

## 質問コーナー

### 「物性なんでも Q&A」第 14 回

バンドギャップと物性  
佐藤勝昭 科学技術振興機構

このコーナーでは、小生のホームページの「物性なんでも Q&A」コーナーに寄せられた質問と回答の中から、結晶工学関係者にご関心のありそうなものをピックアップしてご紹介しています。ここでは第 14 回として、学生を中心に質問が多いバンドギャップに関する質問をご紹介します。

分類	番号	質問内容	所属
光物性	295	絶縁体のバンドギャップ	企業
物性物理	474	密度汎関数理論とバンドギャップ	大学院生
電子物性	479	電界によるバンド間励起は可能か	学部学生
光物性	497	バンド励起後の電子緩和	大学院生
光物性	551	バンドギャップの温度依存性	企業
電子物性	1209	バンドの広さと電気伝導度の関係	企業

#### 295. 絶縁体のバンドギャップ

Date: Sat, 6 Dec 2003 12:11:41 +0900

Q: T 社田畑です。半導体材質のバンドギャップはありますが、絶縁物であるアルミナセラミック、石英、ガラスのバンドギャップを知りたいのですがありませんでしょうか？

アルミナセラミック、石英、ガラス材質の違いによるバンドギャップ（ホウケイ酸ガラス、鉛ガラス等）

Date: Mon, 08 Dec 2003 00:33:53 +0900

A1: 田畑様、佐藤勝昭です。

セラミックスのデータベースのサイト (<http://www.lrsm.upenn.edu/~frenchrh/ceramics.htm>) および 材料データベースのサイト (<http://www.lrsm.upenn.edu/~frenchrh/materials.htm>) にバンド間遷移強度のスペクトルが載っています。これによるとサファイア( $\alpha\text{Al}_2\text{O}_3$ )単結晶の吸収は 8eV から始まっています。

$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  の詳細なスペクトルは

M. E. Innocenzi, R. T. Swimm, M. Bass, R. H. French, A. B. Villaverde, M. R. Kokta, "Room Temperature Optical Absorption in Undoped  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ", J. Appl. Phys. **67**, 7542-46 (1990). にあります。これによると弱い吸収は、もっと低いエネルギーから始まっています。セラミックスは、不純物による吸収や粒界による散乱があるので、もっと低いエネルギーで始まると思います。

先に紹介したサイト (<http://www.lrsm.upenn.edu/~frenchrh/materials.htm>) によると水晶( $\text{SiO}_2$ )の吸収は 4eV くらいから始まっています。しかし、半導体の何でも屋 (<http://www.semi1source.com/glossary/>) によると  $\text{SiO}_2$  (多分熔融石英)の吸収端は 8eV と書かれています。

また、コーニングのサイト (<http://www.corning.com/specialtymaterials/index.aspx>) によりますと、「 $\text{SiO}_2$  は結晶でもアモルファスでも 9eV 付近にバンドギャップがあるが、いろいろの不純物のために 185nm(6.7eV)より短波長は透過しない」と書かれています。

ガラスの吸収端は、ITME の光学ガラスのサイトによると

tantalum-niobium-lanthanum---300-350nm

zirconium-silicate ----280-300nm

alkaline boro-silicate ----250-280nm

PbO-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ----465nm

と書かれています。(吸収端は必ずしもバンドギャップではありません。)

Date: Mon, 8 Dec 2003 17:54:03 +0900

A2: 追伸、田畑様、佐藤勝昭です。

サファイア( $\alpha\text{Al}_2\text{O}_3$ )のバンドギャップについて古いデータですが、1435 Å(=8.64eV)というデータが

D.F.Heath and P.A.Sacher: Appl. Optics **5**, 5 (1966).にあります。また、A.H.Laufer et al.: J. Opt. Soc. Amer. **55** (1965)

61によれば、強い温度依存性があるようです。新しいデータとしては、Palikの Handbook of Optical Constants of Solids (vol.2) の p. 761 にあります。

Energy	n	k
10.0eV	2.519	0.629
9.0	2.338	0.108
8.0	2.074	0.032
7.0	1.939	0.007
6.0	1.834	-----

となっているので、band gap は 7eV 付近と考えられます。

SiO<sub>2</sub>については、Palikの Handbook of Optical Constants of Solids (vol.1) p.719 に α SiO<sub>2</sub>(水晶)の光学定数が、p.749 に SiO<sub>2</sub>(glass=熔融石英)の光学定数が載っています。

SiO<sub>2</sub>(Crystalline)

Energy	n	k
8.8eV	1.999	3.1x10 <sup>-3</sup>
8.7	1.971	1.0x10 <sup>-3</sup>
8.6	1.946	2.3x10 <sup>-4</sup>
8.5	1.922	3.5x10 <sup>-5</sup>
8.4	1.899	2.7x10 <sup>-6</sup>
8.3	1.844	-----

となっていますので、水晶のバンドギャップは 8.4eV としてよいでしょう。

SiO<sub>2</sub>(glass)

Energy	n	k
8.8eV	1.850	1.32x10 <sup>-2</sup>
8.7	1.825	1.09x10 <sup>-2</sup>
8.6	1.803	8.38x10 <sup>-3</sup>
8.5	1.783	5.57x10 <sup>-3</sup>
8.4	1.764	3.17x10 <sup>-3</sup>
8.3	1.747	1.40x10 <sup>-3</sup>
8.2	1.730	4.63x10 <sup>-4</sup>
8.1	1.716	1.22x10 <sup>-4</sup>
8.0	1.702	3.2x10 <sup>-5</sup>
7.8	1.676	4.7x10 <sup>-6</sup>
7.6	1.653	-----

となっているので、熔融石英のバンドギャップは 7.8eV となります。

絶縁物のバンドギャップのデータにはかなりのばらつきがあるようですから、実際にお使いになるものについて、独自に測定されますようお勧めします。

Date: Tue, 9 Dec 2003 22:35:48 +0900

Q2: 佐藤勝昭教授殿、田畑です。

先週から出張してしましてメールが見られませんでしたので連絡が遅くなって申し訳ありません。

早々にメールをもらいありがとうございました。勉強させていただきます。まだ詳しく見ていないのですが、メールからの第一印象としては、以下のように解釈しました。サファイア(αAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)単結晶は 7 から 8.64eV ですか?非常に大きな値ですね。サファイアもしくはアルミナを励起するには 180nm 以下の真空紫外光が必要なのですね。我々の装置では、酸素をメインにしてアルゴン、ヘリウム、N<sub>2</sub> ガスを用いた誘電体バリアー放電を行っていて、誘電体の励起現象について検討していますが、上記のような高いバンドギャップであれば、全く、誘電体の励起現象は無視できそうです。安心しました。

石英についても同様ですね。

tantalum-niobium-lanthanum---300-350nm→4.13~3.54eV

zirconium-silicate ----280-300nm→4.43~4.13eV

alkaline boro-silicate ----250-280nm→4.96~4.43eV

PbO-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ----465nm→2.67eV

上記の4つの絶縁物であれば、吸収波長が比較的長くて、酸素をメインにしてアルゴン、ヘリウム、N<sub>2</sub> ガ

スを用いた誘電体バリアー放電によって誘電体が励起される可能性がある」と解釈してよろしいのでしょうか？特に、 $\text{PbO-Bi}_2\text{O}_3\text{-Ga}_2\text{O}_3$  は 465 nm という可視光で励起されるのでしょうか？

ガラスでも添加物質によって光の吸収波長（物質の励起？）がずいぶん変わるのでですね。

光の吸収＝物質の励起と考えてよろしいのでしょうか？バンドギャップ以下の光波長を照射（吸収）した場合はバンドギャップのエネルギーは物質の励起に寄与し、余分の光エネルギーは熱として吸収されると解釈してもよろしいのでしょうか？（全く素人考えで申し訳ありませんが。。。。）

もう一つ教えてほしいのですが、酸素ガス、アルゴンガス、ヘリウム、窒素ガスが放電した場合の光の発光スペクトルが分かるデータシートもしくはハンドブックがあれば教えて下さい。

-----  
Date: Wed, 10 Dec 2003 00:57:27 +0900

A2: 田畑様、佐藤勝昭です。

「上記の4つの絶縁物であれば、吸収波長が比較的長くて、酸素をメインにしてアルゴン、ヘリウム、 $\text{N}_2$  ガスを用いた誘電体バリアー放電によって誘電体が励起される可能性がある」と解釈してよろしいのでしょうか？」というご質問ですが、記載されている4つのガラスの吸収端がバンドギャップを超える吸収であるのか、局在した状態における遷移なのかわかりません。もし局在遷移なら、励起はされますが弱いでしょう。

「光の吸収＝物質の励起と考えてよろしいのでしょうか？バンドギャップ以下の光波長を照射（吸収）した場合はバンドギャップのエネルギーは物質の励起に寄与し、余分の光エネルギーは熱として吸収されると解釈してもよろしいのでしょうか？（全く素人考えで申し訳ありませんが）」というご質問ですが、光子エネルギーを  $h\nu$ 、バンドギャップを  $E_g$  とすると、 $\Delta E = h\nu - E_g$  のエネルギー差は結局格子振動の形で物質にトランスファーされ、最後は熱になります。

「酸素ガス、アルゴンガス、ヘリウム、窒素ガスが放電した場合の光の発光スペクトルが分かるデータシートもしくはハンドブックがあれば教えて下さい。」ということですが、気体のスペクトル線については、理科年表に Ar, Cd, K, Xe, Kr, Hg, H, Na, Ne, He のデータが出ています。Google で gas discharge spectrum として検索したら、<http://home.achilles.net/~jtalbot/data/elements/> というサイトが出てきました。大変便利なサイトです。訪れてみて下さい。

#### 474. 密度汎関数理論とバンドギャップ

Date: Fri, 19 Nov 2004 09:33:37 +0900

Q: 佐藤勝昭様

突然のメール、失礼します。T大学の修士2年のNと申します。よろしくお願い致します。質問は、密度汎関数理論についてです。

密度汎関数理論において、交換相関汎関数に LDA や GGA を適用すると、半導体のバンドギャップが過小評価されてしまう理由をご教示願えますでしょうか？密度汎関数理論は基底状態の理論ですので、励起状態の情報を含むバンドギャップが正確に出ないというのは納得できるのですが、常に「過小評価」になるのは、別の理由があるような気がします。いくつか文献に当たったのですが、この理由について触れてあるものは見当たりませんでした。

ご多忙のところ恐縮ですが、よろしくお願い申し上げます。

-----  
Date: Sun, 21 Nov 2004 01:50:46 +0900

A: N君、佐藤勝昭です。

私は、理論家ではありませんから、正確なお答えができるかどうか心配ですが、実験屋的な感覚で定性的にお答えしたいと存じます。

一般に、LDA(局所密度近似)による1電子バンド計算ではバンドギャップを正確に見積もることができません。たとえば、GaNのバンドギャップの実験値は3.4eVですが、LDAでは1.81eVという小さな値をとります。InNに到ってはマイナスのギャップになります。

これを救うためにLDA計算結果に対しGWA(グリーン関数Gと動的遮蔽を受けた相互作用Wを用いた近似)にもとづく多体の自己エネルギー補正が行われます。GWAの補正では、閉殻のすべての電子と価電子帯を構成する電子の交換・相関エネルギーを考慮しています。すなわち、閉殻まで含めた多電子系のエネルギー準位を考えた補正を行うのです。

東理大の浜田典昭先生のグループでは、LDA-GWAによってGaNのバンドギャップを計算し、3.16eVという実験値に近い値を報告しています。

このことから、LDAで計算すると波動関数の広がりが大きいため、閉殻のポテンシャルを遮蔽して小さなバンドギャップを与えるが、多電子の効果を入れると波動関数は局在して、ポテンシャルは遮蔽を受けにくくなって、バンドギャップが広がるという解釈ができそうです。

(しかし、InNについてはGWA補正によってもギャップは0.02eVにしかならず、最近の実験結果である

0.7-0.8eV を説明できていません。従って、GWA に加え、さらなる補正が必要であるようです。

Date: Mon, 22 Nov 2004 09:22:05 +0900 (JST)

AA: 佐藤勝昭様、T 大の N です。迅速で分かりやすいお返事を頂き、恐縮です。自分なりに定性的に理解できました。これからも一読者として物性なんでも Q & A を興味深く拝見させていただきたいと思います。ありがとうございました。

#### 479. 電界によるバンド間励起は可能か

Date: Wed, 24 Nov 2004 17:28:32 +0900

Q: はじめまして。T 大学二年の O というものです。

日頃、非常に興味深く拝見させていただいております。  
早速質問なのですが、半導体等でエネルギーギャップを超える（励起する）にはエネルギーを与える必要がありますよね？そのエネルギーの供給の仕方に、熱や光があるのは分かりますが、電界よっての励起はないのでしょうか。（また励起させるエネルギーの形態はほかにないのでしょうか？）

例えば、Ge なら  $E_g$  が 0.66eV なので、かなり大きな電圧をかければ  $E_g$  を超えられるのでは？などと考えてしまいます。

まだ、半導体の勉強を始めて間もないので、拙い質問かも知れませんがよろしかったら教えていただきたいです。

Date: Wed, 24 Nov 2004 18:22:22 +0900

A: O 君、佐藤勝昭です。

電子にエネルギーを与えてバンドギャップを超えることが出来るかというご質問ですが、電界で電子にエネルギーを与えるにはどうすればよいのでしょうか？

たとえば  $1\mu\text{m}$  の厚みの Ge の裏表に 10V の電位差を与えたとしましょう。すると、Ge には  $E=10^5[\text{V}/\text{cm}]$  の電界がかかります。Ge の価電子帯の電子が励起されるのですから、価電子帯の移動度  $\mu=1800[\text{cm}^2/\text{Vs}]$  を用いると、電子は  $v=\mu E=1.8\times 10^8[\text{cm}/\text{s}]$  に加速されます。（ $1.8\times 10^8[\text{cm}/\text{s}]$  というのは電子のフェルミ速度を遙かに超えていて、いわゆるホットエレクトロン状態になっています。）

この電子の運動エネルギー  $K$  は、 $K=(1/2)m^*v^2$  ですが、 $m^*=0.34m_0$  として、  
 $K=0.5\times 0.34\times 9.1\times 1.8^2\times 10^{-19}=2.23\times 10^{-19}[\text{J}]=1.39[\text{eV}]$   
となり、 $K>E_g=0.66[\text{eV}]$  なので十分励起出来ることとなります。

しかし、このときの電流密度  $J$  は、キャリア密度を  $10^{16}[\text{cm}^{-3}]$  として、  
 $J=\sigma E=n\mu E=nev=10^{16}\times 1.6\times 10^{-19}\times 1.8\times 10^8=2.88\times 10^5[\text{A}/\text{cm}^2]$

単位体積あたりの消費電力は  $p=2.88\times 10^{10}[\text{W}/\text{cm}^3]$  となり、もし、厚み  $1\mu\text{m}$ 、断面積を  $1\text{cm}^2$  とすると、全消費電力は  $P=p\times 10^{-4}=2.88\times 10^6[\text{W}]$  となり、Ge は融解してしまうでしょう。キャリア密度  $10^{13}[\text{cm}^{-3}]$  程度の半絶縁性 Ge を使ったとしても 2.88kW の消費電力となり、破壊されるでしょう。

ここに述べたのは一例ですが、半導体の電子を加速してバンドギャップを超えさせるのはかなりむずかしいことがおわかりいただけたでしょうか。

しかし、pn 接合を作れば少数キャリアの注入という形で簡単に伝導帯に電子を励起出来るのです。このことがなければ、半導体にわずかな電圧を加えて発光する素子は出来なかったでしょう。

Date: Wed, 24 Nov 2004 18:55:47 +0900

AA: 納得のいく説明、本当にありがとうございました。  
これからはホームページを参考にさせていただきます。

#### 497. バンド励起後の電子緩和

Date: Wed, 22 Dec 2004 23:49:09 +0900 (JST)

Q: 佐藤教授 殿

HP をいつも楽しく拝見させております、大阪市立大学大学院の修士 2 回生の N と申します。半導体のバンド間遷移後の電子緩和メカニズムに関してお伺いしたいことがあり、メールいたしました。

一般に、半導体バンド間遷移において、バンドギャップよりも高エネルギーで励起された電子は、フォノン緩和によりバンド端付近まで緩和した後、フォトンを出し、価電子帯に緩和します（長波長近似のもとで）。これは、理解できるのですが、バンド間遷移において、フォノン緩和ということは、考えられるのでしょうか？

バンド内遷移では、電子のフォノンによる緩和がサブピコ秒で起きることは、文献等で理解できるのですが、バンド間遷移ではフォノン緩和は起きないのでしょうか？フォノンのエネルギーはエネルギーギャップ

よりも十分小さいと考えられますが、多重フォノン放出により緩和が可能かどうか教えてもらえないでしょうか？もし、フォノンによる緩和が可能なのであれば、バンド間遷移において、なぜ強いフォトルミネッセンスが観測されるのかわからないのですが、ご返答のほどよろしくお願いいたします。

Date: Thu, 23 Dec 2004 01:18:40 +0900

A: N君、佐藤勝昭です。

GaAsのような直接吸収端におけるバンド間遷移は、純粋に電子的な遷移です。シリコンのような間接吸収端では、運動量保存則を満たすためフォノンが関与します。この場合は光学遷移にともなってフォノンが吸収又は放出されます。GaAsにおける不純物や欠陥の関与する遷移では多重フォノン遷移をともない非発光になることがあります。

Date: Thu, 23 Dec 2004 02:51:29 +0900

Q2: ご返信ありがとうございます。

「GaAsのような直接吸収端におけるバンド間遷移は、純粋に電子的な遷移です。」→直接型半導体の場合、フォノンを放出しなくてもバンド間遷移が起きえるということですが、波数が0に近いフォノンは存在しないのでしょうか？フレリッヒ相互作用によれば、電子とフォノンの相互作用は波数が小さい領域で強くなると考えられるのですが、それを考慮しても、フォトン放出による電子緩和時間は、フォノン放出による電子緩和時間よりも速いということでしょうか？

Date: Thu, 23 Dec 2004 13:44:26 +0900

A2: N君、佐藤勝昭です。

半導体中の局在した状態（欠陥準位や不純物準位）における局在遷移の場合では、配位座標モデルが適用できます。つまり、電子エネルギーは座標位置によって変化します。添付図(山田・佐藤他著：機能材料のための量子工学 p185)にありますように、基底状態および励起状態のエネルギーは配位座標に依存します。左図のように基底状態の極小位置と励起状態の極小位置が異なるので、励起後、フォノンを放出して励起状態の極小位置2に到達し、発光(電子遷移)して基底状態の2'に落ち、さらにフォノンを放出して基底状態1に戻ります。発光の緩和時間は、それが許容遷移であれば、フォノンによる緩和時間より桁違いに短いと考えられます。一方、右図のように2つの曲線が交わる時、すべてフォノン放出して遷移し全く発光せず緩和します。

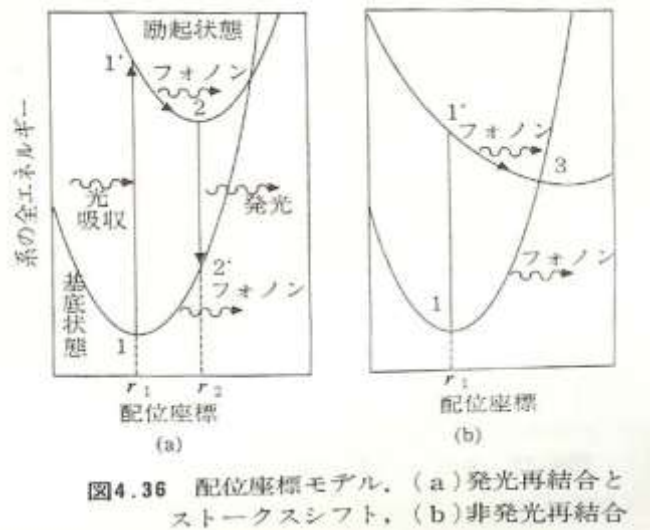


図4.36 配位座標モデル。(a)発光再結合とストークスシフト。(b)非発光再結合

一方、量子ドットにおいては、フォノンが局在し、これと量子井戸に閉じ込められたバンド電子や局在した励起子が強くフレリッヒ結合して、多重フォノン遷移が起きる可能性があります。

これに対して、普通のバンド状態の電子は結晶全体に広がっているため、位置によるポテンシャルの変動は、平均値としてしか感じません。従って配位座標モデルは適用できません。従って、フォノンによる緩和は考える必要がないでしょう。

Date: Thu, 23 Dec 2004 14:17:52 +0900

AA: お忙しい中、早速なご返信ありがとうございました。

### 551. バンドギャップの温度依存性

Date: Thu, 21 Apr 2005 13:14:13 +0900

Q: 佐藤勝昭様

はじめまして、突然のメールで失礼します。N社Tと申します。日々、「物性なんでもQ&A」を拝見させていただいております。先生が大学の講義でご用意されている資料などもあわせて勉強させていただいております。

質問をさせていただいたことがあります。私どもはII-VI族半導体のなかで、温度変化によりバンドギャップ幅が変化するものに着目して機能材料の研究を行っております。恥ずかしながら、そもそもどうしてバンド幅が温度変化を起こすのかが理解できずにいます。その点についてお教え願えませんでしょうか？また、吸収端は温度上昇と共に長波長側にシフト(レッドシフト)を起こすのが一般的なのでしょうか？

一応、以下の文献に説明がされているようですが理解ができません。

K. P. O'Donnell and X. Chen, Appl. Phys. Lett., **58**, 2924(1991) なにとぞ、よろしくお願いします。

Date: Thu, 21 Apr 2005 20:23:24 +0900

A:T 様、佐藤勝昭です。

バンドギャップ付近に励起子遷移があるかないかで話が違ってきます。まずは、励起子（エキシトン）が関与しない場合を述べます。バンドギャップは、電子に対するポテンシャルを波数  $k$  についてフーリエ展開したときの何次かのフーリエ係数で与えられます。一方、電子が感じるポテンシャルは、格子の周期をもつ周期関数です。J. Pankove: Optical Processes in Semiconductors, Dover, New York, 1971 p.27 によると、原子はその平衡点の付近で振動をしていますが、温度上昇にともなってその振幅も増加します。その結果、電子同士の重なりが増え、許容帯幅が広がるため、結果的に禁制帯幅（バンドギャップ）が小さくなるのです。バンドギャップの温度変化は、デバイ温度(格子振動の平均エネルギーに相当する温度)より十分低い温度では、温度の二乗で変化しますが、デバイ温度より十分高い温度では温度の1次関数となります。この様子を表した経験式がご照会の論文の式(1)です。

しかし、実際には、低温では二乗にならずほぼ一定値をとります。これは、温度上昇に伴い格子間隔が広がると電子の重なりが減り、許容帯幅が狭くなり、この結果ギャップは増加するので、相殺するのです。温度が上昇すると格子間隔が膨張する効果を取り入れたのが式(2)で、この式を使った方が、実験をよく説明できるのです。式(2)にはさらに電子格子相互作用が温度依存性を持つことも考慮されています。

次に、励起子がみられる場合を考えましょう。このときは、励起子遷移のピークの裾が温度変化をします。この裾の様子を記述するのがアーバックの法則です。励起子のピーク位置はバンドギャップより束縛エネルギーだけ低いのですが、その位置から指数関数的に裾を引いていて、温度上昇によって裾が広がります。これによってバンドギャップが見かけ上小さくなる効果があります。

Date: Mon, 25 Apr 2005 09:39:53 +0900

AA: 佐藤教授、T です。

早速のご連絡ありがとうございます。まだ、とても全部わかったわけではないのですが、さしあたり、「温度上昇と共に格子振動が増え、電子の重なりが増すことで、許容帯幅が増し、ギャップが狭くなる」点は、なんとなく理解しました。先生のお話ですと、基本的には温度上昇と共にレッドシフトを起こすのが一般的と考えて間違いなさそうですね。引き続き、自分でもご紹介の書物などを読んで行きたいと思います。今回はありがとうございます。先生の HP をいつも楽しみにしております。これからもよろしくお願いします。

### 1209. バンドの広さと電気伝導度の関係

Date : Mon, 28 Jun 2010 06:36:57 +0900

Q: 佐藤勝昭先生

お世話になります。S\*社のG\*\*と申します。2008.07.29に質問させていただいたときは大変丁寧な説明ありがとうございました。最近、その質問も収録された先生の御本「半導体物性なんでもQ&A」が発行されたというので購入させていただきました。

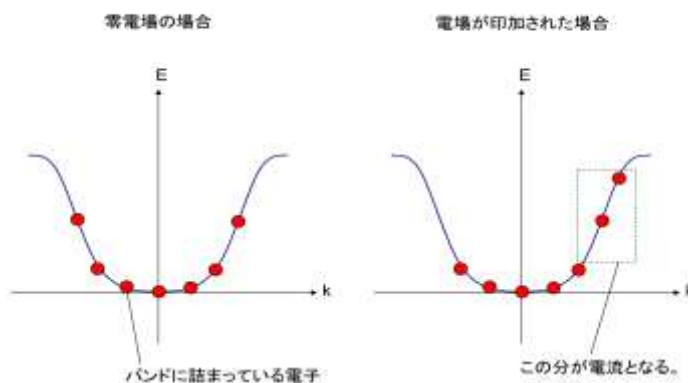
さて早速質問なのですが、金属において（と制限付きでなくてもいいのかもしれませんが、）バンド幅が広いとなぜ電気伝導がよくなるのでしょうか？

バンド幅はそれぞれの原子が持つ軌道同士が近いとエネルギー軸に対して上下に広がるイメージを私は持っています。そういうイメージで考えると電気伝導がよくなるのもうなずけます。

しかし、私は純粋にバンド構造から理解したいと思っています。

以前どこかで、図を使って説明を受けたことがありました。メールに添付しましたので、御覧いただけると幸いです。

$k=0$ の軸に対して対称なバンド構造を持つ物質において、電場をかけていない場合は左右対称に電子が存在し全体として電気が流れていないが、電場をかけると電子の詰まる位置が非対称になり電気が流れる（例えば、右に進もうとする電子が左に進もうとする電子より多くなり全体として電気が流れる）というような説明でした。



この説明自体は納得できた記憶があるのですが、バンド幅と電気伝導の関係もこの図で説明できるのか私には分かりません。

もう一つ、これに関する事で疑問があります。バンド幅が大きいモデルと小さいモデルがあるとして、等しい大きさの電場をそれぞれに印加した場合、2つのモデルにおける電子の詰まる位置の変位は、次のどれになるのでしょうか？

1.  $k$  軸変位が等しい
2. エネルギー軸変位が等しい
3. その他

できれば、図を使って説明していただけるとありがたいです。  
お忙しいところ申し訳ありませんがご回答宜しくお願いいたします。

-----  
Date : Mon, 28 Jun 2010 10:07:24 +0900

A: G様、佐藤勝昭です。

メールありがとうございます。拙著をご購入賜りありがとうございます。G様の書かれた図について、電子が電界によって  $k$  空間でシフトする様子のご理解は、正しいと思います。

さて、バンド幅と電気伝導のよさの関係ですが、あまり難しく考える必要はないと存じます。

伝導帯の底はパラボリックになっていると考えますと、

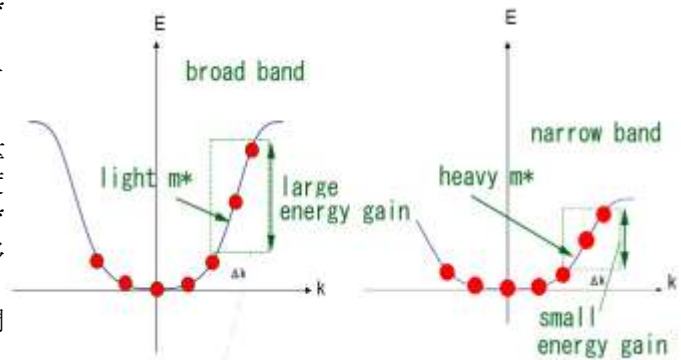
$$E = (1/2 m^*) (\hbar k)^2$$

と表されます。ここに  $E$  は電子のエネルギー、 $m^*$  は有効質量、 $\hbar$  は  $h$  bar、 $k$  は波数を表します。

狭いバンドでは、 $E-k$  曲線の縦方向がつまっているので、パラボラの係数  $(1/m^*)$  が小さいのです。

従って有効質量  $m^*$  が大きいのです。(有効質量は、 $E-k$  曲線の曲率の逆数に比例します。) 移動度  $\mu$  は電荷  $e$  と散乱の緩和時間  $\tau$  を用いて、 $\mu = e\tau/m^*$  と表されますから、 $m^*$  の大きな狭いバンドでは移動度が低いのです。

電界  $F$  を印加したときの変化は、あなたの質問の(2)  $k$  に現れます。  $\Delta \hbar k = F\tau$  です。図に示すように狭いバンドでは  $k$  が変化してもエネルギー  $E$  が変化できません。だから電気伝導が悪いということもできます。



-----  
Date: Tue, 29 Jun 2010 23:44:45 +0900

AA: 佐藤勝昭先生、Gです。

お返事下さいましてありがとうございました。有効質量の辺りを勉強してバンド構造と伝導度の理解を深めたいと思います。ありがとうございました。-

-----  
連絡先: 独立行政法人 科学技術振興機構(JST) イノベーション推進本部  
〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's ビル 5F  
e-mail: katsuaki.sato@nifty.com  
(2011年 11月 22日)