

縮退前後の半導体における不純物帯

後川 昭雄・藁品 正敏

Impurity Energy Band in Nearly Degenerate Semiconductor

By

Akio USHIKAWA and Masatoshi WARASHINA

Abstract: Simple theoretical expressions of the state-densities of impurity energy bands in the nearly degenerate semiconductor are given at the aim of the fact that the expressions are convenient for the dependency of the state-densities on the impurity concentration, and that available for a design theory of degenerate semiconductor devices⁷⁾. In the case of very much impurity concentration N , the impurity distribution in the crystal is actually at random, but an average distribution may be approximated to the case of very weak periodicity of " la ", where " a " is the lattice constant of the mother crystal and " l " is a constant determined only by the N .

Then, it is found that the potential distribution in this crystal is of " a " periodicity modulated by the weak average periodicity of " la ". Thus, "almost free electron approximation" method can be used in the analysis of the impurity energy bands. In the only case of introducing this new weak average periodicity, simple theoretical formulas of impurity band depending upon the " N " may be obtained.

In the case of x direction in a crystal, the potential distribution and the wave function are given as Eq. (1) and (2), respectively. The electron motion is given by Eq. (3). According to almost free electron approximation, the wave function can be approximated as Eq. (4). When solve the equation of the electron motion, setting energy zero point as Eq. (7), such a determinant as Eq. (11) characterizing energy bands in this crystal is derived from the condition of the existing wave function (4). Still more, a quantity $a_{12}a_{23}a_{13}^* + a_{13}a_{12}^*a_{23}^*$ is cubic of potential energy, so that this quantity may be neglected compared with the products of kinetic energy and square of potential energies. Thus, we can deduce the determinant (11) to Eq. (12) as follows

$$\frac{1}{3}a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{23}^* & a_{33} \end{vmatrix} + a_{22} \begin{vmatrix} \frac{1}{3}a_{11} & a_{13} \\ a_{13}^* & a_{33} \end{vmatrix} + a_{33} \begin{vmatrix} \frac{1}{3}a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{vmatrix} = 0$$

Each determinant in Eq. (12) to be equal to zero is solved. It can be found that the first determinant, second's and third's correspond, respectively, to the energy bands affected by both mother crystal lattice and impurity lattice, the impurity energy band

constructed by only impurity lattices and by only mother crystal. Then, in this paper, we propose the approximation to the case of the nearly degenerate semiconductor, in which we assume to exist a weak periodic potential, so that the impurity energy bands may be obtained in simple and available form. For examples, as for the n -th impurity band, the maximum state-density of impurity $g_{i,\max}$ is located at the energy at $k = \pi(n - \frac{1}{2})/la$. In both cases that potential distributions between impurity atoms are overlapped even between the nearest neighbor impurity ions and that are not overlapped, as increasing $N(=(la)^{-3})$, $g_{i,\max}$ is hardly dependent of N and the allowed energy band width almost corresponds to $N^{2/3}$, so that it may be supposed that an electron activation energy in this nearly degenerate semiconductor decreases with $N^{2/3}$ as increasing N .

概 要

縮退前後の半導体の不純物エネルギー帯の形成過程[6]とデバイス設計[7]にも役立つ立場から、特に状態密度の不純物濃度 N 依存性に関する見通しのよい理論式を得る。 N が非常に増加した縮退前後の半導体の場合では、実際には不純物分布は不規則であるが、平均的にながめると、その分布は弱い周期性“ la ”を持っていると近似して考えられる。“ a ”は母体結晶の格子定数、“ l ”は N だけから決まる定数である。したがって、本結晶内のポテンシャル分布はゆるい平均周期“ la ”で変調された“ a ”なる周期性となるため、“ほとんど自由な電子近似法がエネルギー帯の解析に適用できる。この新しいゆるい平均周期性を導入することによって初めて、 N に依存する不純物帯の簡単な近似式を得ることができるので、本論文ではこの近似の立場をとる。

したがって、衆知の方法により波動関数の(4)式を得、それが存在するために必要な条件から、エネルギー帯を規定する行列式、(11)式を得る。更に、ほとんど自由な電子近似では $a_{12}a_{23}a_{13}^* + a_{13}a_{12}^*a_{23}^*$ なる量はポテンシャルエネルギーの三乗なる量であるため、ポテンシャルエネルギーの二乗と運動エネルギーとの積の項に比し無視しうるので、(12)式のように簡略化できる。

$$\frac{1}{3}a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{23}^* & a_{33} \end{vmatrix} + a_{22} \begin{vmatrix} \frac{1}{3}a_{11} & a_{13} \\ a_{13}^* & a_{33} \end{vmatrix} + a_{33} \begin{vmatrix} \frac{1}{3}a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{vmatrix} = 0$$

第1項の行列式、第2項と第3項が、おのこのゼロになる場合を求める。それは、おのおの、母体格子と不純物格子の両者が同時に影響した帯、不純物格子だけによる不純物帯、母体結晶だけからなる帯に対応する。こうして、縮退前後の半導体を平均的なゆるい周期性のポテンシャルで近似することを提案し、その不純物エネルギー帯を簡略に求めたが、実際的立場からは、たとえば、特に n 番目の不純物帯に関し、 $k = \pi(n - 1/2)/la$ の E で不純物帯最大状態密度 $g_{i,\max}$ が存在し、最近接不純物イオン間のポテンシャルの重なりがあるときとないときでも、 $N(=(la)^{-3})$ の増大により $g_{i,\max}$ と N との関係は、ほぼ N によらず、また、その不純物帯の許容幅は、いずれの場合も、ほぼ、 $N^{2/3}$ に比例し、したがって、電子の活性化エネルギーは $N^{2/3}$ に比例して減少することがわかる。

概 要

- | | |
|---|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. まえがき 2. 縮退半導体の電子状態とポテンシャル分布 3. エネルギー帯構造 4. 不純物帯のエネルギー許容幅, 状態密度の濃度依存性 5. 不純物ポテンシャル分布の適用例 <ol style="list-style-type: none"> 5.1 最近接不純物イオン同士のポテンシャル分布の重なりがない場合 | <ol style="list-style-type: none"> 5.2 最近接不純物イオン同士のポテンシャル分布の重なりがある場合 6. むすび <p>参考文献
付 録</p> <p>A 1. (3)式の三次元への拡張
A 2. “ほとんど自由な電子”の近似による(4)式の証明</p> |
|---|--|

1. ま え が き

不純物濃度の少ない非縮退半導帯の不純物エネルギー準位の理論は衆知のごとく、個々の電子の運動が各不純物イオンのまわりに局在するという考え方である。たとえば、結晶内の周期的静電場の不純物イオンによる局所的ポテンシャルの谷が重なった場合、電子はこの谷にとらえられて運動範囲が限定され、不純物原子の電子のエネルギー状態は線状となり、アクセプタレベルやドナレベルとして作られるようになる。この局所的静電場を不純物によるクーロンポテンシャルでおきかえ、周囲の結晶全体をある電媒定数をもって電子への作用を表わす水素原子様モデルを導入した有効質量近似法[4]が有名である。一方、不純物濃度が高く、縮退前後になった場合は、これまで主として不純物原子の分布が不規則であるとし、不純物イオンの電位を Thomas-Fermi 形または、クーロンポテンシャルとして不純物帯の濃度依存性や真性エネルギー帯の拡大を考察している[1]が、これらの状態密度を考えた場合、複雑で取り扱いに不便な形になってしまう。それらの原因は、いずれも不純物分布を不規則であるとしたためである。しかし巨視的立場からは、その分布が平均的には、ある周期性を持つと考えることも許されよう。この規則性の導入によって始めて見通しのよい近似的な不純物帯が可能となるはずである。実験的にもエサキダイオードに順方向パルスを加え、電流電圧特性から再結合放射スペクトルを解析し、縮退の効果から不純物帯の形成を確かめた報告[2]や、不純物帯の活性化エネルギーは、その濃度が増すと減少し、ついには真性半導体のエネルギー帯と重なることを低温状態の燐を添加した *Si* 半導体について調べた Penin らの報告[3]があり、上記の実効的な考え方を支持してくれる。そこで本論文では、いままでの局在的でしかも不規則な不純物イオンの分布とは異なった立場、すなわち、不純物濃度が非常に大きいために、平均的にながめると、ゆるい周期性を持って母体結晶の密な周期ポテンシャルに重畳して分布していると近似する。この場合、“ほとんど自由な電子”(almost free electron)の近似[5]が利用できるので不純物帯の形成過程と、その状態密度の濃度依存性が見通しのよい形で考察できることになり、ひいては、デバイス設計にも適用しやすい理論式[6]を導くことができ、たとえば、エサキダイオードの電流電圧特性の不純物濃度依存性も簡便にもとめることができる[7]。

2. 縮退半導体の電子状態とポテンシャル分布

高不純物濃度結晶内の不純物原子の格子点は実際には多少とも不規則に分布していようが、不純物によるエネルギー帯を形成するときには、ポテンシャルエネルギーの分布は、少なくとも平均的にながめて周期的であると考えられる。そこで、 l を濃度による定数とし、新しい周期 " la " を導入する。 l の増加は、すなわち不純物濃度の減少に対応し、母体結晶の周期 a のポテンシャルエネルギー分布に近づくわけである。このような高不純物濃度結晶内のポテンシャルエネルギー $V(x)$ 分布は、 a と la を周期とするポテンシャルの和で表示できる。 x 方向の一次元結晶では、周期性のため Fourier 級数展開ができ、

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [V_n \exp(-2\pi i n x/a) + W_n \exp\{-2\pi i n x/(la)\}] \quad (1)$$

で表示できる。右辺第1項は周期 a の関数、第2項は不純物格子だけによるもので周期 la 、 V_n と W_n は、それぞれの展開係数である。このような周期性結晶内の電子状態、すなわち、波動関数 $\psi(x)$ もまた a 周期と la 周期の状態の分布 (Bloch 関数) の和であると考えられ、

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [A_n \exp(-2\pi i n x/a) + B_n \exp\{-2\pi i n x/(la)\}] \cdot e^{ikx} \quad (2)$$

となる。 k は波動ベクトルであり、この電子状態は、 la 周期ごとに同一状態の分布がくり返えされるが、 l が大きくなると、すなわち不純物濃度が少なくなるにつれて、 a 周期の母体完全結晶に移行する。

一方、電子の運動方程式は、三次元に拡張するのは簡単であるが (付録 [1])、一次元の x 方向では、

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + [E - V(x)]\psi = 0 \quad (3)$$

で与えられ、 \hbar は 2π で割ったプランク定数、 m は電子の質量、 E はそのエネルギーである。ここで、“ほとんど自由な電子”の近似の考え方 [5] を活用し、電子の状態に関し、(2)式の Fourier 展開中で、 n についての和に関し、0番目と n 番目の項だけを残して、 $\psi(x)$ を (4)式のごとく近似し (付録 [2])、これを (3)式に代入して演算を施すと (5)式を得る。

$$\psi(x) \doteq (A_0 + B_0 + A_n e^{-2\pi i n x/a} + B_n e^{-2\pi i n x/la}) \cdot e^{ikx} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (A_0 + B_0) + \frac{\hbar^2 A_n}{2m} \left(\frac{2\pi n}{a} - k \right)^2 \cdot e^{-2\pi i n x/a} + \frac{\hbar^2 B_n}{2m} \left(\frac{2\pi n}{la} - k \right)^2 \cdot e^{-2\pi i n x/la} \right\} \cdot e^{ikx} \\ & + \{ (A_0 + B_0) V(x) + A_n \cdot V(x) \cdot e^{-2\pi i n x/a} + B_n \cdot V(x) \cdot e^{-2\pi i n x/la} \} \cdot e^{ikx} \\ & = E \cdot (A_0 + B_0 + A_n e^{-2\pi i n x/a} + B_n e^{-2\pi i n x/la}) e^{ikx} \end{aligned} \quad (5)$$

(5)式の両辺に e^{-ikx} を掛け、 $V(x)$ の関数の直交性を用い、 x についてゼロから la まで積分すると、

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (A_0 + B_0) la + A_n \int_0^{la} V(x) \cdot e^{-2\pi i n x/a} dx + B_n \int_0^{la} V(x) \cdot e^{-2\pi i n x/la} dx \\ & = la E \cdot (A_0 + B_0) \end{aligned} \quad (6)$$

となる. ここで $V(x)$ のゼロから la までの位置領域で, 平均値がゼロとなるように $V(x)$ の基準を移動し,

$$\int_0^{la} V(x) \cdot dx = 0 \quad (7)$$

としている. (6)式の $V(x)$ に (1)式を代入すると (8)式, (5)式の $V(x)$ に (1)式を代入し, 両辺におおの $\exp\left\{-i\left(k-\frac{2\pi n}{a}\right)x\right\}$ および $\exp\left\{-i\left(k-\frac{2\pi n}{la}\right)x\right\}$ を掛け, ゼロから la まで積分すると, (9) と (10)式を得る.

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)(A_0 + B_0) + (V_{-n} + W_{-nl})A_n + (V_{-n/l} + W_{-n})B_n = 0 \quad (8)$$

$$(V_n + W_{nl})(A_0 + B_0) + \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)^2 - E\right\}A_n + (V_{n-n/l} + W_{nl-n})B_n = 0 \quad (9)$$

$$(V_{n/l} + W_n)(A_0 + B_0) + (V_{n/l-n} + W_{n-nl})A_n + \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)^2 - E\right\}B_n = 0 \quad (10)$$

不純物結晶内の電子状態, (4)式が存在するためには, $(A_0 + B_0)$, A_n と B_n がことごとくゼロであってはならないため, (8)~(10)式の各係数数による行列式をゼロにする必要がある.

$$0 = \begin{vmatrix} \left\{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right\} & V_{-n} + W_{-nl} & V_{-n/l} + W_{-n} \\ V_n + W_{nl} & \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)^2 - E\right\} & V_{n-n/l} + W_{nl-n} \\ V_{n/l} + W_n & V_{n/l-n} + W_{n-nl} & \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)^2 - E\right\} \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12}^* & a_{22} & a_{23} \\ a_{13}^* & a_{23}^* & a_{33} \end{vmatrix} \quad (11)$$

ここで a_{ij}^* は a_{ij} の共役複素数である. (11)式を展開する際, $a_{12}a_{23}a_{13}^* + a_{13}a_{12}^*a_{23}^*$ はポテンシャルエネルギーの三乗の項でほかは運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの自乗との積の項であるため, “ほとんど自由な電子” の近似では, 無視する. したがって (11)式は,

$$\frac{1}{3}a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{23}^* & a_{33} \end{vmatrix} + a_{22} \begin{vmatrix} \frac{1}{3}a_{11} & a_{13} \\ a_{13}^* & a_{33} \end{vmatrix} + a_{33} \begin{vmatrix} \frac{1}{3}a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad (12)$$

となる. これは結晶内のエネルギー帯を規定する基本式であり, 各小行列式がゼロになる場合について展開する.

3. エネルギー帯構造

まず(12)式の第1項の小行列式だけがゼロのときの帯構造を求めるため, (11)式の定義を用い, これを E に関して解くと,

$$E = \frac{\hbar^2}{4m} \left[\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)^2 \right] \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \left[\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)^2 - \left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)^2 \right]^2 + 4|a_{23}|^2} \quad (13)$$

となり, k が (14)式の k_{01} のとき, E は (15)式となる. さらに, (15)式を k_{01} で表わすと, (16)式を得る. これは濃度の増大, すなわち l の減少により, 電子の質量が, 実効的に,

に自由電子の $(\hbar k)^2/2m$ からずれて、大きくなることを示す。したがって、 E は図1 (a) のごとく k_{01} で (17) 式のエネルギーギャップ ΔE がある。すなわち、

$$k_{01} = \frac{n\pi}{a} \left(1 + \frac{1}{l}\right) \quad (14)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{n\pi}{a} \left(1 - \frac{1}{l}\right) \right\}^2 \pm |a_{23}| \quad (15)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{l-1}{l+1} \right)^2 \cdot k_{01}^2 \pm |a_{23}| \quad (16)$$

$$\Delta E = 2|a_{23}| = 2|V_{n-n/l} + W_{nl-n}| \quad (17)$$

(13) 式から求めた $\partial E/\partial k$ は、 $k=k_{01}$ でゼロになるため、 k_{01} の所、すなわち、(13) 式による各バンド (n による) の頂上や下端で E 曲線は水平となる。ここで l の増大により、ギャップは $2|V_n|$ に、 W_{nl-n} は小さくなりついにはゼロの大きさとなる。一方、Brillouin 領域の大きさも $2\pi(1+1/l)/a$ から $2\pi/a$ になるため、周期 a の真性半導体の構造に近づく。

次に、(12) 式の第2項の小行列式だけがゼロとなる場合も同様に、(11) 式の定義を用いて、 E について解くと、

$$E = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + \left(\frac{2\pi n}{la} - k \right)^2 \right] \pm \sqrt{\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 - \left(\frac{2\pi n}{la} - k \right)^2 \right] \right\}^2 + 12|a_{13}|^2} \right\} \quad (18)$$

となり、 k が (19) 式の $k=k_1$ のとき、 E は (20) 式となり、図1 (b) のごとく、(21) 式のギャップがある。すなわち、

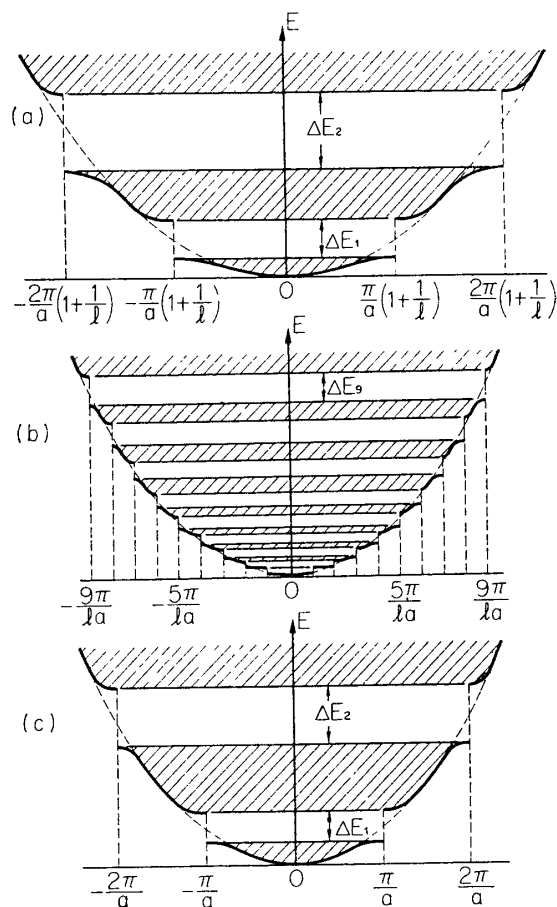
$$k_1 = n\pi/(la) \quad (19)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{la} \right)^2 \pm \sqrt{3} |a_{13}| \quad (20)$$

$$\Delta E = 2\sqrt{3} |a_{13}| = 2\sqrt{3} |V_{n/l} + W_n| \quad (21)$$

である。(18) 式から、 $\partial E/\partial k$ は (19) 式の k_1 でゼロとなるため、やはり、バンドの頂上や下端で E 曲線は水平となる。ギャップ (21) 式は、濃度の増大、 l の減少により $V_{n/l}$ は小さくなり、 $2\sqrt{3}|W_n|$ に近づき、不純物格子だけの影響となるため、不純物帯であることがわかる。

最後に、(12) 式の第3項目の小行列式だけがゼロとなる場合から求まる帯構造も同様に、 E は (22) 式、 k が (23) 式の k_0 のとき、 E は (24) 式となり、図1 (c) のごとく、ギャップは (25) 式となる。すなわち、



第1図 三種のエネルギー帯構造

$$E = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + \left(\frac{2\pi n}{a} - k \right)^2 \right] \pm \sqrt{\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 - \left(\frac{2\pi n}{a} - k \right)^2 \right] \right\}^2 + 12 |a_{12}|^2} \right\} \quad (22)$$

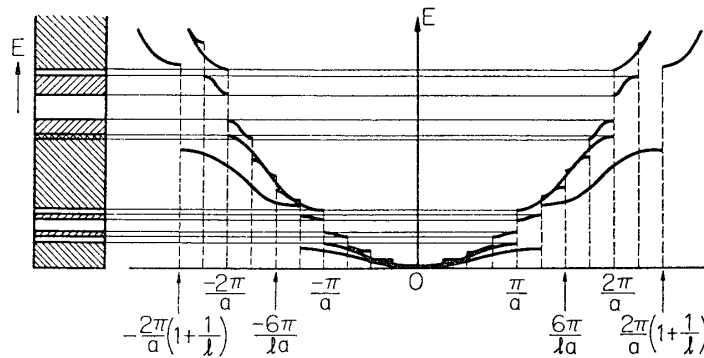
$$k_0 = n\pi/a \quad (23)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \pm \sqrt{3} |a_{12}| \quad (24)$$

$$\Delta E = 2\sqrt{3} |a_{12}| = 2\sqrt{3} |V_{-n} + W_{-nl}| \quad (25)$$

である。(22) 式の $\partial E/\partial k$ も、(23) 式の $k=k_0$ のとき、ゼロとなるため、(22) 式による各バンド (n による) も、頂上や下端では、 E 曲線は k に対して水平である。Brillouin 領域の大きさは、 $2\pi n/a$ で、格子間隔 a の真性半導体と同じであるが、ギャップは濃度の減少により、 $\Delta E = 2\sqrt{3} |V_n|$ に近づき母体結晶のポテンシャルエネルギーだけで制限されるようになるため、これは本質的に、母体結晶だけによる帯であることがわかる。

以上から、不純物結晶内の帯構造は (13), (18) と (22) 式を同時に満たさねばならない。すなわち、図 1 の (a), (b) と (c) 図の 3 成分が同時に生じている図 2 が求める帯構造であ



第 2 図 高不純度結晶内のエネルギー帯構造

り、////印は特に、禁制帯内の不純物帯を、||||印は、ほぼ、真性半導体の帯を示し、(12) 式を満足している。ここで、各 3 成分のエネルギー帯構造の n 番目の帯のギャップの大小関係を求める。たとえば、 $V_{n-n/l}$, V_{nl-n} 等はポテンシャル分布 (1) 式の Fourier 展開係数で、添字の絶対値が大きいほど、係数値が小さいため、

$$2|V_{n-n/l} + W_{nl-n}| > 2\sqrt{3} |V_{-n} + W_{-nl}| > 2\sqrt{3} |V_{-n/l} + W_{-n}| \quad (26)$$

が成立する。ここで左側の項は (17) 式、中央の項は (25) 式、右側の項は (21) 式である。このギャップの内、濃度に対応する l による変化率の大きいものは、不純物帯の場合で、密な周期ポテンシャル V の展開係数の添字に直接 l が含まれているため、その係数値の変化率は比較的大きい。他の二つの成分の帯も、 l の増減により真性の場合の帯からの拡大や縮小があるが、それほど大きい割合ではない。その結果、真性の場合に近い帯と、不純物帯が互いに重なり合うこともある。このことから、まえがきで述べた Pankove[2] や Penin[3] らの事実を解釈できる。一方、この 3 成分の帯の Brillouin 領域の大きさは、濃度の減少で k_0 は変化しないが、 k_{01} はそれに応じて減少し、ついには真性の場合の k_0 に近づく。また不純物帯の場合の k_1 は減少する。(26) 式の内、最小のギャップが不純物帯の場合であるが、それらの実際の値は、本結晶内のポテンシャル分布の実際の幾何学的構造を与えて初め

て規定できるものである。

次に、(18) 式の不純物帯が $k=n\pi/(la)$ 近傍、すなわち、 n 番目の不純物帯の上端や下端近傍でエネルギー E がどう変化するかを求める。 $k'=k-\{n\pi/(la)\}$ として (18) 式を展開すると、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{la} \right)^2 \pm \sqrt{3} |a_{13}| + \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ 1 \pm \frac{\hbar^2 [n\pi/(la)]^2}{\sqrt{3} m |a_{13}|} \right\} k'^2 \quad (27)$$

となり、 E は k' の二次曲線となるため、従来の完全結晶と同様に不純物帯の頂上や下端近でも状態密度は E に関して放物線的になる [8]。図2で、従来の真性に近い帯と不純物帯のエネルギー的位置として、従来の禁制帯内いくつかの不純物帯を示すが、これは便宜的で、実際の (1) 式の $V(x)$ の性質により、一本になる場合も、従来の帯の頂上や下端と重なることも、濃度が少なければ、不純物帯は線状になっていく。

4. 不純物帯のエネルギー許容幅、状態密度の濃度依存性

(18) 式の不純物帯 E の a_{13} を (11) 式を用いて、書きなおすと、

$$E = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + \left(\frac{2\pi n}{la} - k \right)^2 \right] \pm \sqrt{\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 - \left(\frac{2\pi n}{la} - k \right)^2 \right] \right]^2 + 12 |V_{n/l} + W_n|^2} \right\} \quad (28)$$

となる。この n 番目の帯の k に対する概形を図3に示す。図中の点線は自由電子の場合を示し、したがって、図の E_1 , E_m , E_2 , E_1-E_t と E_b-E_2 はそれぞれ、

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{la} \right)^2, \quad E_m = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\pi}{la} \left(n - \frac{1}{2} \right) \right\}^2,$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\pi}{la} (n-1) \right\}^2,$$

$$E_1 - E_t = \sqrt{3} |V_{n/l} + W_n|,$$

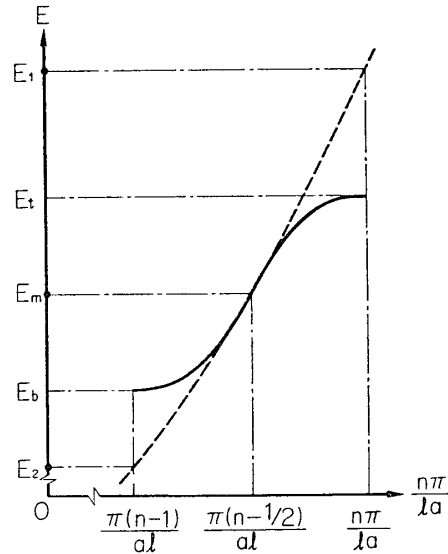
$$E_b - E_2 = \sqrt{3} |V_{(n-1)/l} + W_{n-1}|$$

で与えられる。帯の頂上のエネルギー値 E_t は、(28) 式の正負の符号の内、負を用いる必要があり、 $n=n$, $k=n\pi/(la)$ としたときの値、(29) 式である。同様に下端のエネルギー値 E_b は (28) 式 of 正符号を採用し、 n を $(n-1)$ にしたときの値 (30) 式である。それらは、

$$E_t = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{la} \right)^2 - \sqrt{3} |V_{n/l} + W_n| \quad (29)$$

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\pi(n-1)}{la} \right\}^2 - \sqrt{3} |V_{n-1} + W_{n-1}| \quad (30)$$

である。また、不純物濃度 N と l の関係は、 $N=(la)^{-3}$ であるため、 n 番目の不純物帯の許容幅 ΔE_a は、



第3図 n 番目の不純物帯の E と k の概形

$$\Delta E_a = E_t - E_b = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} \cdot (2n-1) \cdot N^{2/3} - \sqrt{3} (|V_{n/l} + W_n| + |V_{(n-1)/l} + W_{n-1}|) \quad (31)$$

である。第2項の N 依存性は、本結晶内の実際のポテンシャルの分布の形によるが、真性半導体の帯に対応するもの、(13) 式、(22) 式にくらべて、実際には、この許容幅 (31) 式は十分に小さいと考えられ、図3の不純物帯の状態密度の $n\pi/(la)$ に対する変化の形は、 $\pi(n - \frac{1}{2})/(la) \leq k' \leq n\pi/(la)$ の領域では、ほぼ、その頂上付近の変化におきかえてさしつかえないので、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{la} \right)^2 - \sqrt{3} |a_{13}| + \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ 1 - \left[\hbar^2 \left(\frac{n\pi}{la} \right)^2 / (\sqrt{3} m |a_{13}|) \right] \right\} k'^2 \quad (32)$$

で与えられる。同様に、 $\pi(n-1)/(la) \leq k' \leq \pi(n - \frac{1}{2})/(la)$ では、ほぼ下端付近の変化におきかえてもよいと考え、(27) 式の正負符号のうち、正を用い n を $(n-1)$ にした式

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\pi(n-1)}{la} \right]^2 + \sqrt{3} |a_{13}| + \frac{\hbar^2}{2m} \left[1 + \left\{ \hbar^2 \left(\frac{\pi(n-1)}{la} \right)^2 / (\sqrt{3} m |a_{13}|) \right\} \right] k'^2 \quad (33)$$

で与えられる。(33) 式に対する状態密度を求めるため、三次元に拡張する。まず K_x と m_x を

$$K_x \equiv \{ \hbar\pi(n-1) \}^2 \cdot (2m)^{-1} \cdot N^{2/3} + \sqrt{3} |a_{13}| \quad (34)$$

$$m_x^* \equiv m / [(\sqrt{3} m |a_{13}|)^{-1} \cdot \{ \hbar\pi(n-1) \}^2 \cdot N^{2/3} + 1] \quad (35)$$

と定義し、(33) 式は x 方向の一次元のエネルギーのため、その k' を k'_x 、 E を E_x と書きあらため、同様にして y 、 z 方向の成分も表わすと、

$$E_x = \frac{\hbar^2 k'_x{}^2}{2m_x^*} + K_x, \quad E_y = \frac{\hbar^2 k'_y{}^2}{2m_y^*} + K_y, \quad E_z = \frac{\hbar^2 k'_z{}^2}{2m_z^*} + K_z \quad (36)$$

となり、三次元での E は $E = E_x + E_y + E_z$ で与えられるため (付録 [I])、等方結晶 $m_x^* = m_y^* = m_z^* \equiv m^*$ 、 $K_x = K_y = K_z \equiv K_p$ と仮定すれば、 $E = \hbar^2(k'_x{}^2 + k'_y{}^2 + k'_z{}^2)/(2m^*) + 3K_p$ となる。ここで、 $\hbar k'_x$ 、 $\hbar k'_y$ 、 $\hbar k'_z$ は、各運動量成分に対応する。電子のスピンを考慮すると、 E から $E + \delta E$ 間にある状態密度 $g\delta E$ は、

$$g\delta E = \frac{2\pi}{\hbar^3} (2m^*)^{3/2} \cdot \sqrt{E - 3K_p} \cdot \delta E \quad (37)$$

で与えられる [8]。したがって、従来の伝導帯の下端や価電子帯の頂上付近と同様に、エネルギーの平方根に比例する。ここで、 m^* や K_p が不純物濃度とともに変化し、もちろん、 $|a_{13}|$ も濃度によるポテンシャル分布構造に依存する。しかし、不純物濃度 N の増大で、(35) 式の分母は、 $1 \ll \hbar\pi(n-1)N^{2/3}/(\sqrt{3} m |a_{13}|)$ になる場合を考えると、(37) 式は、

$$g = \frac{2\pi}{\hbar^3} \left[\frac{2\sqrt{3} m^2 |a_{13}|}{\{ \hbar\pi(n-1) \}^2} \right]^{3/2} \cdot N^{-1} \cdot \sqrt{E - 3 \left[\frac{\{ \hbar\pi(n-1) \}^2}{2m} \cdot N^{2/3} + \sqrt{3} |a_{13}| \right]} \quad (38)$$

で与えられ、これが、図3の $\pi(n-1)/(la) \leq k' \leq \pi(n - \frac{1}{2})/(la)$ 領域の E で成立する状態密度となる。この k' 領域の最大不純物帯状態密度 g_{\max} は、 $k' = \pi(n - \frac{1}{2})/(la)$ での E 、(39) 式で生じ、この E を (38) 式に代入して、(40) 式のごとく得られる。すなわち、

$$E = 3E_x = 3\hbar^2 \left\{ \pi \left(n - \frac{1}{2} \right) \right\}^2 \cdot N^{2/3} / (2m) \quad (39)$$

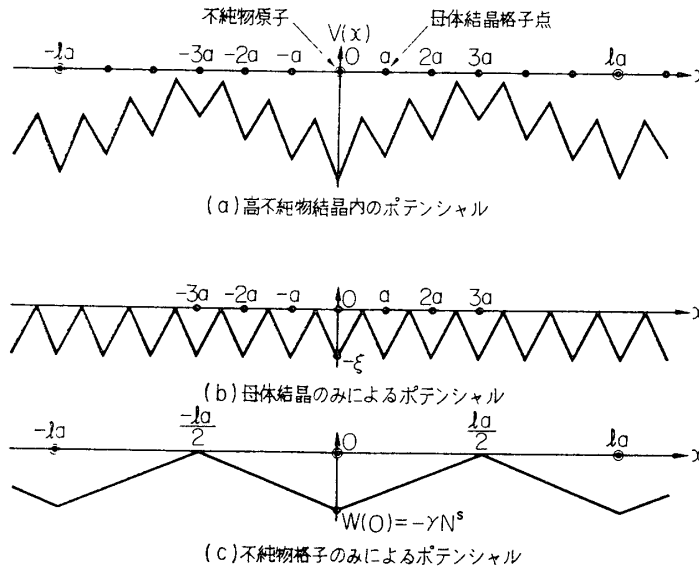
$$g_{l, \max} = \frac{2\pi}{\hbar^3} \left[\frac{2\sqrt{3} m^2 |a_{13}|}{\{\hbar\pi(n-1)\}^2} \right]^{3/2} \cdot N^{-1} \cdot \sqrt{\frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(n - \frac{3}{4} \right) \cdot N^{2/3} - 3\sqrt{3} |a_{13}|} \quad (40)$$

である。同様に、図3の $E_m \leq E \leq E_t$ の領域でも同様な議論が成立する。

5. 不純物ポテンシャル分布の適用例

5.1 最近接不純物イオン同士のポテンシャル分布の重なりがない場合

図4.1(a)の \odot 印は不純物原子、 \bullet 印は母体結晶を構成する原子の位置を示す。直線状近似を用いた(a)図は、母体結晶のみによる(b)図と、不純物原子のみによるポテンシャル分布(c)図の重畳からなる場合とする。また、不純物濃度 N によるポテンシャルは(c)



第4.1図 不純物結晶内のポテンシャル分布

図で、不純物格子点でのポテンシャルの深さは、 S を任意定数として、 N^s に比例して深くなると仮定する。この比例定数 γ は不純物原子の種類で決まる。 $W(x)$ なる不純物イオンだけによるポテンシャル分布は、それぞれ、 $0 \leq x \leq la/2$ 、 $-la/2 \leq x \leq 0$ では、(41) 式の正、負符号に対応させるとすれば、

$$W(x) = \pm 2\gamma N^s x / (la) - \gamma N^s \quad (41)$$

であり、 N により変動する。 $W(x)$ の Fourier 係数 W_n は、

$$\begin{aligned} W_n &= \frac{\gamma N^s}{la} \cdot \left\{ \int_0^{la/2} \left(\frac{2x}{la} - 1 \right) e^{2\pi i n x / (la)} \cdot dx - \int_{-la/2}^0 \left(\frac{2x}{la} + 1 \right) e^{2\pi i n x / (la)} \cdot dx \right\} \\ &= \frac{\gamma N^s}{(\pi n)^2} \cdot \{(-1)^n - 1\} \end{aligned} \quad (42)$$

となる。母体結晶のみによる Fourier 係数 V_n については、図 4(b) のごとく、母体結晶を構成する原子の位置しているところでの、ポテンシャルの最大の深さを ξ とすると、

$$V_n = \frac{\xi}{(\pi n)^2} \cdot \{(-1)^n - 1\} \quad (43)$$

となる。

次に、 $N=(la)^{-3}$ を用いて、 $|a_{13}|$ の N 依存性を求め、(32) 式を用い、

$$|a_{13}| = \left| \frac{\xi \{(-1)^{naN^{1/3}} - 1\}}{(\pi na)^2 \cdot N^{2/3}} + \frac{\gamma N^s}{(\pi n)^2} \{(-1)^n - 1\} \right| \quad (44)$$

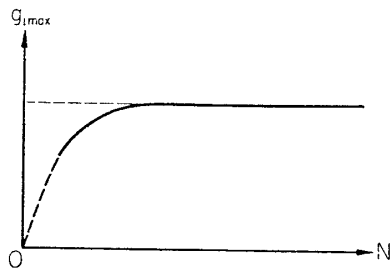
となるが、 N の増大で、 $V_{n/l} \ll W_n$ となるため、右辺の第 1 項を無視し、(40) 式の $|a_{13}|$ に代入し、 K_{g1} を

$$K_{g1} \equiv \frac{2\pi}{\hbar^3} \left[\frac{2\sqrt{3} m^2}{\{\hbar\pi(n-1)\}^2} \right]^{3/2} \cdot \left[\frac{\gamma \{(-1)^n - 1\}}{(n\pi)^2} \right]^{3/2} \quad (45)$$

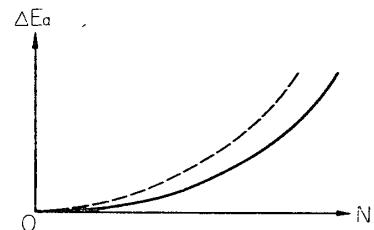
と定義すれば、

$$g_{i,\max} = K_{g1} \cdot N^{3/2s-2/3} \cdot \sqrt{\frac{3\hbar^2\pi^2}{2m} \left(n - \frac{3}{4} \right) - 3\sqrt{3} \cdot \frac{\gamma \{(-1)^n - 1\}}{(\pi n)^2}} N^{s-2/3} \quad (46)$$

となる。図 4.1(c) の $W(0)$ は、電子がイオンの中心を通過して運動することはないので、 S は無限大にはならないが、濃度が増すと深くなっていくと考え、かつ、大約の見当をつける立場から、 $S=4/9$ のときを以下、考察する。 n 番目の不純物帯の最大状態密度は、 N の



第 4.2 図 $g_{i,\max}$ と N の概形



第 4.3 図 ΔE_a と N の概形

増大により、図 4.2 のごとく増大しながら [7], ついに、一定値

$$g_{i,\max} = K_{g1} \cdot \sqrt{\frac{3\hbar^2\pi^2}{2m} \left(n - \frac{3}{4} \right)} \quad (47)$$

に近づく。この帯の許容幅 (31) 式の最終項の N 依存性は、 N の増大により、

$$\begin{aligned} & -\sqrt{3} (|V_{n/l} + W_n| + |V_{(n-1)/l} + W_{n-1}|) \doteq -\sqrt{3} (|W_n| + |W_{n-1}|) \\ & \doteq -2\sqrt{3} |W_n| \doteq -2\sqrt{3} |a_{13}| \end{aligned} \quad (48)$$

となるため、

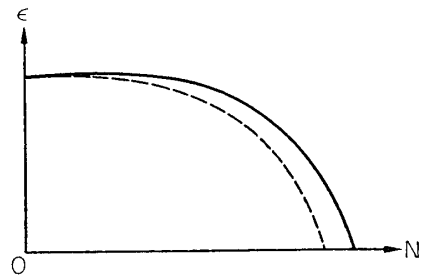
$$\Delta E_a = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} (2n-1) N^{2/3} - \frac{2\sqrt{3}\gamma}{(\pi n)^2} \{(-1)^n - 1\} |N^{4/9}| \quad (49)$$

となり、図 4.3 に N との概形を実線で示す。ここで N が少なければ、許容幅も小さく線状になる。母体結晶のポテンシャルにもよるが、不純物帯以外の 2 種の残りのバンド成分は不純物帯の N による変動は、より小さいことがわかったため、 C を定数とすると、活性化エネルギー ϵ は、 $\epsilon = C - \Delta E_a$ の形で、図 4.4 の実線のごとく、Penin らの事実も解釈でき

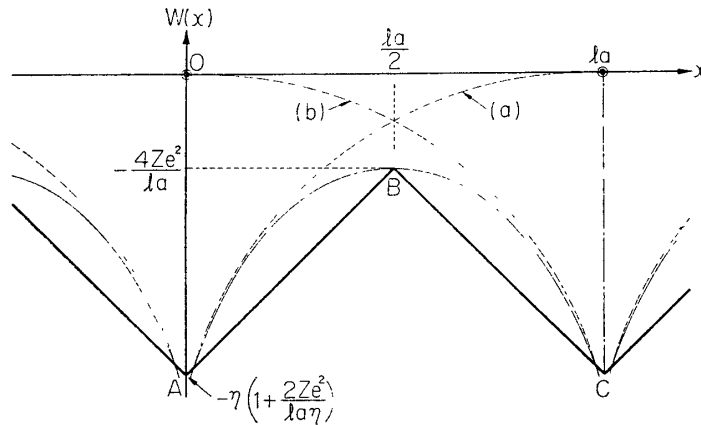
る。(49)式において、 N の変化に敏感なのは右辺第1項の運動エネルギーで、2項目のポテンシャルからの影響は少ないため、エネルギー許容幅は、ほぼ、 $N^{2/3}$ に比例すると考えてもよい。

5.2 最近接不純物イオン同士のポテンシャル分布の重なりがある場合

図5.1のごとき、不純物格子によるポテンシャル分布を考える。(a)の点線は $x=0$ の不純物原子が孤立した際のポテンシャル分布、 $-Ze^2/x$ であり、 e は電子電荷、 Ze は不純物イオンの有効正電荷である。しかし、結晶として考えたときには、 $x=la$ の位置にも同じ不純物イオン原子があり、これが孤立したときも同様に、そのポテンシャル分布は(b)の点線で示され、



第4.4図 εとNの概形



第5.1図 不純物格子のみによるポテンシャル分布

$Ze^2/(x-la)$ で与えられる。不純物イオンの存在する位置でのポテンシャルは無限大の深さとなるが、結晶内の電子は、この位置を通ること、すなわち、不純物原子の中心をつきぬけて運動することはないと考え、 $x=0$ でのポテンシャルを有限値 $W(0)=-\eta\{1+2Ze^2/(la\eta)\}$ とした。ここで、 $2Ze^2/(la)$ は、 la 点と $-la$ 点にある不純物イオン原子の影響によるポテンシャルの重なり成分である。 $la/2$ 点では、 $x=0$ と la 点の不純物イオン原子によるポテンシャルが重なり合い、その値は、 $W(la/2)=-4Ze^2/(la)$ となる。簡単のために、直線近似の不純物イオン・ポテンシャル分布 $W(x)$ を求めると、

$$W(x) = \pm \frac{2}{la} \left\{ \eta \left(1 + \frac{2Ze^2}{la\eta} \right) - \frac{4Ze^2}{la} \right\} x - \eta \left(1 + \frac{2Ze^2}{la\eta} \right) \quad (50)$$

で表示でき、それぞれ、 $0 \leq x \leq la/2$ 、 $-la/2 \leq x \leq 0$ で、正、負符号を適用する。 W_n は、前節と同様に、

$$W_n = 2 \left\{ 2\eta \left(1 + \frac{2Ze^2}{\eta} \cdot N^{1/3} \right) - 8Ze^2 N^{1/3} \right\} \cdot \left\{ (-1)^n - 1 \right\} / (2\pi n)^2 \quad (51)$$

となる。母体結晶のポテンシャルの最大の深さを、 $-\mu \left(1 + \frac{2Ze^2}{a\mu} \right)$ とすると、 V_n は、

$$V_n = 2 \left\{ 2\mu \left(1 + \frac{2Ze^2}{a\mu} \right) - \frac{8Ze^2}{a} \right\} \cdot \frac{\{(-1)^n - 1\}}{(2\pi n)^2} \quad (52)$$

となる。また、 $|a_{13}|$ の N 依存性は前節と同様、

$$|a_{13}| \doteq |W_n| = \frac{2|\{(-1)^n - 1\}}{(2\pi n)^2} N^{1/3} \cdot \left| \left\{ 2\eta \left(N^{-1/3} + \frac{2Ze^2}{\eta} \right) - 8Ze^2 \right\} \right| \quad (53)$$

となる。ここで更に N が増すと、

$$|a_{13}| \doteq \frac{2Ze^2}{(\pi n)^2} \cdot N^{1/3} \cdot |\{(-1)^n - 1\}| \quad (54)$$

となる。 $g_{i\max}$ は (40) 式より

$$g_{i\max} = K_{g2} \cdot N^{-1/6} \cdot \sqrt{\frac{3\hbar^2\pi^2}{2m} \left(n - \frac{3}{4} \right) - \frac{24\sqrt{3}Ze^2|\{(-1)^n - 1\}|}{(2\pi n)^2 \cdot N^{1/3}}} \quad (55)$$

で与えられ、ここで、

$$K_{g2} \doteq \frac{2\pi}{\hbar^2} \left[\frac{2\sqrt{3}m^2 \cdot 8Ze^2|\{(-1)^n - 1\}|}{\{\hbar\pi(n-1)\}^2 (2\pi n)^2} \right]^{3/2} \quad (56)$$

である。最大状態密度 $g_{i\max}$ は図 5.2 のごとく N に依存し、 $N = N_p$ においてピーク値 $g_{i\text{imp}}$ を示す。

すなわち、(55) 式から、

$$N_p = \left[\frac{8\sqrt{3}Ze^2|\{(-1)^n - 1\}|}{(\hbar\pi^2 n)^2 \left(n - \frac{3}{4} \right)} \right]^3 \quad (57)$$

$$g_{i\text{imp}} = \frac{K_{g2}}{2} \cdot \frac{3\hbar^2\pi^3 n \left(n - \frac{3}{4} \right)}{me \cdot [24\sqrt{3}|\{(-1)^n - 1\}| \cdot Z]^{1/2}} \quad (58)$$

を得る。 $N > N_p$ では、近似的に、

$$g_{i\max} \doteq N^{-1/6} \cdot K_{g2} \sqrt{3\hbar^2\pi^2 \left(n - \frac{3}{4} \right) / (2m)} \quad (59)$$

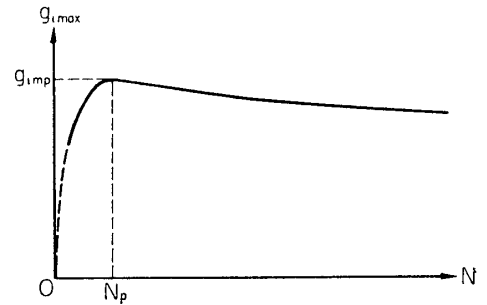
で見当もつと通り N の増大で減少するものの、非常にわずかであり、 N の範囲によっては、ほぼ一定とみなしてよい。不純物帯の許容幅は前節と同様に (31)、(48) と (54) 式を用いて、

$$\Delta E_a = \frac{(\hbar\pi)^2}{2m} \cdot (2n-1)N^{2/3} - \frac{16\sqrt{3}Ze^2|\{(-1)^n - 1\}|N^{1/3}}{(2\pi n)^2} \quad (60)$$

となり、 N との概形を図 4.3 に点線で示す。 N の変化に敏感にきく項は第 1 項であるため、前節と同様、 $N^{2/3}$ にほぼ比例し、したがって活性化エネルギーも図 4.4 の点線のごとく示される。

6. む す び

縮退前後の高不純物半導体の場合、普通、巨視的には、不純物分布はゆるい実効的周期性を持つと考えてもよいこと、すなわち、不純物結晶内のポテンシャル分布は、完全単結晶の周期 a の静電場と、不純物イオン格子によるゆるい周期 la のものとが重畳していると近



第 5.2 図 $g_{i\max}$ と N の概形

似し、この結晶内の電子状態の分布は、これらの重畳された周期で変調されていると仮定しても大過ないことがわかり、逆に、この“周期性の近似”を活用すると、“ほとんど自由な電子”の近似もつかえ、不純物帯の形成過程、特に状態密度の不純物濃度依存性について見通しのよい式を得ることができた。すなわち、

(1) エネルギー帯は、予想されることながら、母体結晶だけからなる帯、不純物格子だけからなる帯、不純物格子と母体結晶の両者が同時に影響している帯の3成分からなる。

(2) 不純物帯の不純物濃度 N 依存性が明らかとなった。不純物結晶内のポテンシャル分布を、最近接不純物イオン間のポテンシャルの重なりがあるときとないときの2種の場合について5章で扱ったが、直線近似等の仮定を導入したものの、いずれの場合も、不純物帯の最大状態密度は N の変化にあまり大きく左右されない(47)と(55)式のごとき場合が得られ、(37)式のように、その状態密度は電子のエネルギーの平方根で表わせることがわかった。

(3) 不純物帯の許容幅はそれぞれ、(49)と(60)式のごとく表わされ、ほぼ $N^{2/3}$ に比例すると考えてもよいこと、また、活性化エネルギーが減少するという Penin ら[3]の測定事実を定性的に説明できた。

以上の結果、ならびに、エサキダイオードの電流電圧特性への適用[7]から判断すると、これらは、まだ完全とはいえないにしろ、縮退前後の高不純物半導体では、むしろ不純物格子の実効的周期性を積極的に活用して、見通しのよい形で、理論的考察をすすめることができ、きわめて有効であるといえよう。不純物イオン格子によるポテンシャル分布などについての実際の適用に際し、 γ や ξ などの数値的決定は行なわなかったが、これらの定量的吟味に関しては、更に、検討を要する問題である。

謝 辞

常にご指導いただく高木 昇教授に感謝すると共に、研究室各位にお礼申し上げます。

付 録

A 1. (3) 式の三次元への拡張

三次元の電子の運動方程式は、解を Φ とすると、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \{V(x) + V(y) + V(z)\} \right] \Phi = (E_x + E_y + E_z) \Phi$$

で表示しうる。ここで、 Φ を、 x だけの関数、 y だけの関数、および、 z だけの関数、すなわち、それぞれを、 $\psi(x)$, $Y(y)$, $Z(z)$ とし、 Φ を、これらの積、

$$\Phi = \psi(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) \quad (\text{A 1.1})$$

とすると、運動方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) + V(x) &= E_x \\ \frac{1}{Y} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right) + V(y) &= E_y \end{aligned}$$

$$\frac{1}{Z} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \right) + V(z) = E_z$$

とわけられる。したがって、三次元の E は、

$$E = E_x + E_y + E_z \quad (\text{A 1. 2})$$

となる。

A 2. ほとんど自由な電子の近似による (4) 式の証明。

(3) 式に (2) 代入し、

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[-\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2 \cdot A_n \cdot e^{-i\left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)x} - \left(k - \frac{2\pi n}{la}\right)^2 \cdot B_n e^{-i\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)x} \right] \\ & + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \left\{ A_n e^{-i\left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)x} + B_n e^{-i\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)x} \right\} \right] \\ & = \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[A_n e^{-i\left(\frac{2\pi n}{a} - k\right)x} + B_n e^{-i\left(\frac{2\pi n}{la} - k\right)x} \right] \end{aligned} \quad (\text{A 2. 1})$$

となる。両辺に e^{-ikx} を掛けると、

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[-\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2 \cdot A_n \cdot e^{-\frac{2\pi inx}{a}} - \left(k - \frac{2\pi n}{la}\right)^2 \cdot B_n e^{-\frac{2\pi inx}{la}} \right] \\ & + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \left\{ A_n e^{-\frac{2\pi inx}{a}} + B_n e^{-\frac{2\pi inx}{la}} \right\} \right] \\ & = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot V(x) \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(A_n e^{-\frac{2\pi inx}{a}} + B_n e^{-\frac{2\pi inx}{la}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A 2. 2})$$

となるが、この右辺を簡単にするために、電子のエネルギー E にくらべて、ポテンシャル $V(x)$ の起伏が比較的小さいとき、すなわち、ほとんど自由な電子の場合には、波動関数の Fourier 展開部分は、常数に近く、 $A_0 + B_0 > A_n + B_n$ 、と考えられ、まして $V(x)$ と $n \neq 0$ の $(A_n + B_n)$ との積を省略しうるので、

$$\frac{2m}{\hbar^2} \cdot V(x) \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(A_n e^{-\frac{2\pi inx}{a}} + B_n e^{-\frac{2\pi inx}{la}} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \cdot (A_0 + B_0) \quad (\text{A 2. 3})$$

と近似できる。 $V(x)$ については (1) 式を代入し、両辺に $\exp\{2\pi inx/a\}$ を掛け、ゼロから la まで x で積分すると、関数の直交性を利用し、

$$-\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2 A_n + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot A_n = \frac{2m}{\hbar^2} (A_0 + B_0) \cdot V_n \quad (\text{A 2. 4})$$

となる。同様に、 $\exp\{2\pi inx/(la)\}$ を掛ける場合、

$$-\left(k - \frac{2\pi n}{la}\right)^2 B_n + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot B_n = \frac{2m}{\hbar^2} (A_0 + B_0) \cdot W_n \quad (\text{A 2. 5})$$

となる。ここで、 E は自由電子の場合の $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ とすると、(A 2. 4) 式と (A 2. 5) 式は、それぞれ、

$$A_n = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot V_n \cdot (A_0 + B_0) \left/ \left\{ k^2 - \left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2 \right\} \right. \quad (\text{A 2. 6})$$

$$B_n = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot W_n \cdot (A_0 + B_0) \left/ \left\{ k^2 - \left(k - \frac{2\pi n}{la}\right)^2 \right\} \right. \quad (\text{A 2. 7})$$

となる。(A 2.6) 式の k に関し, $k \approx n\pi/a$ のとき, しかも, $(\hbar^2/2m) \cdot \left\{ k^2 - \left(k - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 \right\} > V_n$ ならば, $A_n < (A_0 + B_0)$ となるため, (A 2.3) 式の近似は正しいが, $k \rightarrow (n\pi/a)$ になると, A_n は無限大となり, 波動関数に意味がなくなるので, 近似の出発点が成立しないことになる. この $k = n\pi/a$ の点は, 母体結晶格子のみによる Bragg 反射を示す点で, エネルギーが不連続になるはずである. したがって, A_n は A_0 に比し, 小さいとした近似は成立せず, このとき, A_n は小さくないと考えられる. したがって, (2) 式の Fourier 展開中の係数 A に関し, A_0 だけでなく A_n の項も残す必要がある. (A 2.7) 式の B_n についても同様である. $k \approx \pi n/(la)$ のとき, しかも, $(\hbar^2/2m) \cdot \left\{ k^2 - \left(k - \frac{2\pi n}{la} \right)^2 \right\} > W_n$ であるならば, $B_n < (A_0 + B_0)$ となり近似は正しいが, $k \rightarrow \pi n/(la)$ になると B_n は無限大になり意味がなくなる. この $k = \pi n/(la)$ なる点は, 不純物格子だけによる Bragg 反射を示す点で, そこで, エネルギーが不連続になるはずである. このことから, (2) 式の Fourier 展開中の係数 B に関し, B_0 だけでなく B_n の項も残す必要がある.

1968年2月5日 宇宙工学

参 考 文 献

- [1] Morgan.: Phys. Rev., **139** (1965), A 343.
 Kravchenko and Sardaryan.: Sov. Phys.-Solid State., **8** (1966), 1531.
 Cloizeaux.: Phys. Rev., **139** (1965), A 1531.
 Kane.: Phys. Rev., **131** (1963), 79.
- [2] Pankove.: Phys. Rev. Let., **4** (1960), 20.
- [3] Penin et al.: Sov. Phys.-Solid State, **7** (1966), 2580.
- [4] たとえば, Callaway.: Energy Band Theory., (§ 4.3) (1964), p. 240, Academic Press.
- [5] たとえば, Kittel.: Quantum Theory of Solids. (1963), p. 256, John Wiley and Sons.
- [6] 後川・薬品: 昭和 41 年度電気通信学会全国大会講演論文集, No. 538 (11 月, 1966).
- [7] 後川・薬品: 電子通信学会誌, Vol. **51-C**, No. 3, pp. 91-97, (3 月, 1968)
 後川・薬品: 昭和 41 年度電気四学会連合大会講演論文集, No. 1303 (4 月, 1966).
 後川・薬品: 電気学会トランジスタ専門委員会資料 (昭和 41 年 7 月 19 日).
- [8] たとえば, 青木昌治 (電気通信学会編)「電子物性工学」(コロナ社) (昭和 41 年 11 月), p. 244.