物性論

【問１】以下の文章を読んで，設問に答えよ。

半導体や絶縁体の励起状態で，クーロン引力を及ぼし合いながら運動する一対の電子と正孔の状態を$\boxed{\text{ア}}$という（図１）。以下でこの$\boxed{\text{ア}}$の挙動を実例に基づいて考察する。図２は，直接遷移型ギャップをもつ或る半導体（比誘電率$\epsilon/\epsilon_0 = 9.6$，$\epsilon_0$は真空の誘電率）の吸収スペクトルを模式化したものであり，実線は極低温での，破線は室温での測定結果である。実際には，実線図中のＣとＡとの間に数多くの小さなピークや吸収帯が存在するが，それらは省かれている。Ａに閾値をもち，その高エネルギー側に拡がる吸収帯はバンド間遷移によるものである。Ｃにピークをもつ幅の狭い吸収帯は$\boxed{\text{ア}}$によるものである。

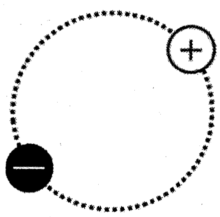

図１　$\boxed{\text{ア}}$の概念図

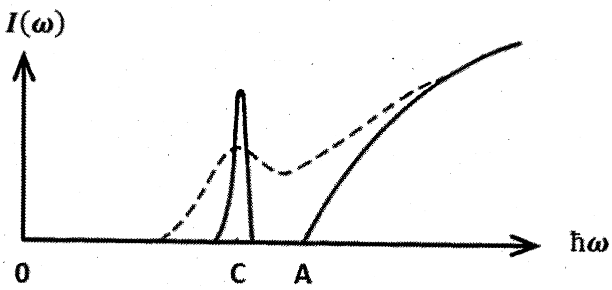

図２　吸収スペクトル
（横軸は光子エネルギー，縦軸は吸光度を示す。）

ここで，$\boxed{\text{ア}}$のエネルギーW_{ex}を考える。この半導体では，価電子帯および伝導帯のエネルギーが，波数ベクトル$\boldsymbol{k} = 0$にそれぞれ最高値および最低値をもち，価電子帯電子および伝導帯電子のエネルギー$W_{\mathrm{V}}(\boldsymbol{k})$および$W_{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k})$が，

$$W_{\mathrm{V}}(\boldsymbol{k}) = E_{\mathrm{V}} - \frac{\hbar^2|\boldsymbol{k}|^2}{2m_{\mathrm{h}}}$$

$$W_{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k}) = E_{\mathrm{C}} + \frac{\hbar^2|\boldsymbol{k}|^2}{2m_{\mathrm{e}}}$$

（m_{h}は正孔の有効質量，m_{e}は電子の有効質量）

のように表されるとする（$\hbar = h/2\pi$，hはプランク定数）。$\boxed{\text{ア}}$の波数ベクトルを$\boldsymbol{K}$で表すと，電子系の基底状態は$\boldsymbol{K} = 0$であり，そのエネルギーをE_0とする。バンドギャップエネルギーE_{g}（$= E_{\mathrm{C}} - E_{\mathrm{V}}$）はエネルギーバンドの中で$\boldsymbol{k} = 0$の価電子帯電子を$\boldsymbol{k} = 0$の伝導帯に励起するときのエネルギーである。$W_{\mathrm{ex}}$は，次式のように表される。

$$W_{\mathrm{ex}} = E_0 + E_{\mathrm{g}} - E_{\mathrm{b}}^0 + E_{\mathrm{kin}}$$

$E_0 + E_g$は，１個の電子を価電子帯の最高部から伝導帯の最低部へ励起した状態の全電子系のエネルギーである。E_b^0 は，$\boxed{\text{ア}}$の結合エネルギーであり，これが水素様エネルギー準位を形成すると考える。水素原子における電子のエネルギー固有値E_nは

$$E_n = -\frac{(M^{-1} + m^{-1})^{-1} e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2},$$

$$n = 1, 2, 3, \cdots,$$

（Mは原子核の質量，mは電子の質量，eは電気素量，nは主量子数）

と表されるので，E_b^0 は，

$$E_b^0 = \boxed{\text{イ}} \frac{1}{n^2},\quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

と表現される。

E_{kin}は，上記の各々のエネルギー準位にある$\boxed{\text{ア}}$が質量$m_e + m_h$をもって運動するときの運動エネルギーであり

$$E_{\text{kin}} = \boxed{\text{ウ}}$$

と表現される。

図２中，C にピークをもつ吸収帯は 1s $\boxed{\text{ア}}$ （$n = 1$）に起因することが分かっている。C でのエネルギーは1.386 eV であり，また A 付近の解析からバンドギャップエネルギー$E_g = 1.400$ eV であることが分かった。さらに，この半導体の正孔は，電子より遥かに軽いことも突き止めた。これらのデータから，

$$E_g - 1.386\ \text{eV} = \boxed{\text{イ}} \cong \boxed{\text{エ}}$$

$$0.014\ \text{eV} = \boxed{\text{オ}} a^2,\quad a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

が導かれる（cは真空中の光速度であり，$2.99792458 \times 10^8\ \text{ms}^{-1}$がその定義である）。
aは微細構造定数であり，この値を7.297×10^{-3}として計算すると，

$$m_h c^2 = \boxed{\text{カ}}\ \text{eV}$$

となる。この半導体の 1s$\boxed{\text{ア}}$のボーア半径a_{ex}は

$$a_{\text{ex}} = \frac{m}{(m_e^{-1} + m_h^{-1})^{-1}} (\epsilon/\epsilon_0) a_H$$

（a_{H}は水素原子のボーア半径であり，この値を5.29×10^{-9} cmとして計算する）と表される。$mc^2 = 0.511$ MeV として計算すると，

$$a_{\mathrm{ex}} \cong \boxed{\text{キ}}\ \mathrm{nm}$$

このa_{ex}を半径とする球内に不純物や欠陥があると$\boxed{\text{ア}}$は壊れてしまい観測されない可能性がある。これを避けるためには，不純物・欠陥濃度Nが，a_{ex}を用いて表現された

$$N < \boxed{\text{ク}}$$

という条件を満たすようにしなければならない。つまり，Nを$\boxed{\text{ケ}}$ $\mathrm{cm^{-3}}$より低く抑える必要がある。

1）$\boxed{\text{ア}}$ ～ $\boxed{\text{ケ}}$を埋めよ。$\boxed{\text{ア}}$には語句が，$\boxed{\text{イ}}$ ～ $\boxed{\text{オ}}$および$\boxed{\text{ク}}$には上記文中に与えられた物理量の記号を組み合わせたものが，そして，$\boxed{\text{カ}}$，$\boxed{\text{キ}}$および$\boxed{\text{ケ}}$には数値が当てはまる。

2）C にピークをもつ吸収帯は，極低温では鋭い線形を示すが，室温では線幅を増し，なだらかな形になる。この理由を述べよ。

【問２】

電気伝導率σが，次式で表現されるものとする。

$$\sigma = nq\mu \quad (n\text{はキャリア濃度，}q\text{は電荷，}\mu\text{は移動度})$$

このとき，σの温度依存性に関する以下の設問に答えよ。

1）金属の電気伝導率は温度の増大とともに小さくなる。この理由を述べよ。

2）バンドモデルが適用される半導体での電気伝導率の温度依存性を説明せよ。