

半導体物理のおさらい(1)

I. 有効質量と電子の運動方程式

半導体結晶中では、電子はほぼ自由電子として振る舞う。これは、結晶中にたくさんの原子核（イオン）が並んでいることを考えると不思議な現象である。エネルギーバンド理論は、周期的に並んでいる原子核は電子を（ある特殊な状況以外では）散乱しないことを示している。原子核（イオン）の効果は、真空中との電子質量の違い（有効質量）として取り込まれる。

1. 有効質量

自由粒子のエネルギーは

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

つまり、一般に質量とは運動量とエネルギーを関係付ける係数である。

そこで、結晶中の電子の運動を考える。この場合、 $E \propto k^2$ は必ずしも成り立たない。それは、周期的に並んでいる原子核（イオン）によるポテンシャルが、電子と運動量の関係を変えるからである。しかし、バンドの底($k=k_0$)で E を k で展開すると、 k の一次の係数は 0 だから（底は平）、

$$E = E_0 + a_2(k - k_0)^2 + \dots$$

と書ける。そこで、高次の項を無視すれば、

$$a_2 = \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2} \bigg|_{k=k_0}$$

より、

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a} = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2} \bigg|_{k=k_0}}$$

とおけば、形式上

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k - k_0)^2$$

とでき、自由粒子と同様の取り扱いができる。このとき、結晶中の複雑なポテンシャルの効果は m^* に押し込められている。

バンドの底以外でも有効質量を使えると便利なので、上記を拡張して波数に依存した有効質量を以下のように定義する。

$$m^*(k) = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad \text{あるいはエネルギーの関数として} \quad m^*(E) = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad \text{と定義する。}$$

2. 3次元でバンドが等方的でない場合

適当な主軸変換を行えば、

$$E = E_0 + a_{2x}(k_x - k_{x0})^2 + a_{2y}(k_y - k_{y0})^2 + a_{2z}(k_z - k_{z0})^2 + \dots$$

とできるので、

$$m_x^*(E) = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}}, \quad m_y^*(E) = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2}}, \quad m_z^*(E) = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2}}$$

と3つの成分で表わせる。ただし、一般的には有効質量テンソル

$$m_{ij}^*(E) = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}}$$

となる。

3. 運動方程式と有効質量の意味

電子に対する運動方程式は $p = \hbar k$ より

$$F = m \frac{dv}{dt} = \frac{dP}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (1)$$

と書ける。波束の動く速度 v_g は

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dP} \quad (2)$$

なので、これを微分すると

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{d^2 \omega}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (3)$$

これを(1)と比べると

$$\frac{m^*}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} = 1 \quad \therefore m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}$$

とおけば

$$F = m^* \frac{dv_g}{dt}$$

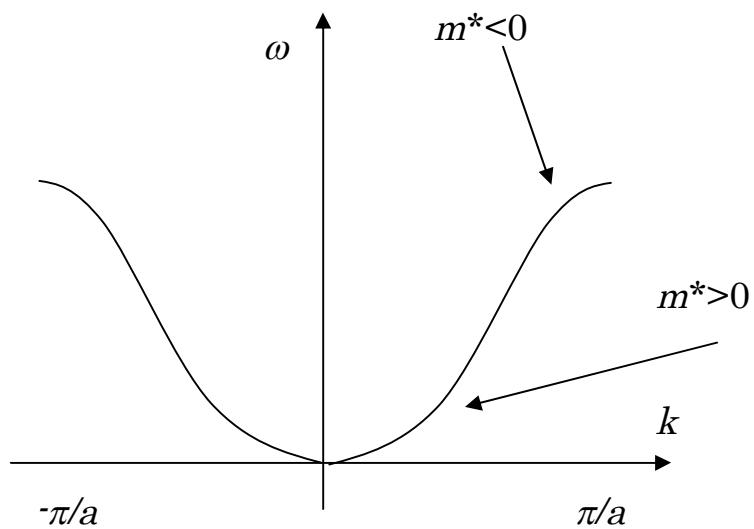
となって波束に対する運動方程式の質量とみなせる。

(注：波束の動く速度は群速度 **group velocity** と呼ばれる。<->これに対し、波のある固定された位相部分が動く速度を位相速度 **phase velocity** という。

$$v_g = \frac{dE}{dP} = \frac{d\omega}{dk} : \text{群速度}$$

$$v_p = \frac{E}{P} = \frac{\omega}{k} : \text{位相速度}$$

通常、エネルギーを運ぶのは位相速度となる。)



バンドの底付近は有効質量は正だが、バンドの上付近では有効質量は負
そのため、加速すると返って群速度が遅くなる領域がある。

II. 状態密度

1. 状態密度の定義

単位体積、単位エネルギーあたりの状態の数：単位は[cm⁻³(eV)⁻¹]

したがって電子の数は(状態の数)×(状態を電子が占める確立)となる。

*注意：状態は運動量空間の体積 h^3 あたり 2 個ずつある（スピンのため）

2. 3次元での状態密度

k 空間内で半径 k の球を考える。そこに含まれる状態の数を $N(k)$ とすると

$$N(k) = 2 \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{h^3} = \frac{8\pi k^3}{3h^3} = \frac{k^3}{3\pi^2}$$

またエネルギーと波数の関係は

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

より

$$k = \frac{\sqrt{2m^*(E - E_0)}}{\hbar}$$

これを最初の式に代入すると、

$$N(E) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{\sqrt{2m^*(E - E_0)}}{\hbar} \right)^3 = \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} (E - E_0)^{3/2}$$

したがって状態密度はこれをエネルギーで微分すれば求まる。

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (E - E_0)^{1/2}$$

3. 一次元の場合

$$N(k) = 2 \frac{2p}{h} = \frac{2k}{\pi}$$

ここに $k = \frac{\sqrt{2m^*(E - E_0)}}{\hbar}$ を代入して

$$N(E) = \frac{2\sqrt{2m^*(E - E_0)}}{\pi\hbar}$$

したがって

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{(2m^*)^{1/2}}{\pi\hbar} (E - E_0)^{-1/2}$$

4. 状態密度のイメージ

E - k 関係図を横から眺める！

5. 注意！！

○ここで使った有効質量は必ずしも運動方程式に使う有効質量と一致しない。

→状態密度有効質量

○電子が複数のバレーに存在するときは状態密度はその分だけ大きくなる。

練習問題

1) $E(k) = \frac{E_0}{2}(1 - \cos ka)$ で表わされる1次元のバンドについて状態密度を E 関数として求め、グ

ラフに示せ。(特に $E \approx 0$ と $E \approx E_0$ の近辺での状態密度の振る舞いを述べよ)

2) 2次元の放物線バンド $E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2)$ の状態密度をもとめよ。

3) $E(k) = \frac{E_0}{2}(1 - \cos ka)$ で表わされる1次元のバンドについて以下の問いに答えよ。

① 有効質量を k の関数として求め、グラフに表わせ。

② $t=0$ で $k=0$ の初期条件の下で、一定の電場 E が印加されたときの電子の運動を調べよ。また、その物理的意味を考えよ。