

1 金属の電気抵抗率の温度依存性

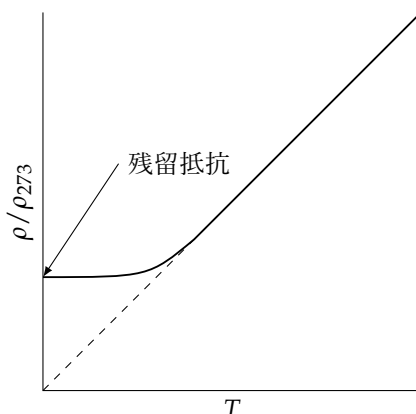


Fig. 1: 金属の電気抵抗率の温度依存性

2 Matthiessen の規則

金属の電気抵抗率が、温度に依存しない定数(残留抵抗)と、温度に依存する関数の和によって表されるという規則。式で表すと

$$\rho(T) = \rho_R + \rho_L(T)$$

である。ただし、 ρ_R は残留抵抗で、

$$\rho_L(T) = \begin{cases} \alpha \cdot T & T > \theta_D \text{ のとき} \\ \alpha' \cdot T^5 & T \ll \theta_D \text{ のとき} \end{cases}$$

である。ここで、 θ_D はデバイ温度である。

3 波束

運動量 $\hbar k$ とエネルギー $\hbar \omega$ が決まっている電子の波動性は $e^{i(kx - \omega t)}$ と表されるが、このとき、不確定性原理により、粒子として存在する時間と位置が全く定まらなくなる。そこで、運動量 (k) とエネルギー (ω) が幅を持った合成波を考える必要があり、これを波束という。

4 位相速度と群速度

位相速度

波動方程式

$$\frac{1}{s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

において、 s は振動の位相速度と呼ばれる。

4.1 位相速度

$u = e^{i(kx - \omega t)}$ として表される波の位相速度は、波動方程式より

$$-\frac{1}{s^2} \cdot \omega^2 u = -k^2 u$$
$$\frac{1}{s^2} = \frac{k^2}{\omega^2}$$
$$s = \frac{\omega}{k}$$

である。

4.2 群速度

群速度は、合成波 (波束) の位相速度である。

ここで、2つの波の合成波の包絡線を考えると、包絡線は $\cos(\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t)$ と表される。この包絡線の位相速度を考えると、

$$v_g = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}$$

となる。ところが、波束は2つの波の合成波ではないので、巨視的な差を微小量として微分とすると、群速度は

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

となる。この式に $\varepsilon = \hbar \omega$ を代入すると、

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$$

を得る。

5 バンド図と自由電子のエネルギー、群速度、有効質量

5.1 エネルギー

自由電子のエネルギーは、Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \varepsilon \varphi$$

より、

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

である。

5.2 群速度

自由電子の群速度は

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$$
$$= \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$
$$= \frac{\hbar k}{m}$$

である。

5.3 有効質量

運動方程式を運動量を用いて表すと、

$$F = \frac{dp}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt}$$

である。ここで、群速度 v_g を時間 t で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{dv_g}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\varepsilon}{dk dt} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \frac{dk}{dt} \end{aligned}$$

となるので、

$$\frac{dk}{dt} = \frac{\frac{dv_g}{dt}}{\left(\frac{1}{\hbar} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)}$$

を得る。これを運動方程式に代入すると

$$F = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)} \frac{dv_g}{dt}$$

となる。これを、一般的な運動方程式

$$F = m \frac{dv}{dt}$$

と比較すると、 $\frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)}$ は質量に相当する物理量であることがわかるため、これを有効質量という。

自由電子の場合、

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} &= \frac{d^2}{dk^2} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \end{aligned}$$

より、 $m^* = m$ である。すなわち、有効質量 m^* は k に関わらず静止質量 m と一致する。

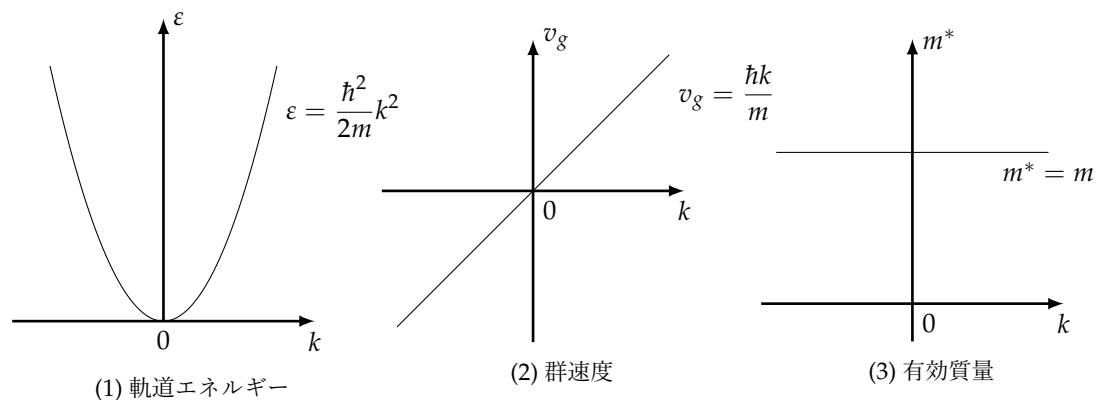


Fig. 2: 自由電子のエネルギー，群速度，有効質量

6 金属では電気が流れ，絶縁体では電気が流れない理由

絶縁体では、電場がかかっても電子全体の状態が変化しないため電流は流れない。一方、金属では電場をかけることによって占有電子の分布に偏りが生じるため電流が流れる。(Fig. 3)

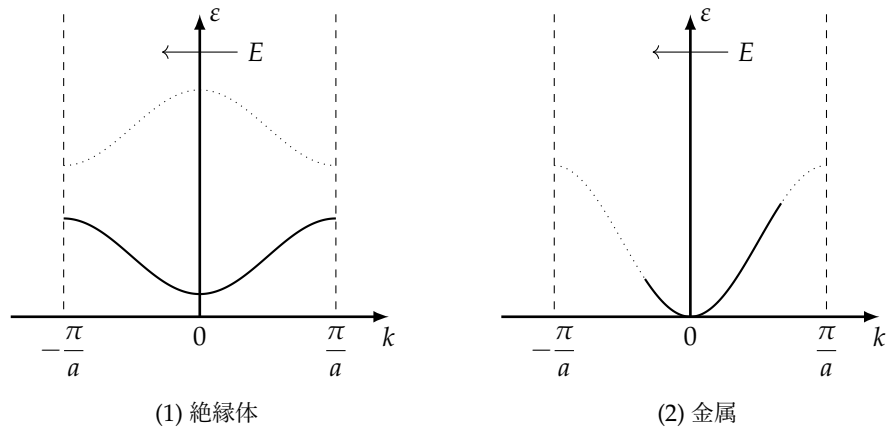


Fig. 3: 絶縁体と金属のバンド図

7 半導体の直接遷移と間接遷移

半導体には Fig.4 に示すように 2 種類のバンド構造が存在する。価電子帯の最高エネルギーと伝導帯の最低エネルギーが同じ波数 k にあるものを直接ギャップ半導体、2つのエネルギーが異なる波数にあるものを間接ギャップ半導体という。

直接ギャップ半導体における光学遷移では波数 k が変化しないため遷移は k 軸に対して垂直に起こり、運動量保存則

$$k_c = k_v$$

が成り立つ。これを直接吸収過程という。一方、間接ギャップ半導体における光学遷移では振動 q が関与し、運動量保存則

$$k_c = k_v \pm q$$

が成り立つ。これを間接吸収過程という。

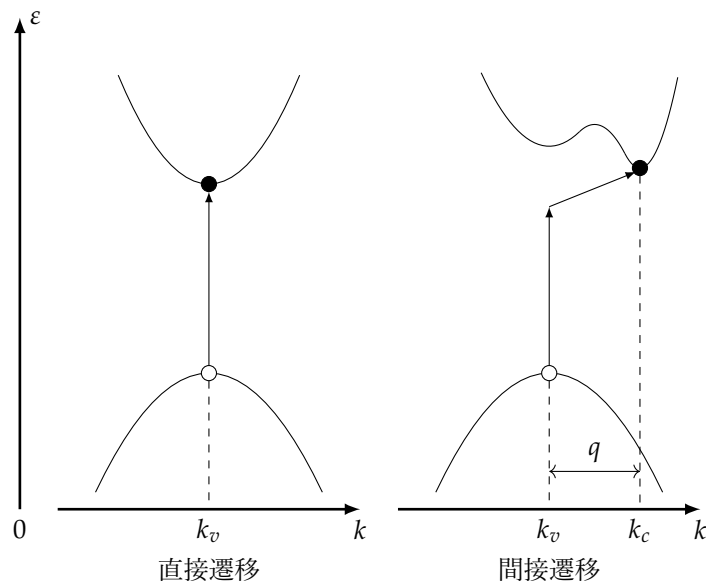


Fig. 4: 直接遷移と間接遷移

8 フェルミ準位の温度依存性

電子密度 n とホール密度 p はそれぞれ

$$\begin{cases} n = N_c(T) \exp\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_c}{k_B T}\right) \\ p = N_v(T) \exp\left(\frac{\varepsilon_v - \varepsilon_F}{k_B T}\right) \end{cases}$$

と表される¹。ただし、

$$\begin{cases} N_c(T) = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \\ N_v(T) = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \end{cases}$$

は有効状態密度である。フェルミ準位においてはこれらは等しいので、

$$\begin{aligned} N_c(T) \exp\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_c}{k_B T}\right) &= N_v(T) \exp\left(\frac{\varepsilon_v - \varepsilon_F}{k_B T}\right) \\ \exp\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_c}{k_B T} - \frac{\varepsilon_v - \varepsilon_F}{k_B T}\right) &= \frac{N_v(T)}{N_c(T)} \\ \exp\left(\frac{2\varepsilon_F - (\varepsilon_v + \varepsilon_c)}{k_B T}\right) &= \left(\frac{m_h^* k_B T}{m_e^* k_B T}\right)^{3/2} \\ \frac{2\varepsilon_F - (\varepsilon_v + \varepsilon_c)}{k_B T} &= \frac{3}{2} \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \\ 2\varepsilon_F &= (\varepsilon_v + \varepsilon_c) + \frac{3}{2} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \\ \varepsilon_F &= \frac{\varepsilon_v + \varepsilon_c}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \end{aligned}$$

を得る。右辺第2項は $m_e^* = m_h^*$ のとき0になり、 ε_F は T に依存しなくなる。また、 $m_e^* \neq m_h^*$ であっても第1項より十分に小さいため、フェルミ準位はバンドギャップの中央に位置する。

9 Si にどのような元素をドーピングすれば n 型半導体や p 型半導体になるか

${}_{14}\text{Si}$ の価電子の配置は $(3s)^2(3p)^2$ であるので、 ${}_{15}\text{P}$ (価電子: $(3s)^2(3p)^3$) などをドーピングすれば n 型半導体に、 ${}_{5}\text{B}$ (価電子: $(2s)^2(2p)^1$) などをドーピングすれば p 型半導体になる。

¹この導出の詳細は教科書を参照 (pp. 110ff)

10 pn 接合による整流特性のメカニズム

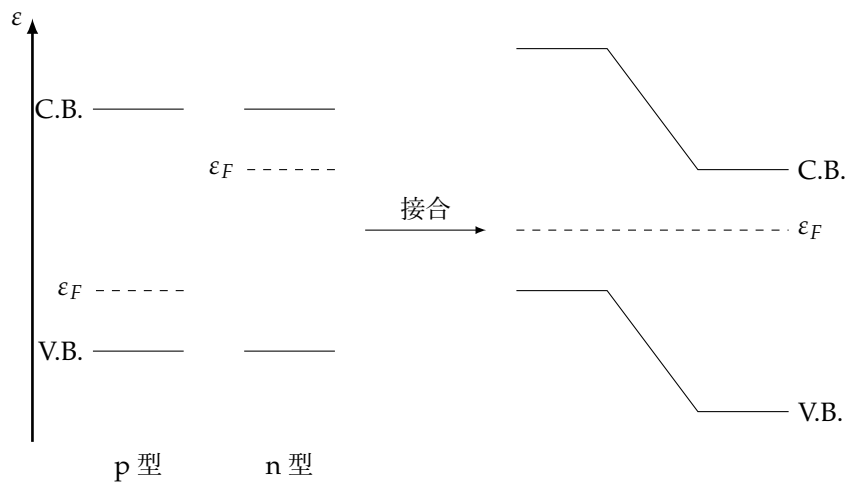


Fig. 5: pn 接合

10.1 順方向バイアス

順方向バイアスをかけると p 側のバンドと n 側のバンドのエネルギー差が小さくなるためキャリアが移動できるようになり、電流が流れるようになる (Fig.6)。

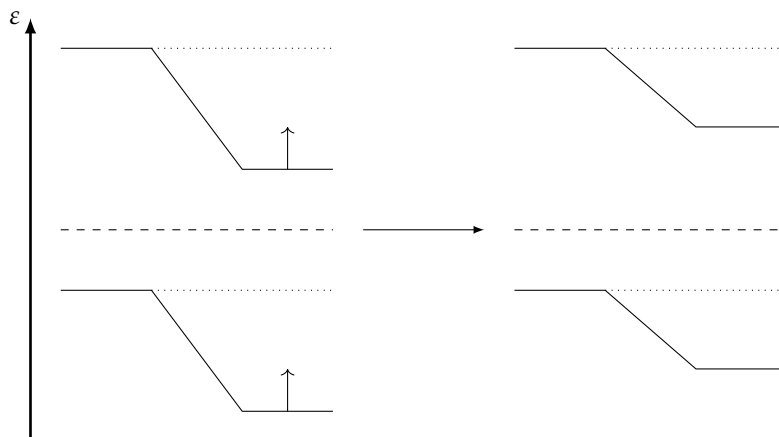


Fig. 6: 順方向バイアス

10.2 逆方向バイアス

逆方向バイアスをかけるとエネルギー差は大きくなり、キャリアはほとんど移動することができないため電流は流れない (Fig.7)。

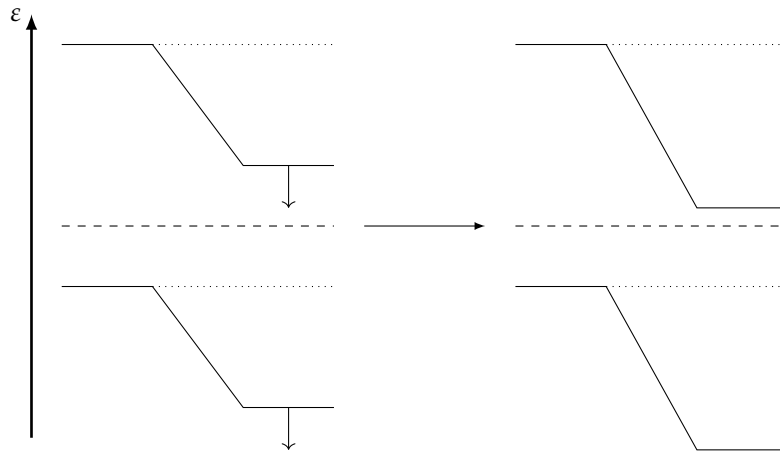


Fig. 7: 逆方向バイアス

11 pn接合を利用した代表的なデバイス

- ダイオード
- トランジスタ

12 双極子モーメント

双極子モーメント μ は、電荷 q とその距離 d によって

$$\mu = qd$$

と表される。

13 分極率と分極率体積

分極率は、誘起双極子モーメント μ^* と電場 E の関係式

$$\mu^* = \alpha E$$

における比例係数 α のことである。

また、分極率 α を $4\pi\epsilon_0$ で除した

$$\alpha' = \frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0}$$

は長さの3乗の次元を持ち、実際の分子と同程度の大きさとなる。これを分極率体積という。

14 (電気)分極

誘電体について、ある巨視的な領域内の μ の総和をその体積で除した量

$$P = \frac{\sum_i \mu_i}{\Delta V}$$

を(電気)分極という。

15 3種類の(電気)分極

配向分極 永久双極子モーメントの配向によるもの。

電子分極 電子の偏りによるもの。

原子分極 原子の偏りによるもの。イオン分極ともいう。

16 Clausius-Mossotti 式

比誘電率 ϵ_r と電気的性質の関係

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{\rho N_A \alpha}{3\epsilon_0 M}$$

を Clausius-Mossotti 式という。ただし、この式は配向分極が無視できる場合に成り立つものである。無極性分子については常に成り立つが、極性分子については交流電場の周波数が高く分子が電場の変化に追従できない場合にのみ成り立つ。

17 屈折率と比誘電率の関係

屈折率 n と比誘電率 ϵ_r の間には

$$n = \sqrt{\epsilon_r}$$

という関係がある。

18 分極率の測定

可視光や紫外光などの高い振動数の電磁波を用いて屈折率 n を測定し、 $n = \sqrt{\epsilon_r}$ から比誘電率を求めることができる。さらに、Clausius-Mossotti 式を適用することにより比誘電率から分極率を計算することができる²。

²Clausius-Mossotti 式を使用するので屈折率の測定には高周波数の電磁波を使用する必要がある。