

材料デザイン学 第 10 回

電気的特性 / 半導体とバンド構造

岸田 逸平

2015 年 10 月 6 日

目次

1	半導体素子	2
1.1	ダイオード	2
1.2	トランジスタ	2
1.2.1	トランジスタ開発の歴史	4
2	材料設計	5
2.1	Si の優位性	5
2.2	新しい半導体開発の視点	6
3	電子物性	6
3.1	電子	7
3.2	1 原子の回りの電子	7
3.3	2 原子分子	8
3.4	結晶	9
4	まとめ	10
4.1	前回小レポート解説	10
4.2	今回課題	10

これまで、電気的特性について、良導体、絶縁体について取り扱った。良導体は電気をよく流し、絶縁体はよく遮蔽するということが主に期待される機能である。今回は半導体の電気的特性について話を進める。さて、「中くらいに電気を流す」という半導体のどこが便利なのだろうか？

1 半導体素子

電気を流す能力で言えば良導体に敵わないし、遮蔽する能力で言えば絶縁体に敵わない。半導体のすごいところは、流すか流さないか、制御できるということである。良導体、絶縁体で述べたように、電気伝導性というのは非常に幅の広い材料特性であり、ある程度の値の範囲に入っていれば良導体・絶縁体として使うことができる。半導体は工夫をすることで電気抵抗率をいろいろ制御できる。大雑把に言えば、電気を通したり、通さなかったり制御することができる。このような機能を実現する素子を幾つか見てみよう。

1.1 ダイオード

半導体を上手に組み合わせることで、一方向にしか電子を通さないような素子を作ることができる。この代表例がダイオードであり、この作用を _____ 作用と呼ぶ。(Fig. 1)

電気伝導性の観点から見ると、一方向には良導体のように電気を通し、逆方向には絶縁体のように電気を通さない素材のように見える。これは電流の方向によって伝導性を制御しているようなものだ。

1.2 トランジスタ

半導体を上手に組み合わせることで、抵抗の値を容易に変更できる素子を作ることができる。この代表例がトランジスタだ。(Fig. 2) トランジスタは3つの電極を持ち、それぞれエミッタ、ベース、コレクタと名前が付けられている。エミッタ-ベース間を流れる電流をベース電流と呼び、これが入力となる。コレクタ-ベース間を流れる電流をコレクタ電流と呼び、これが出力となる。入力側のエミッタに流れた電流に比例した電流が、出力側のコレクタに流れる。この際の比例定数を1よりも大きくすることができる。このことから、以下のような用途に使える。

スイッチ ベース電流をゼロにすればコレクタに流れる電流もゼロであり、ベース電流を非ゼロにすればコレクタに流れる電流も非ゼロである。このことから機械的な動作のないスイッチを構成することができる。コンピュータの演算はつまるところ多数のスイッチのオン・オフを高速で切り替えているわけで、CPU や GPU といった演算装置に不可欠な機能である。

電気伝導性の観点から見ると、ベース電流がないときには絶縁体のように電気を通さず、ベース電流があるときには良導体のように電気を通す素材のように見える。これは電流の有無によって伝導性を制御しているようなものだ。

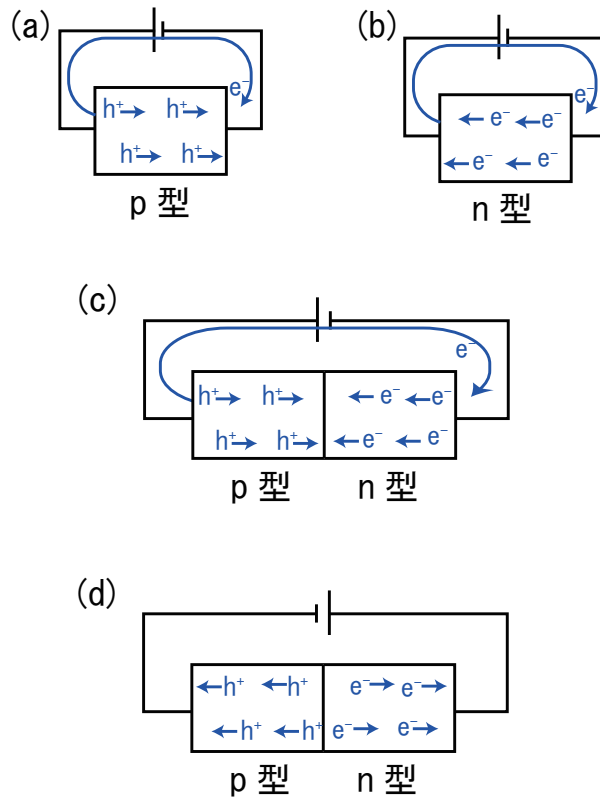


図 1 (fig20141210a)

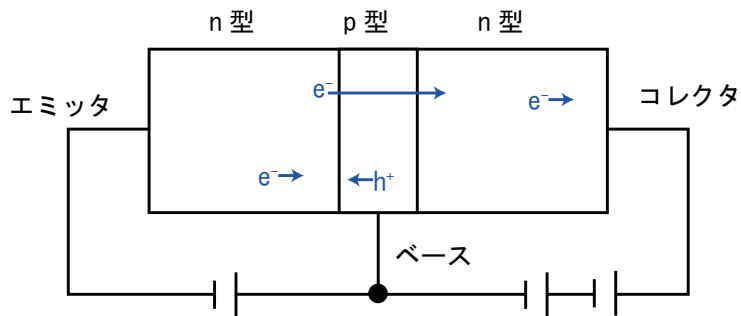


図 2 (fig20141210b)

増幅 スイッチでは単純なオン・オフだけを考えたが、トランジスタでは入力に比例した電流を取り出すことができる。この機能は特に信号の _____ という術語が使われる。

これを分かり易く利用した製品がトランジスタメガホン^{*1}だ。その構成の模式図を Fig. 3 に示す。

^{*1} トラメガとよく略される。

マイクは音声を電流信号に変換するデバイスである。音波が持つエネルギーでコーン紙を動かし、コイルと磁石による誘導電流でコーン紙の変位速度に対応した電流を取り出す。この動力は音波が持つ微小なエネルギーのみなので、そもそも微弱な電流しか取り出せない。また、エネルギー保存の観点から、このままでは元の声以上に大きなエネルギーでスピーカーを駆動することができないことも自明である。そこで、間にトランジスタでできた増幅回路を置く。電池の電力を使い、入力信号を何倍にも増幅して出力側に流すことが出来る。

電気伝導性の観点から見ると、ベース電流によって抵抗値が変化する素材のように見える。これは電流の量によって伝導性を制御しているようなものだ。

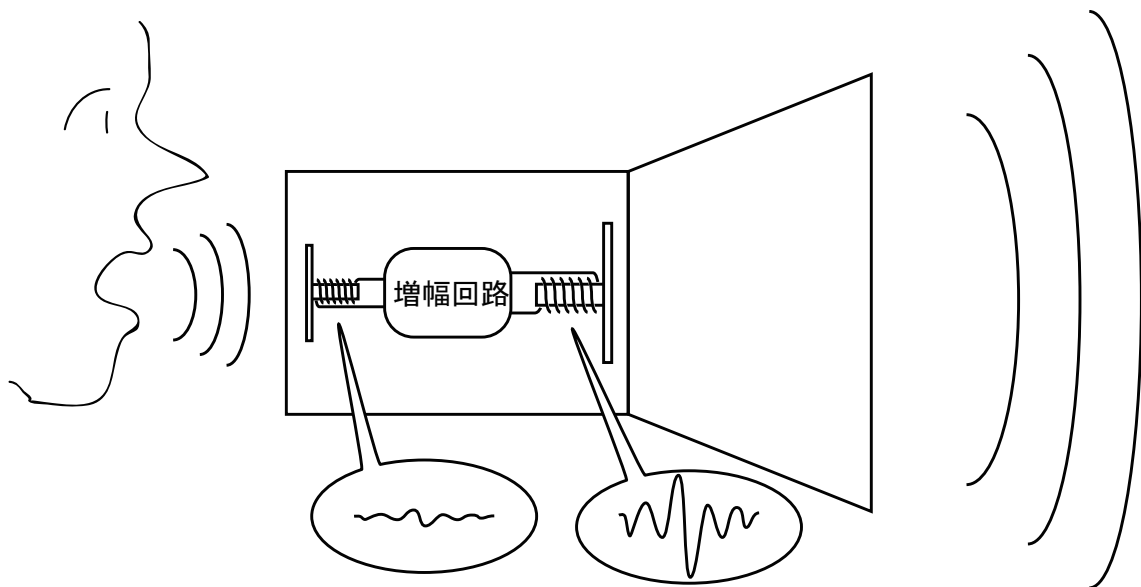


図3 (fig20131211c) トランジスタメガホンの構成の模式図。

1.2.1 トランジスタ開発の歴史

1. トランジスタ以前は _____ での増幅器。かさばる、消費電力が高いなどの問題点から固体増幅器への要求。
2. 金属-酸化ゲルマニウム-ゲルマニウム 構造に電圧を加えて酸化膜直下の電位を変え、その近傍でゲルマニウム-金属針間を流れる電流を観測する実験から、点接触トランジスタが発明される。(1947年)しかし金属針の間の距離を短く保つ必要があり、信頼性に欠けるため、この改善の要求。
3. 接合トランジスタ(バイポーラトランジスタ)の発明。(1951年)
4. _____ の接合型トランジスタの発明。(1954年)
5. Siの拡散技術や酸化膜 _____ を駆使用するリソグラフィ技術の発達。また、大型で

- 良質な _____ の製造が可能になる。
6. Si のプレーナ構造トランジスタ。^{*2}
 7. 半導体 Si 上で配線まで仕上げる _____。

電子計算機

ENIAC は 17468 本の真空管、70000 個の抵抗器、10000 個のコンデンサ等で構成されていた。幅 24m、高さ 2.5m、奥行き 0.9m、総重量 30 トンと大掛かりな装置で、設置には倉庫 1 個分のスペースを要した。消費電力は 150kW。開発費の総額は 49 万ドル。(<http://ja.wikipedia.org/wiki/ENIAC> より)

現在では ENIAC より遥かに高い演算能力を持つコンピュータが数万円、もしくはそれ以下で売られている。これは半導体科学の進歩に因るものである。

- Intel corei7 のトランジスタ数は 7 億以上。^{*3}
- AMD Athlon 64 はトランジスタ数 1 億以上。ダイサイズ 115mm²。
- 1 GiB ^{*4} の DRAM は、85 億個以上のコンデンサとトランジスタを積んでいる。^{*5}

2 材料設計

2.1 Si の優位性

- 使用温度の限界が 200 と比較的高い。(Ge は 90 程度)
- 絶縁体が _____ として容易に作成できる。
- _____ は人体に対して _____ な物質。
- 物性データ、加工プロセスなどの知見の蓄積。
- 地球上にほぼ _____。

GaAs は電子の有効質量が軽く、高速な動作が可能であるが、

- バンドギャップ中央近傍の準位が不安定動作の原因となる。
- 純度・組成制御が困難。

^{*2} 同一平面上に端子用電極を形成して作られる構造。

^{*3} 真空管と単純に比較することは勿論できないが。

^{*4} 昔は単純に GB (ギガバイト) と言っていたが、物理でよく使う 10⁹ と PC 産業回りでよく使う 2³⁰ を区別するために、後者を Gi (ギビ) という接頭辞に当てた。

^{*5} $1 \times 2^{30} \times 8 = 8589934592$

- _____ を持つ。

Si は総合的にとても優秀。Si が使える場所では Si を使う。Si が使えない場所で何を使うか。Si を使えない分野の代表格が LED。これについては次回。

2.2 新しい半導体開発の視点

- さまざまなバンドギャップを持つ半導体。
- p 型、n 型の両方が作製されていない半導体材料。
- 直接遷移型・間接遷移型
- 小型化
- 耐熱性
- 耐電圧性

3 電子物性

半導体を設計するためには物体における電子の挙動について正確に理解する必要がある。これは古典論の範囲のみでは不可能で、量子論の理解が不可欠である。しかし、量子論に基いた固体電子の議論はそれだけで半期全部使っても足りないくらいのボリュームのあるテーマである。本講義ではあまり詳しいところには立ち入らず、概説するだけに留める。また、本節は大まかな理解をするための話なので、厳密には正確ではない表現が含まれる点に留意されたい。

求めたいもの おおまかに言えば、物質が持つエネルギーの具体的な値を求めたいのである。前回までに扱った電池材料を思い出して欲しい。電極が持つエネルギー が充放電によって変動し、この差分を電気として取り出す。エネルギーは現象をよく理解するための強力な足掛かりだ。電子物性を理解することは、電池材料開発にも他の材料開発にも有効である。

古典論での静電エネルギー 静電エネルギーの公式は高校物理の範囲で習っている筈だ。2 つの電荷 q, q' の間の距離を r , 真空の誘電率を ϵ_0 としたとき、*6 静電エネルギー U は以下のように表せる。

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qq'}{r} \quad (1)$$

これは 2 体での問題だが、アボガドロ数程度の多体であっても基本的にはその全てを加算すれば良いだけで、手順としては簡単である。(Fig. 4)

*6 $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} [\text{m}^{-3}\text{kg}^{-1}\text{s}^4\text{A}^2]$

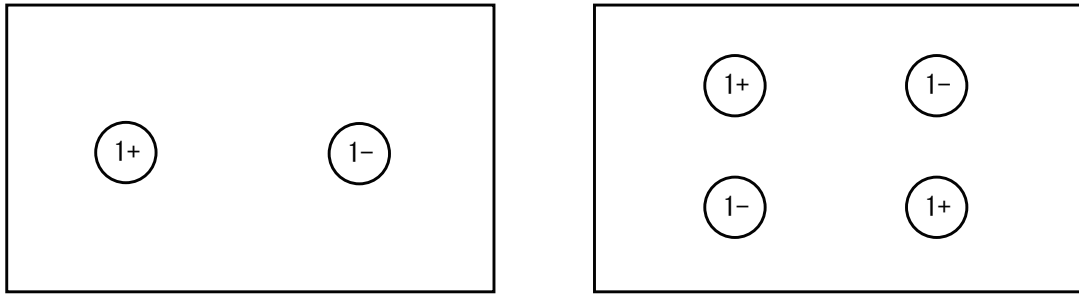


図 4 (fig20141210c)

問題は、電子が単純な粒子ではなく波動性を持つ量子である、ということだ。このためこの古典論でのエネルギーの理解では不十分になる。

3.1 電子

電子は _____ であり、また同時に _____ である。古典論では粒であるか波であるかは二律背反であったが、実験事実として電子はその両方の性質を持っている。

電子は他の電子と全く同じ量子状態を取ることができないという性質を持つ。^{*7}

3.2 1 原子の回りの電子

原子核の周囲で電子は好き勝手に自由な状態を取れるわけではない。古典論では太陽の周囲を回る惑星よろしく電子が原子核の回りを周回しているイメージだが、この描像は勿論正確ではない。電子は粒として周回しているのではなく、波としてたゆたっていると考えられる。この波も実在する何か波として運動しているのではない。波動関数という謎の物理量が位置によって変位しているという静的なイメージを持って欲しい。この波は原子核周囲で一周したときに丁度繋がる条件でのみ存在できる。(Fig. 5)

この条件のことを orbital と呼ぶ。日本語の術語として「軌道」いう単語が該てられているが、これは惑星の軌道 (orbit) と紛らわしく、古典的なイメージの一本の道筋があるような誤解を招きかねないので注意が必要である。本稿では orbital で統一する。

「一周したときに丁度繋がる条件」より、orbital の波数は整数しか許されず、_____ な値となる。またエネルギーは波数に依存するため、これも離散的な値となる。このことから 1 個の原子周囲の電子が持ちうるエネルギー準位は Fig. 6 のようになる。

^{*7} このような性質を持つ粒子のことを Fermion(フェルミ粒子) と呼ぶ。我々の身の回りの物質を構成している粒子はおおよそ Fermion に分類されると言って良い。物質は同じ座標に重なれない。

対立概念として、複数の粒子が同じ量子状態を取ることができる Boson(ボース粒子) がある。光子がその一例である。

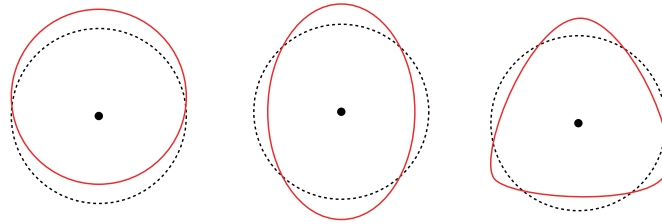


図5 (fig20121113a) 電子 orbital の模式図。黒丸が原子核、破線が原子半径に沿った円、実線が orbital である。正確には orbital は 1 本の線で表されるわけではなく 3 次元的な広がりをもっている。

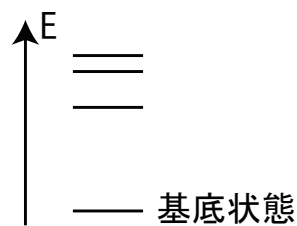


図6 (fig20121113b) 原子が持つエネルギー準位の模式図。

準位はあくまでポテンシャルの高さだけのものであり、そこに電子が配置して初めてエネルギーになる。orbital に入った 1 個の電子はその準位のエネルギーを持つことになり、その系に存在する全ての電子のエネルギーの総和がその物質のエネルギーとなる。

自然界はエネルギーの低い状態に落ち着こうとするので、通常電子は基底状態の準位を占有する。この電子に適切なエネルギーを与えてやるとより上の準位に _____ する。このエネルギーは通常 _____ で与えられる。励起状態の電子は一定の確率でより低位の準位に落ち込み、その差分のエネルギーを光として放出する。

3.3 2 原子分子

単原子分子で Fig. 6 のようであったエネルギー準位は、原子の個数が複数になると異なる様相を呈するようになる。2 原子間の相互作用によって形成される分子 orbital の模式図を Fig. 7 に示す。単原子について 1 つの orbital ずつだったものが相互作用して 2 つの orbital が形成される。結合性 orbital と反結合性 orbital である。厳密さを犠牲にして大雑把にいうと、

- 結合性 orbital とは波動関数の正と正、負と負が隣接するような状態で、エネルギーが _____ する。
- 反結合性 orbital とは波動関数の正と負が隣接するような状態で、エネルギーが _____ する。

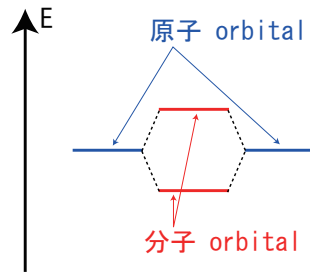


図7 (fig20121113c) 2 原子分子が持つエネルギー準位の模式図。左右の 2 つの 原子 orbital がそれぞれの原子の準位 (Fig. 6 のうちの任意の 1 本) を示し、中央の 分子 orbital がこの分子が持つ準位を示している。

3.4 結晶

物質を構成する原子の数が増えるほど、その間に相互作用が生じる。単原子では 1 つの準位を持つ orbital だったものが、アボガドロ数程度の多原子では orbital が密集してほとんど連続したバンド(帯)のように見えるようになる。これを示した模式図を Fig. 8 に示す。図右端では連続しているように見えるが、実質は 1 本ずつの orbital の集合である。そのため N_A 個の原子からなる結晶で N_A 本の orbital からなるバンドならば、そのバンドには電子を _____ 個しか収容できない。

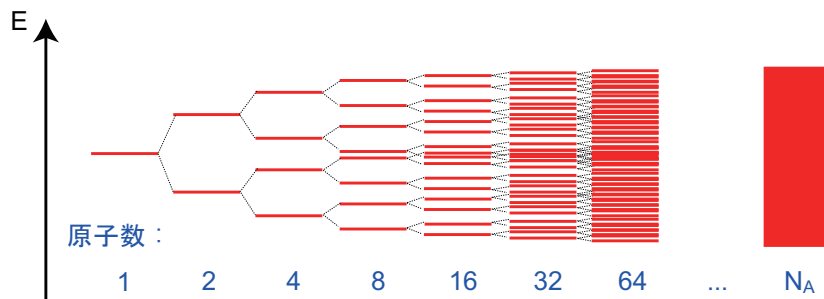


図8 (fig20121113d) 物質を構成する原子数と準位の関係の模式図。アボガドロ数 N_A 個オーダーの原子の集合により、準位の数が増え、帯状に広がる。右端では塗り潰されたように見えるが、これは orbital を電子が占有している事を表したのではなく、orbital が密集していることを示している。

結晶はバンドギャップで分割されたバンドを複数持つ。それらのバンドの中でエネルギーの低いところから電子が占有されていく。下から 2 番目のバンドまで丁度埋まった場合の模式図を Fig. 9 に示す。この図では下から 2 番目までを完全に占有して 3 番目のバンドは完全に非占有となっており、その間にバンドギャップがある。

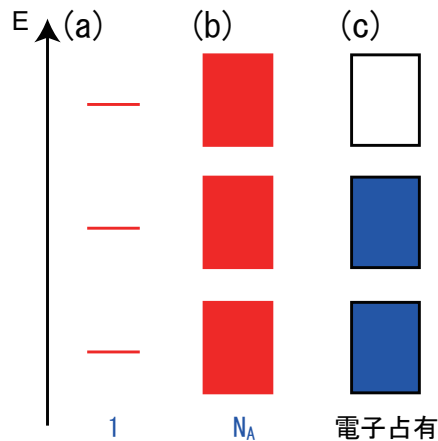


図 9 (fig20121113e) 結晶のバンド構造と電子占有の模式図。

4 まとめ

- ダイオードの整流作用
- トランジスタのスイッチ・増幅作用
- Si
- バンドギャップ
- n 型半導体, ドナー, 自由電子
- p 型半導体, アクセプタ, 正孔

4.1 前回小レポート解説

- $x = 0$ が完全充電状態、 $x = 1$ が完全放電状態。
- $0 \leq x < 0.5$ と $0.5 < x \leq 1.0$ と、2つの領域で電圧が変化するということ。
- $x = 1$ や $x = 0.5$ といった一つの値だけを抽出して使っているのはまずい。電池電圧が使っていくうちに下がっていくということを理解すべき。
- 炭素負極の電位は §9.2.2 に 0.1 V と記してある。

4.2 今回課題

コンピュータの動作はクロックという時間単位ごとに行われ、このクロックがコンピュータの動作速度を評価する基本的な数値となる。1 GHz の CPU は、1 秒間にこのクロックを $1 \text{ G} = 10^9$ 回動作するというのである。さて、3.7 GHz の CPU において、1 クロックの時間で電気信号が伝達す

る距離を求めよ。電気信号が伝達する速度は光速 $c = 3.0 \times 10^8$ [m/s] に等しいと見做して良い。^{*8}

現在民生用に売られているメモリは1枚で8GBのものまで発売されている。1枚のメモリに8つのチップが乗っており、それぞれ10層の積層構造をしているとする。チップ面積が 1 cm^2 だとしたとき、1 bit あたりの占有面積を算出せよ。

この問題の狙い 電子回路のスケール、時間の感覚を捕むためのものである。より高性能な電子回路を開発するためには小型化が重要なファクターとなっている。大雑把で良いので、現在の技術水準を把握して欲しい。

なお、これはあくまでオーダーの感覚を捕むための例題であり、この値は現実を即したものではない。層の数も正確ではないし、面積としても実際にはチップ内に記憶素子以外の回路が同梱されている。大きくともこれ以下、というサイズを見積っているにすぎない。

^{*8} 2013年12月7日現在、Intel Core i7 の 3.7 GHz が 3~4万円程度で売られている。

材料デザイン学 レポート (冬休みの宿題)

「自分が開発・改善したいデバイスは何か？」と君が問いかけられたとしよう。

- CPU, メモリ, HDD
- 排気ガス触媒, 水質浄化装置
- 磁石
- 誘電体
- 電池, 太陽電池, 燃料電池
- その他

思い付いたデバイス何でも良い。題材として向いているものと向いてないものがあるだろうが、その中で書き易いものを選び、それについて、材料の研究・開発によってその改善に寄与できることを述べてもらいたい。以下の点について調べたこと、考えたことをまとめて論述せよ。

1. デバイスの現状の用途、将来期待されている応用。
2. 現状における問題点、改善すべき点。(改善案と対応が付かなくても良いので、これができるだけ多く述べること。)
3. そのデバイスの動作原理、メカニズム。
4. 関連する学問分野とその概略。
5. 自分がその研究者だったならば、その改善に向けての自分独自の戦略をどのように組み立てるか。

調べた文献名を明示すること。インターネット上のウェブサイトで知り得た知識も用いて良いが、きちんと参考文献に挙げること。

作成したレポートの電子ファイルを C502 サーバに提出すること。

(<http://c502.mech.eng.osaka-cu.ac.jp/~ippeip/submission.html>)

提出期限は 1/9 (金) 15:00。