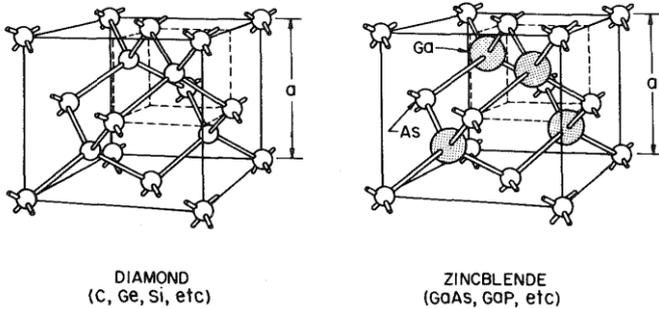


単位系(次元解析) 小山 裕

【元素半導体:シリコン】



シリコン Si は IV 族元素で、もっとも重要な半導体です。シリコンは最外殻に4個の電子を持つので、共有結合でシリコン原子同士が結びつき、3次元構造は図のようになっています。これはダイヤモンド構造といえます。ダイヤモンドはやはり半導体ですが、宝石のダイヤモンドが炭素原子で構成されていて、これをシリコンは同じ結晶構造をもつことから、その結晶形の名前が由来しています。

一個のシリコン原子が正四面体の各頂点に配置された4個のシリコンに囲まれています。隣り合ったシリコン原子は互いに相手方向に伸びた電子軌道を持っていて、この結合電子軌道に電子を入れることによってシリコン原子の間が結合されています。シリコン原子が立方体の頂点と立方体を構成する6つの面の中心位置を占める面心立方構造をつくり、それを対角線に沿って1/4だけずらした場所に同じ面心立方構造をもつものと組み合わせた構造となっています。

現在、トランジスタ、集積回路(IC)、大規模集積回路(LSI)をはじめとする半導体デバイスには圧倒的にシリコンが用いられていますが、その理由は、その素性のよさにあります。シリコン単結晶は単元素から出来ており、シリコン原子同士が強い共有結合で結びついているために、結晶欠陥が入りにくく、高純度な結晶を作りやすい。そのため、n型やp型の結晶を作り、電気的特性を制御するのに利点が多くあります。N型半導体を作るにはV族元素、p型半導体を作るにはIII族元素を、不純物拡散やイオン注入といった方法で結晶中に導入します。シリコン結晶自体が安定していて、常に同じ特性を示すので、添加した不純物の分布が均一になり、所定の目的とした伝導率を再現性よく得ることが出来ます。この再現性のよさが大量生産を必要とする半導体産業においてもっとも重要ですので、これが確立されているのでLSIのような複雑で微細な電子回路をシリコン基板上に形成することが出来ます。

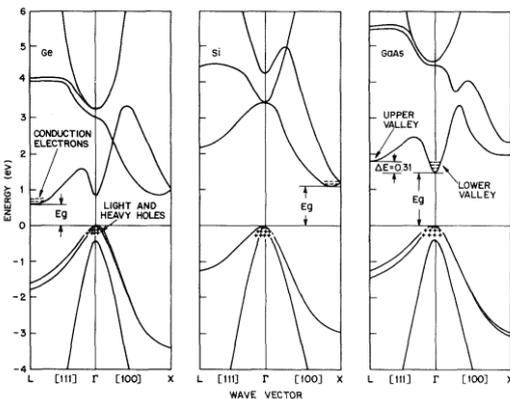


Fig. 5 Energy-band structures of Ge, Si, and GaAs, where E_g is the energy bandgap. Plus (+) signs indicate holes in the valence bands and minus (-) signs indicate electrons in the conduction bands. (After Chelikowsky and Cohen, Ref. 17.)

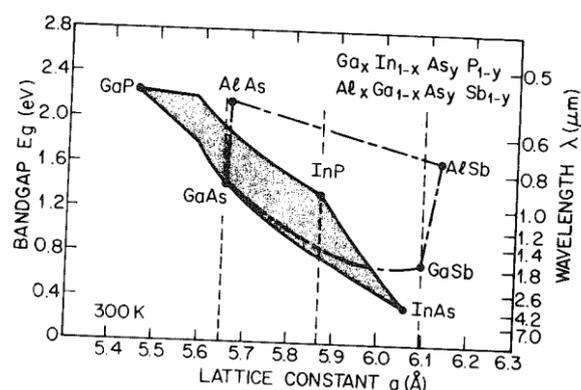
シリコン単結晶は、原料の高純度シリコンを溶かして、結晶の方位がそろった方向に原子が並ぶように種結晶を用いて、引き上げ法で作ります。このとき、**シリコンの融点が1420°C**であることが重要です。結晶は融点が高いほど作られたものが安定であると考えられますが、融点が高すぎると結晶を作るのに苦労が多くなります。シリコンの融点は、高すぎもせず、低すぎもしない絶妙な温度です。

更にシリコンが普及した重要な理由として、資源の豊富さがあります。シリコンは地球の地殻の中で酸素について2番目に多くある元素です。原料が豊富で安い。しかし、高純度化する費用は莫大です。また、シリコンは、その酸化物が SiO_2 (石英) ですが、これが非常に安定です。これは不純物拡散のときに、部分的に選択的に拡散を阻止するマスクとして使えます。そして、必要な場所にだけ、不純物を入れることが出来ます。つまり、必要なところだけ、キャリアのタイプやキャリア濃度を変えることができるわけです。また、シリコンと SiO_2 の界面はキャリアを閉

じ込めたり消滅させたりするトラップが少ない、きれいな平坦な面とすることが出来ます。従って、この界面を走行する電子の動きを妨げません。これは後に述べる MOS トランジスタがシリコンでうまく作られる最大の理由となっています。

シリコンのエネルギー帯構造は、以前示したように間接遷移型をしているので、シリコンはあまりよく光りません。しかし、結晶格子に歪を加えたり、電子が極在化される程の微細構造とすることで、直接遷移型となり、発光素子も可能となります。また、光を受けて電気信号に変える光検出デバイスとして用いられます。その禁制帯幅に対応した波長1ミクロンより短い(エネルギーが高い)光検出デバイス材料として使われます。シリコンを使うと、このようなデバイスを大量につくることが出来るので、この性質を利用して実用的な太陽電池には、ほとんどシリコンが使われています。またシリコンでは伝導帯にある電子の有効質量が比較的大きいので、移動度はあまり大きくなりません。このため、**シリコンで作る電子デバイスの最高動作周波数は、大体 60-80GHz 程度**と見積もられています。それより高い高周波・高速で動作する電子デバイスには次に述べる III-V 族化合物半導体が使われます。現在のところ、**大体 400-500GHz** くらいの高周波で動作する化合物半導体の電子デバイスが実現されています。しかし、同じ元素半導体である Ge(ゲルマニウム)との混晶を作ることによって電子移動度を高くする事が可能となり、高速・高周波動作のデバイスが実現されています。表にシリコンの主な性質と、代表的な化合物半導体である GaAs の性質を示します。

【III-V族半導体】



化合物半導体混晶と禁制帯幅(対応波長)

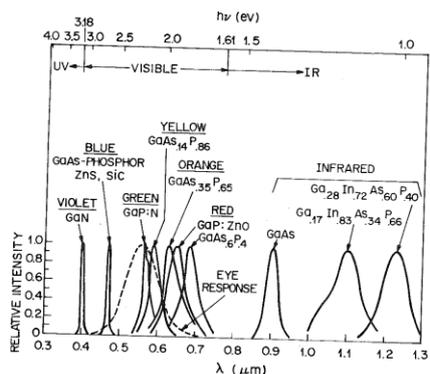
III-V族半導体は、III族元素としてAl, Ga, In、そしてV族元素として、N, P, As, Sbを組み合わせたものです。代表的なIII-V族半導体であるGaAsの原子配列を先ほどの図に示しています。Ga原子とAs原子は、それぞれが立方体の頂点と立方体を構成する6つの面の中心位置を占める構造を持っていて、互いの立方体を体対角線に沿ってその長さの 1/4 ずらした関係にあります。GaとAsが同じ原子であればダイヤモンド構造と同じです。この構造を**閃亜鉛鉱構造(せん あえんこう こうぞう)**といいます。III-V族半導体のうち、Nを含む窒化物以外は、この構造を持ちます。閃亜鉛鉱構造では、個々の原子はそれとは異なる

種類の原子が作る正四面体の重心に位置します。

III-V族半導体は元のIII族元素やV族元素の性質は示さないで、まったく新しい性質を示します。共有結合と一部イオン結合によって全く新しい材料が出来ていることとなります。GaAsのように二種類の元素から出来ている化合物半導体を二元化合物半導体とよばれ、12種類の二元系化合物半導体があります。これらの材料には、作りやすいものもありますが、作りにくい化合物もあります。バルクという塊の半導体結晶を作ることが出来るものは、GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSbなどです。他の化合物は、これらのバルク結晶上に薄く数ミクロン以下の薄膜結晶として結晶成長させて使用することになります。

III-V族半導体のエネルギー帯構造は、結晶の対称性などを反映して材料に固有で、**直接遷移型と間接遷移型**に分けられます。GaAsをはじめとしてほとんどのIII-V族半導体は直接遷移型のエネルギー帯構造を持ち、間接遷移型で実際にデバイスに用いられているのはGaPくらいです。構成元素の原子量が大きくなるにつれて、化合物結晶の格子定数が大きくなり、それに伴って禁制帯幅が小さくなる傾向があります。例えば、III族元素をGaと固定してV族元素をP, As, Sbと変えると禁制帯幅は 2.26eV から 0.72eV と小さくなり、格子定数は 0.547nm から 0.61nm へと変化していきます。この関係は、V族元素を固定してIII

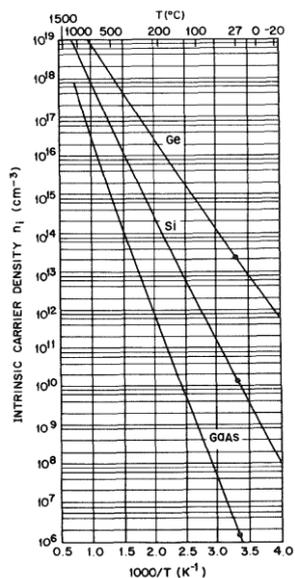
族元素を Al, Ga, In と変化させても大体成り立ちます。Al と Ga の化合物はこの例外で、格子定数はほぼ同じになります。これは Al と Ga の原子半径がほぼ等しいことが原因です。GaAs と AlAs の格子定数は室温では 0.13% くらいしか違いません。しかしこれは **ミスフィット転位** を発生させるには十分大きな違いです。二元系化合物は、III 族元素と V 族元素の **原子数の割合が 1:1 で化学量論的組成 (ストイキオメトリ)** を持ちます。化学量論的組成を保ったまま、III 族あるいは V 族のどちらか、あるいはその両方を複数の元素で構成することが出来ます。これを III-V 族混晶といいます。構成元素の数に応じて、三元混晶、4元混晶などがあります。このような混晶を作ることによって、**格子定数と禁制帯幅を自由に設計** することが出来ます。例えば、とても明るいレーザポイントと呼ばれる指示棒のかわりにスクリーンで指し示すものに使われている赤いレーザポイントは、InGaAlP という 4 元系化合物半導体で出来ています。波長は 660nm 付近です。



化合物では、このように自由な構成元素の組み合わせで格子定数や禁制帯幅、これは半導体から出てくる光の色や動作する周波数を変えることが出来ますが、このような化合物は普通は、基板結晶とことなる格子定数や禁制帯幅を持つ構造になっています。違う格子定数の上に化合物結晶の薄膜を作ってデバイスを作っています。このような構造を **ヘテロ接合** といいます。一方、同じ GaAs の上に同じ GaAs の高純度結晶あるいは不純物を添加した結晶を作る構造を **ホモ接合** といいます。

【禁制帯幅 (バンドギャップ)】

真性半導体では電子とホールが同じ密度 で発生しますから $n = p$ です。これから



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

フェルミエネルギー E_f を求めることができます。

$$E_f = \frac{1}{2}(E_C + E_V) + \frac{3}{4}kT \times \ln\left(\frac{m_P^*}{m_N^*}\right) \text{ です。しかし、式の後半の部分は前半の部分}$$

に比べてとても小さいので、結局、**真性半導体ではフェルミエネルギー E_f は、禁制帯のほぼ真ん中 $\frac{1}{2}(E_C + E_V)$ にある** ことが出来ます。また、 n と p をかけると、

これを **pn 積** といいます。

$$p \times n = N_C N_V \times \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{kT}\right) = N_C N_V \times \exp\left(-\frac{E_G}{kT}\right) = n_i^2$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \times \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right)$$

が得られます。ここで n_i は真性キャリア密度で禁制帯幅 E_g で決まる、つまり物質で決まるキャリア密度です。不純物を入れない真性半導体のキャリア密度の温度依存性を与えるものです。図に元素半導体 Si と化合物半導体の E_g の温度依存性を示します。

【SI 単位系】

単位系を国際的に統一するために、メートル条約の最高決議機関である国際度量衡総会 (Conference Generale des Poids et Mesures/ CGPM)において採択が可決されたのが国際単位系 (Le Systeme International d'Unites/ SI) であり、日本でも 1974 年 4 月以降導入になりました。SI 単位系では、基本単位として

1) 固有の名称をもつ SI 組立単位

量	名称	記号	他の SI 単位による表わし方	SI 基本単位による表わし方
周波数	ヘルツ	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m·kg·s ⁻²
圧力、応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ ·kg·s ⁻²
エネルギー、仕事、熱量	ジュール	J	N·m	m ² ·kg·s ⁻²
仕事率、放射	ワット	W	J/s	m ² ·kg·s ⁻³
電気量、電荷	クーロン	C	A·s	A·s
電圧、電位	ボルト	V	W/A	m ² ·kg ⁻¹ ·s ⁻³ ·A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² ·kg ⁻¹ ·s ⁴ ·A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² ·kg ⁻¹ ·s ⁻³ ·A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² ·kg ⁻¹ ·s ³ ·A ²
磁束密度	ウェーバー	Wb	V·s	m ² ·kg ⁻¹ ·s ⁻² ·A ⁻¹
磁束	テスラ	T	Wb/m ²	kg·s ⁻² ·A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² ·kg ⁻¹ ·s ⁻² ·A ⁻²
光照射度	ルーメン	lm		cd·sr†
光照射度	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² ·cd·sr

† sr : 立体角の単位, steradian.

長さ : m、重さ : Kg、時間 : s (秒)、電流 : A (アンペア)、温度 (絶対温度) : K (ケルビン)

SI 組立単位 : 力 : N (ニュートン)、圧力 Pa (パスカル)、エネルギー J (ジュール) など

100V で加速された電子のド・ブロイ波長を求めなさいという問題。

結果はこのようになります。

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.626 \times 10^{-34} [J \cdot s]}{\sqrt{2 \times 9.109 \times 10^{-31} [kg] \times 100 [V] \times 1.602 \times 10^{-19} [C]}}$$

$$= 1.2265 \times 10^{-10} [m] = 1.23 \text{ \AA} = 0.123 \text{ nm}$$

波長は長さの単位です。そしてエネルギー単位の J、電圧 V と電荷量 C を、SI 基本単位で書き下します。そうすると、単位式は

2.2 物理学の単位・記号に関する IUPAP¹⁾ の推薦²⁾

$$[m] = \frac{[J][s]}{\sqrt{[kg][V][C]}} = \frac{[m]^2 [kg] [s]^2 [s]}{\sqrt{[kg] [m]^2 [kg] [s]^3 [A]^{-1} [s] [A]}} = \frac{[m]^2 [kg] [s]^1}{\sqrt{[kg]^2 [m]^2 [s]^2}} = \frac{[m]^2 [kg] [s]^1}{[kg] [m] [s]^1} = [m]$$

が得られます。これを次元解析といえます。

次元解析をすると、導出された式が正しいかどうか判断できます。次元を揃えて (統一して) 計算することが大切です。

【簡単な例題】

n 型シリコン結晶に電界を加えた時、シリコン結晶中の電子の衝突緩和時間 τ (電子が結晶格子から散乱を受けてから、次の散乱を受けるまでの時間) を求めなさい。但し、シリコンは以下の条件にあり、計算に用いる諸定数は以下の通りである電子の実効有効質量 $m^* = 0.26m_0$:

$m_0 = 9.1 \times 10^{-31} [kg]$ は電子の真空中の質量、電子の素電荷 $q = 1.602 \times 10^{-19} [C]$ 、電子のドリフト速度 $v_D = 1.40 \times 10^6 [cm/s]$ 、電界強度 $F = 1 [kV/cm]$ (*1kV=1000V というと、非常に高い電圧と感じられるが、これは $1 \mu m (= 10^{-4} cm)$ の距離に 0.1V の電圧が印加されることに相当する。半導体デバイスでは極一般的に印加される電界強度である。) 用いる関係式は、

$$v_D = \mu_D F, \quad \mu_D = \frac{v_D}{F}$$

$$\text{衝突緩和時間 } \tau \text{ とドリフト移動度の関係から、} \mu_D = \frac{q\tau}{m^*}, \quad \tau = \frac{\mu_D m^*}{q} \quad [ps] \text{ に } \text{秒} = 1 \times 10^{-12} [s]$$