目次

半導体の記述

外殻電子:座標R_j、質量M_j、個数M
価電子　:座標r_i 、質量m_0、個数N
Z_j:イオン核jの有効電荷

- ある系でのハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{j=1}^{M}\frac{1}{M_j}\Delta_{R_j} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{i=1}^{N}\Delta_{r_i}$$

$$+\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\times\left(\sum_{j>j'}\frac{e^2 Z_j Z_{j'}}{\left|R_j - R_{j'}\right|}+\sum_{i>i'}\frac{e^2}{\left|r_i - r_i'\right|}+\sum_{i,j}\frac{e^2 Z_j}{\left|R_j - r_j\right|}\right)$$

半導体の記述

- ハミルトニアンを解く波動関数はすべての座標R_j ,r_iに依存

$$H\phi\left(r_i, R_j\right) = E\phi(r_i, R_j)$$

- j: $1 \rightarrow M$、i: $1 \rightarrow N$、M, Nは10^{23}のオーダー
→解くのは現実的でない

断熱近似/Born-Oppenhimer近似

A_j:質量数
β:力定数

- イオン核の質量は電子の質量より十分重い

$$M_j \simeq 1836 \cdot A_j m_0$$

→イオン核の共鳴周波数は電子の共鳴周波数より十分小さい

$$\Omega \simeq \left(\beta M_j^{-1}\right)^{\frac{1}{2}} \ll \omega \simeq (\beta m_0^{-1})^{\frac{1}{2}}$$

→波動関数の変数分離が可能

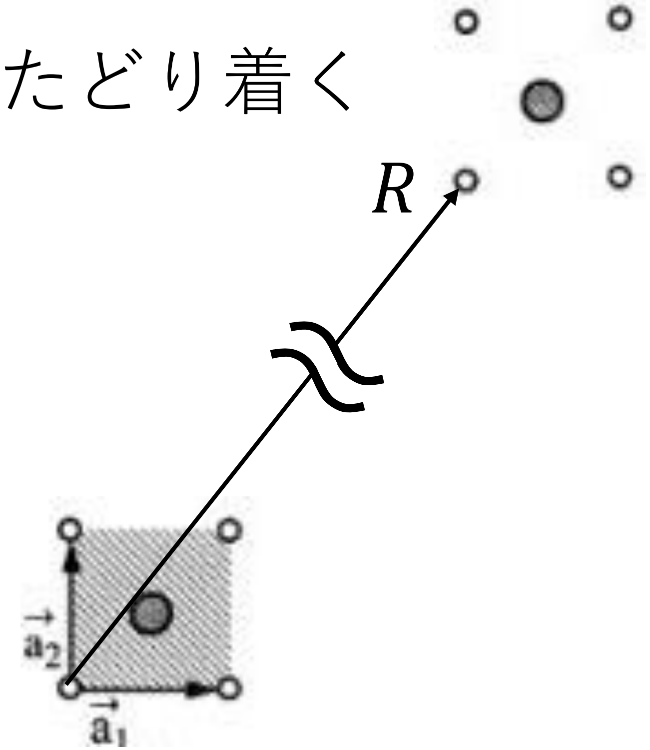
$$\phi\left(r_i, R_j\right) = \phi(r_i)\phi(R_j)$$

実空間における格子

- 結晶は空間的な周期性を持つ

→あるベクトルRだけ移動した時、同一の原子にたどり着く

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$



- 並進ベクトルa_iは平行六面体を定義する

→単位格子

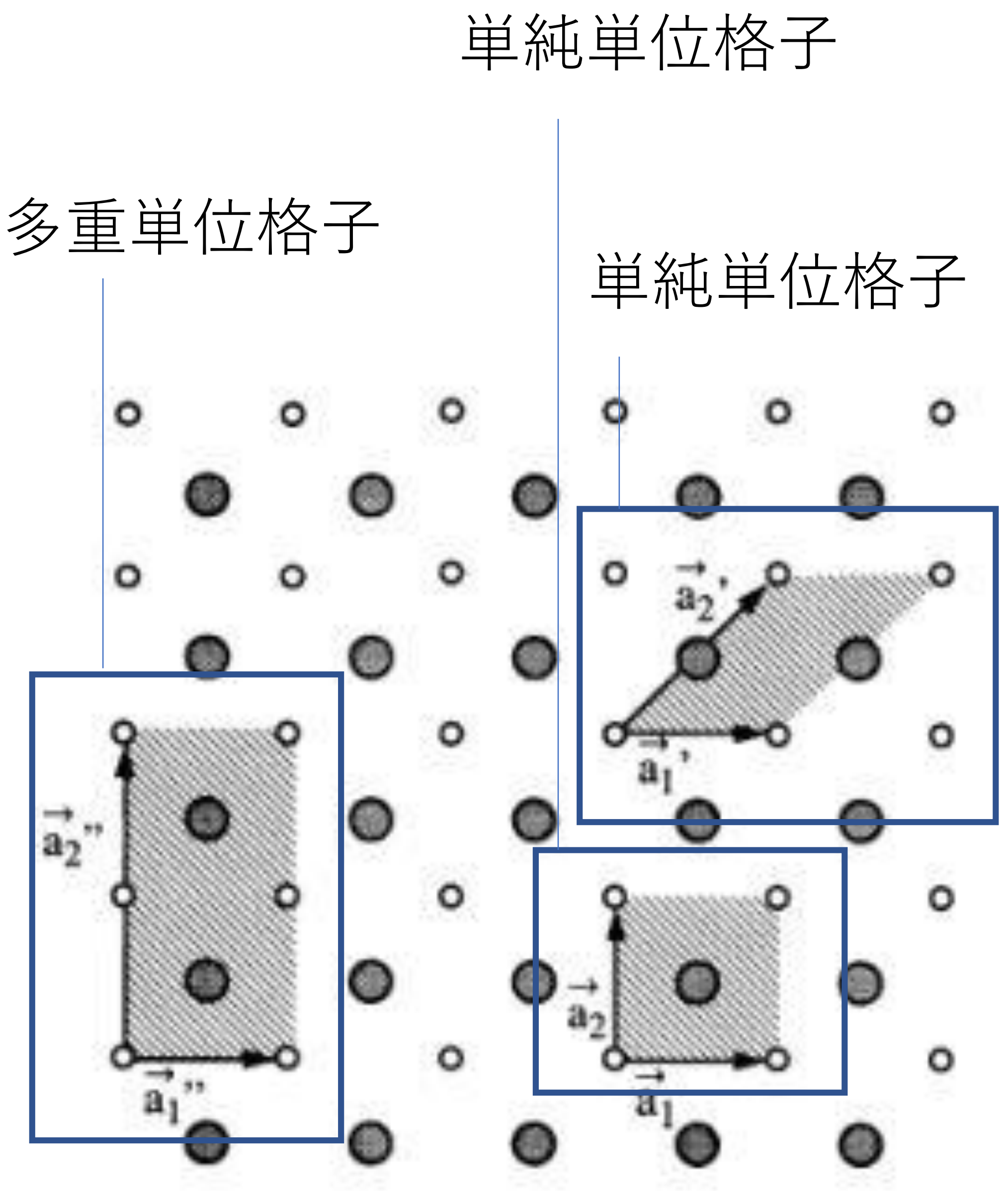
実空間における格子

- 結晶構造の記述に必要なものは
  単純単位格子+基底

  基底→14種類のブラベ格子
  格子→32種類の点群

  +並進、らせん、映進操作

  →230の空間群



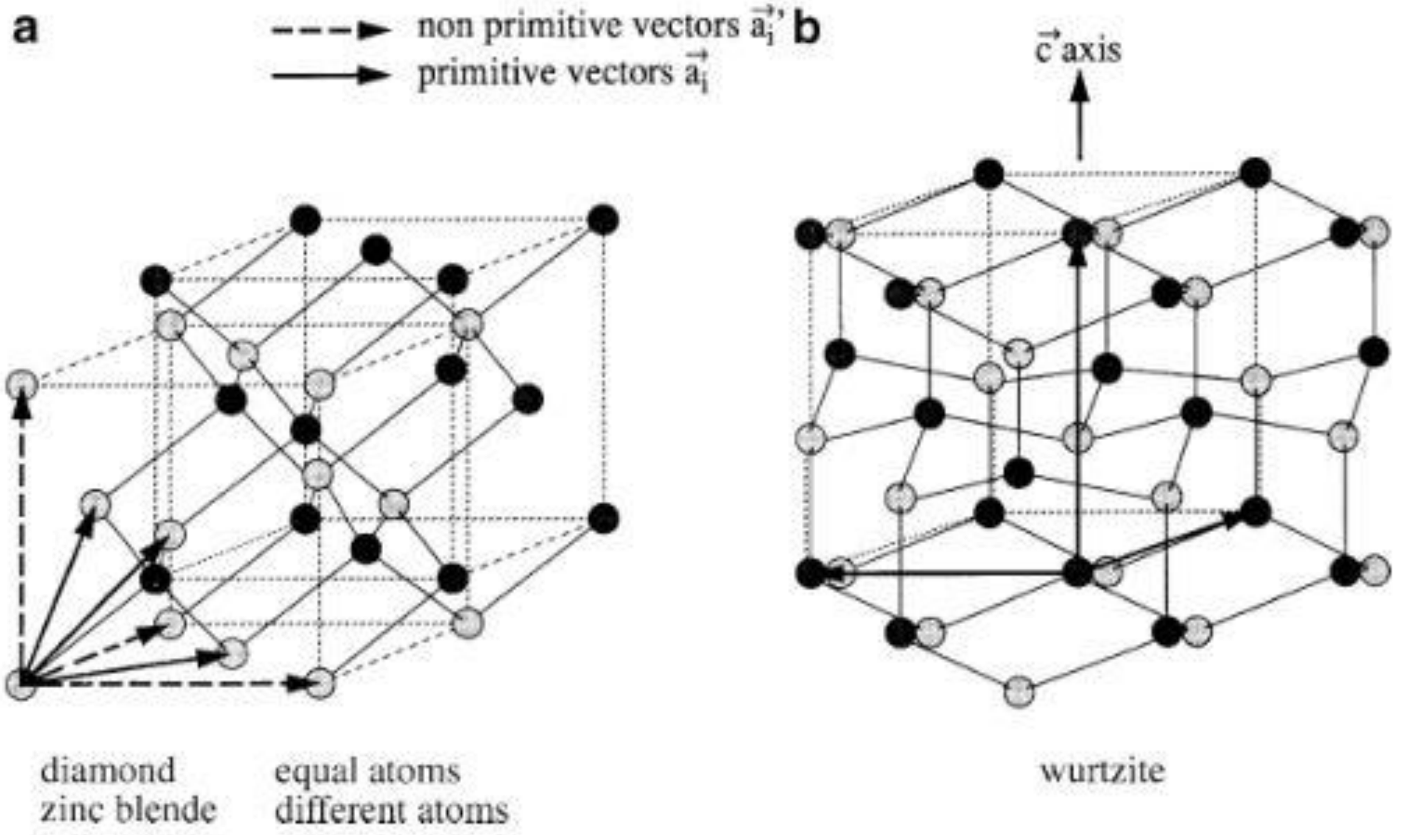
結晶構造

- 半導体で重要な点群は3つ
  - O_h:ダイヤモンド型
  - T_d :閃亜鉛鉱型

  →2つのfcc格子からなる
  原子が同種か異種かが違う

  - C_{6V} :ウルツ鉱型

  →c軸を持つ六法晶系



逆空間における格子

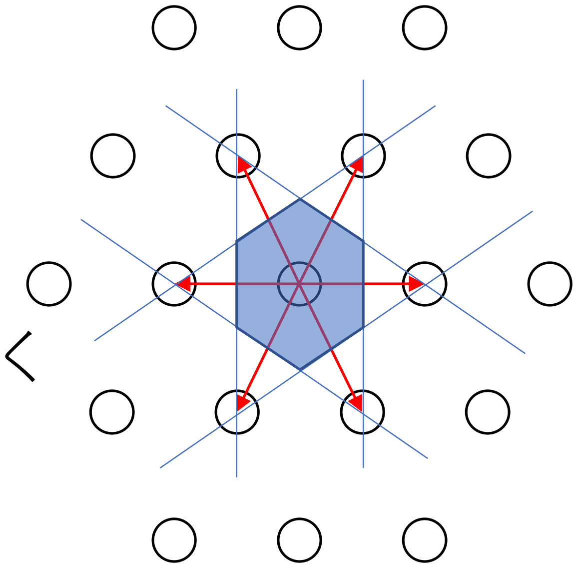
- 逆格子空間の定義

基本並進ベクトル: $b_1 = \frac{2\pi}{V_{uc}} a_2 a_3$
一般並進ベクトル: $G = n_1 b_1 + n_2 b_2 + n_3 b_3$

- これらは実空間における周期性$f(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}) = f(r)$のフーリエ展開から導かれる

- 周期性は実空間でも逆空間でも記述できる
→逆空間は波数ベクトル$\boldsymbol{k}$や運動量$\hbar \boldsymbol{k}$での記述に適している

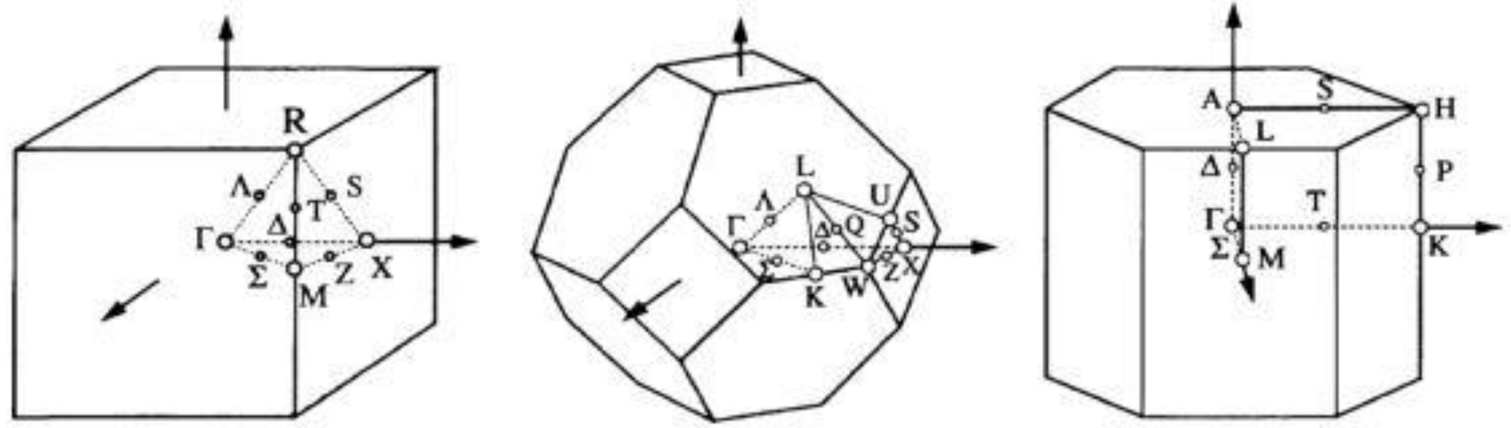
逆空間における格子



- 第1ブリルアンゾーン
  - ある逆格子点から、最近接している逆格子点へ線を引く
    その線を2等分する面で囲まれた領域

  - 第2,3...BZは、Gベクトルによって第1BZに移動できる
  →第1BZのみを考えればよい

a 単純立方格子　**b** O_h, T_d　**c** $\vec{c}$　C_{6V}　の第1BZ

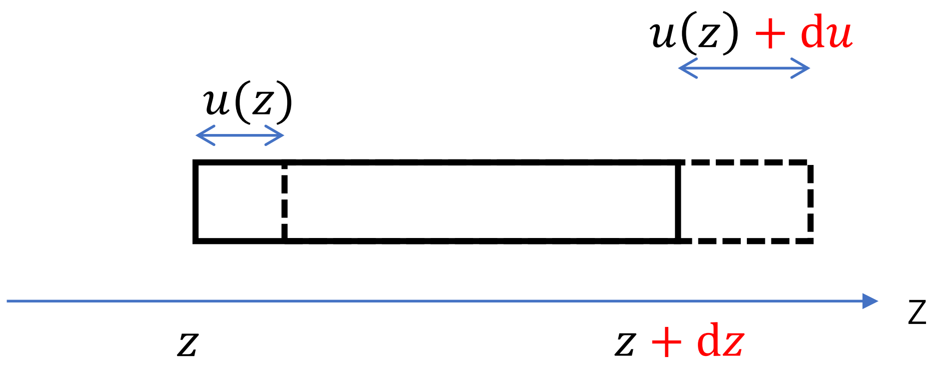


準1次元ひも

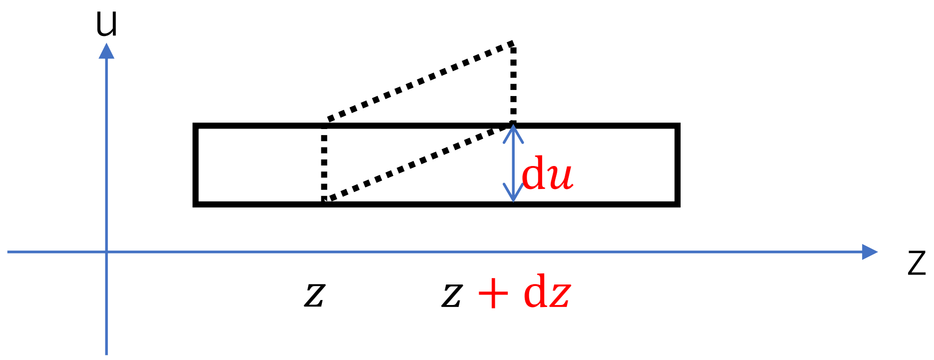
- 無限小片**dz**のひもにそって縦波と横波が伝搬する

$$u = u_0 \exp[i(\boldsymbol{k}z - \omega t)]$$

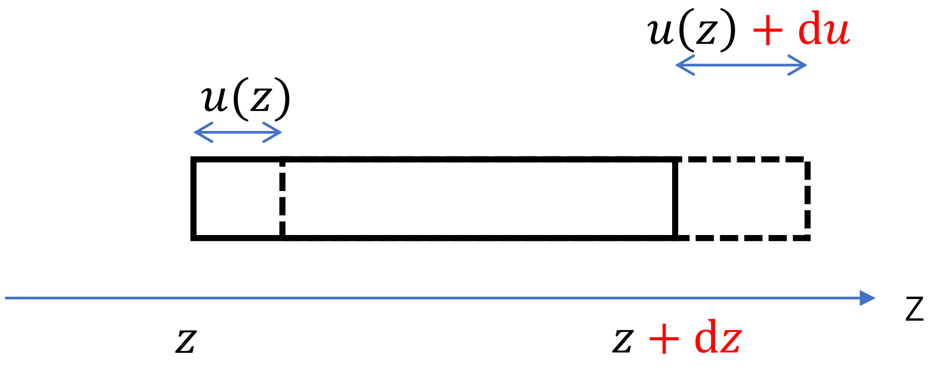
縦波:z方向



横波:x-y平面



準1次元ひも



- 縦波:z方向,弾性率

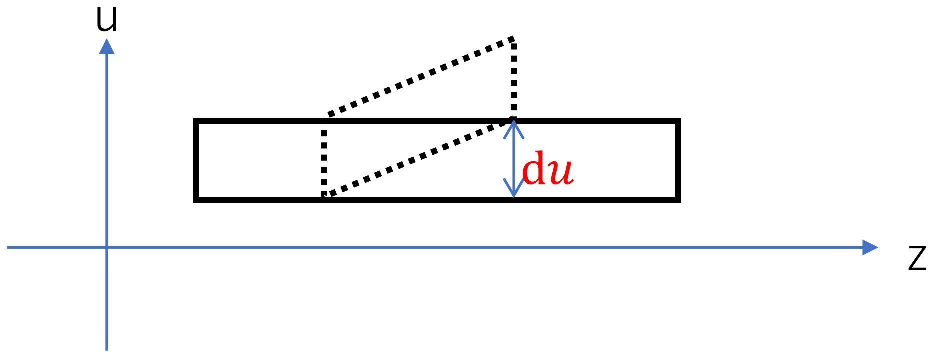
$$\mathrm{d}m\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \rho A \cdot \mathrm{dz} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = F$$

$$F = A \cdot E \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

→縦波の分散関係

$$\omega_L = \left(\frac{E}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} k$$

準1次元ひも



- 横波:x-y平面,剛性率

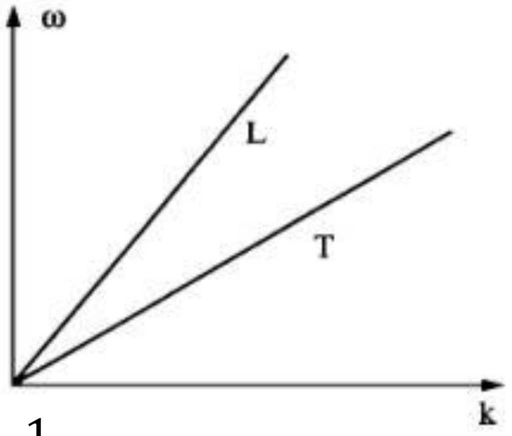
$$\mathrm{d}m\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \rho A \cdot \mathrm{d}z \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = F, F = A \cdot G\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

→縦波の分散関係

$$\omega_T = \left(\frac{G}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} k$$

準1次元ひも

- 位相速度、群速度



$$\omega_L = \left(\frac{E}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} k$$

$$\omega_T = \left(\frac{G}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} k$$

$$v_{\mathrm{ph}}^{L} = v_{\mathrm{g}}^{L} = \left(\frac{E}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$v_{\mathrm{ph}}^{T} = v_{\mathrm{g}}^{T} = \left(\frac{G}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}$$

→$G \leq E$より

$$v_{\mathrm{ph}}^{T} \leq v_{\mathrm{ph}}^{L}$$