

問題 C

イオン結合性半導体 GaAs の結晶構造と電子物性に関する以下の間に答えよ。
ただし真空中の光の速度 c を 3.00×10^8 [m/s], プランク定数 h を 6.63×10^{-34} [J·s], 素電荷 q を 1.60×10^{-19} [C] とする。計算は有効数字 3 桁で行うこと。必要であれば $\sqrt{2} = 1.41$, $\sqrt{3} = 1.73$ を用いてよい。

- (1) GaAs の結晶構造を答えよ。
- (2) GaAs は、共有結合性半導体 Ge と格子定数がほぼ一致する。GaAs と Ge のバンドギャップエネルギー E_g の大小関係を示し、その理由を化学結合の観点から説明せよ。
- (3) GaAs は直接遷移型半導体であるが、バンドギャップエネルギー E_g [eV] と発光波長 λ [μm] の関係を示す式を導出し、 E_g に 1.43 [eV] を代入して λ を求めよ。
- (4) 図 1 を解答用紙に写して、GaAs 結晶のミラー指数 (110) の面を斜線で描け。

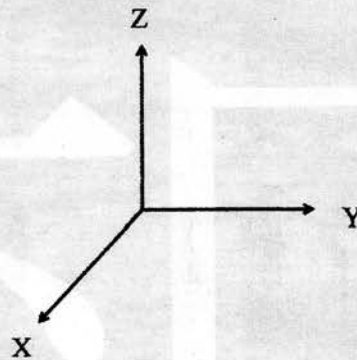


図 1

- (5) GaAs の格子定数 a は 0.565 [nm] である。(110) 面の面間隔 d [nm] を計算で求め、GaAs が発光する光の波長では GaAs (110) 面のブラッグ回折は起きない事を説明せよ。
- (6) GaAs の (110) 面の Ga 原子と As 原子の面密度 [cm^{-2}] を求めよ。
- (7) 図 2 は GaAs の価電子帯上端と伝導帯下端とともに、Ga sp^3 混成軌道と As sp^3 混成軌道のエネルギー準位を模式的に描いている。図 2 を解答用紙に写して、GaAs の (110) 表面に現れる Ga ダングリングボンドを起源とする表面準位と As ダングリングボンドを起源とする表面準位を図に破線で書き込み、その理由を説明せよ。ただし、GaAs の (110) 表面の全ての原子の位置が変位しないと仮定する。
- (8) 問(7)において、それぞれの表面準位に何個電子が詰まっているか答えよ。

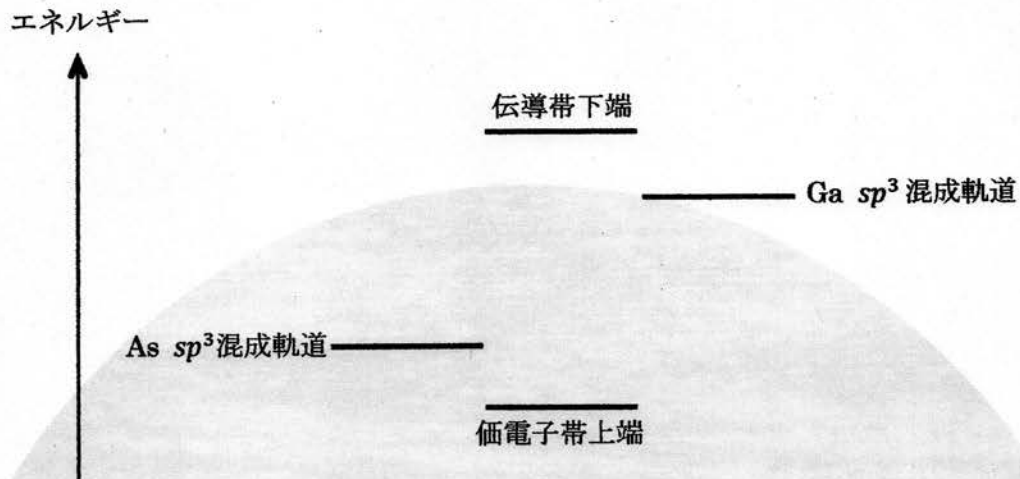


図2

- (9) 実際には, GaAs の(110)表面の原子位置は全エネルギーが低下するように変位する. 表面では結合長はGaAs結晶と比べてほとんど変化しないが結合角がGaAs結晶と比べて変化する. この時, Ga原子とAs原子は結晶表面の外部側あるいは内部側のどちらの方向にそれぞれ変位するか答え, その理由を表面準位のエネルギーの観点から説明せよ.

Problem C

Answer the following questions concerning the crystal structure and electronic properties of ionic semiconductor GaAs. Here, let c , h , and q be the velocity of light in a vacuum of 3.00×10^8 [m/s], Planck's constant of 6.63×10^{-34} [J·s], and the elementary charge of 1.60×10^{-19} [C], respectively. Calculations should be done with three significant digits. Use $\sqrt{2} = 1.41$ and $\sqrt{3} = 1.73$ if necessary.

- (1) What is the crystal structure of GaAs?
- (2) GaAs has almost the same lattice constant as covalent semiconductor Ge. Which has the larger band gap energy E_g , GaAs or Ge? Explain the reason from the viewpoint of the chemical bond.
- (3) GaAs is a direct band gap semiconductor. Describe an equation for expressing the relation between the band gap energy E_g [eV] and the light emission wavelength λ [μm]. Then obtain the value of λ by substituting 1.43 [eV] for E_g .
- (4) Copy Fig. 1 on the answer sheet, and draw the plane of the Miller indices (110) by a shaded plane.

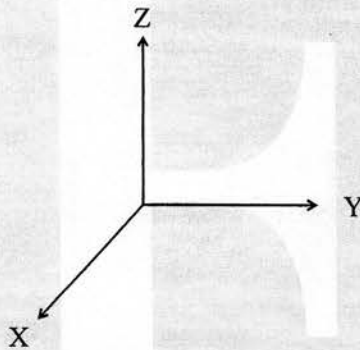


Fig. 1

- (5) The lattice constant a of GaAs is 0.565 [nm]. Calculate the interplanar distance d [nm] of the (110) plane. Then explain the reason why Bragg diffraction by the light emission wavelength of GaAs does not occur on the GaAs (110) plane.
- (6) Calculate the atomic densities [$/\text{cm}^2$] of the Ga atoms and the As atoms on the GaAs (110) plane.
- (7) Figure 2 schematically shows the energy levels of Ga sp^3 hybrid orbital and the As sp^3 hybrid orbital as well as the conduction band minimum and the valence band maximum of GaAs. Suppose that there is no displacement of any atom on the GaAs (110) surface. Copy Fig. 2 on the answer sheet. Indicate the energy level for the surface states originating from the Ga dangling bond and the energy level for the surface states from the As dangling bond as dotted lines in the figure. Then explain the reason.
- (8) In Question (7), how many electrons are occupying each of these surface states?

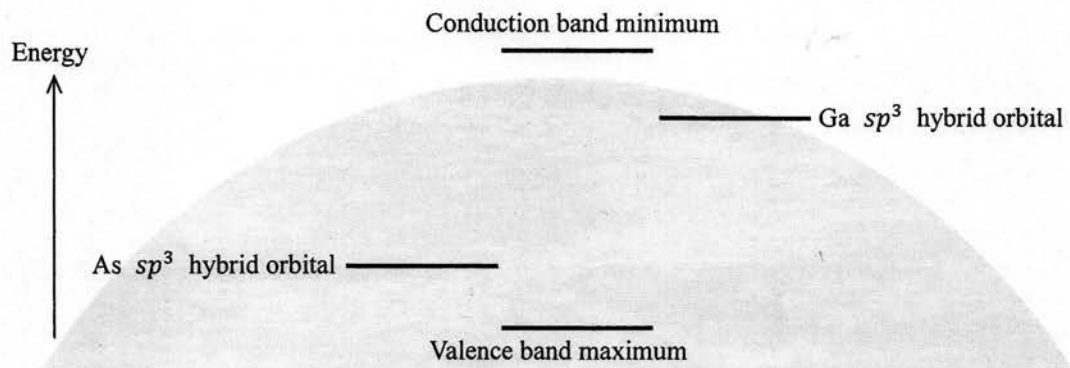


Fig. 2

- (9) In practice, the atoms on the GaAs (110) surface are displaced in order to reduce the total energy. On the surface, the bond length does not change with respect to the GaAs crystal, while the bond angle changes with respect to the GaAs crystal. Answer the direction ("outward" or "inward" of the crystal surface) of displacement of Ga atoms and that of As atoms. Describe the reason from the viewpoint of the surface states energy.