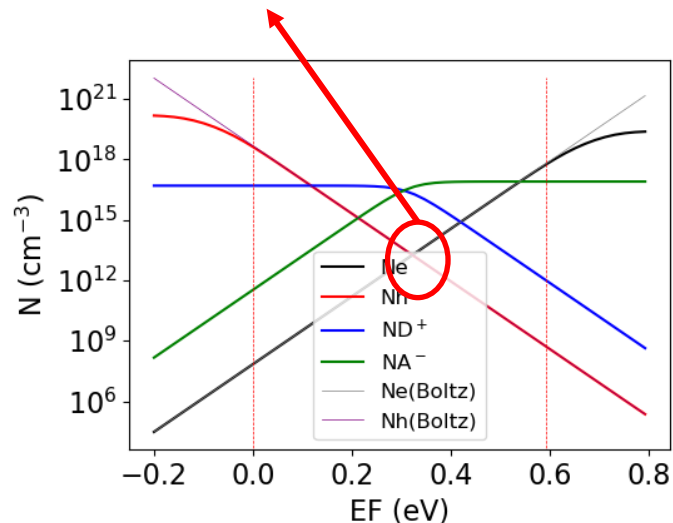
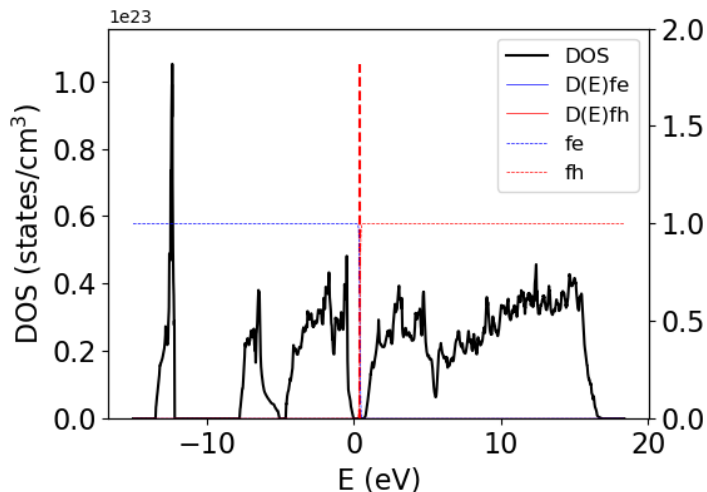


VASPの $D(E)$ を使って計算

python EF-T-DOS.py EF

T = 300 K , EF = 0.4 eV

$$N_C = 6.36 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad N_V = 4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$



計算した $D(E)$ を使って計算

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

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

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

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

$$\Delta Q = (N_A^- + N_e) - (N_D^+ + N_h) = 0$$

EF-T-DOS.py, TotalDOS-SnSe.dat

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/inside/EF-T-DOS/EF-T-DOS.html>

run python EF-T-DOS.py T

run python EF-T-DOS.py EF

Effective DOSs at the mid gap 0.2963 eV:

$$N_C = 6.26e+17 \text{ cm}^{-3} \quad (T_0 = 299.86 \text{ K})$$

$$N_V = 4.74e+18 \text{ cm}^{-3} \quad (T_0 = 299.86 \text{ K})$$

