

# 不純物ドーパ半導体での電子相関効果

東大理 名取晃子

## §1 はじめに

最近 randomness と電子間相互作用の両者が効いている系のふるまいが注目を浴びている。この報告では以前に Yonezawa et. al.<sup>(1)</sup> が用いたモデルハミルトニアンに基いた Self-consistent な計算を行い、電子相関効果により不純物位置に局在モードが生長し、伝導帯底に D バンドが形成されて行く様子を調べる。

## §2 モデルハミルトニアンと近似法

不純物ポテンシヤル、電子間相互作用を短距離型に単純化した下記のモデルハミルトニアンを取り扱う。

$$H = \sum_{ij\alpha} t_{ij} C_{i\alpha}^\dagger C_{j\alpha} - V \sum_{\{i\}\alpha} n_{i\alpha} + U \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} n_{i-\alpha} \quad (1)$$

ここで  $\alpha$  はスピン状態、 $\{i\}$  は格子位置、 $\{i\}$  は置換型の不純物位置を表わし、 $-V$  と  $U$  は各々不純物ポテンシヤル強度、電子相関強度を表わす。まず最初に簡単な 2 原子分子の場合について見る。

### A) 2 原子分子

出発点のハミルトニアンは下記で与えられる。

$$H = \sum_{\alpha} t (C_{1\alpha}^\dagger C_{2\alpha} + C_{2\alpha}^\dagger C_{1\alpha}) + U (n_{1\alpha} n_{1-\alpha} + n_{2\alpha} n_{2-\alpha}) \quad (2)$$

基底状態、スピン一重項状態は

$$C_{1\uparrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, C_{2\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, C_{1\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

を基底とした次の4行4列のハミルトニアン $H$ の基底状態として与えられる。

$$H = \begin{pmatrix} U & 0 & t & t \\ 0 & U & t & t \\ t & t & 0 & 0 \\ t & t & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

即ち、基底状態エネルギー $E_g$ は下記で与えられる。

$$E_g = \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2} \quad (4)$$

次にハミルトニアン(2)をハートリー・フォック(HF)近似で取り扱う事を試みる。即ち、

$$\langle n_{1-a} \rangle = \frac{1}{2} + \Delta, \quad \langle n_{2-a} \rangle = \frac{1}{2} - \Delta \quad (5)$$

と仮定すれば、 $a$ スピン電子に対する有効ハミルトニアン $H^a$ は、

$$C_{1a}^\dagger |0\rangle, \quad C_{2a}^\dagger |0\rangle$$

を基底として下記で与えられる。(  $\langle \rangle$  は基底状態での平均を表わす)

$$H^a = \begin{pmatrix} U(\frac{1}{2} + \Delta) & t \\ t & U(\frac{1}{2} - \Delta) \end{pmatrix} \quad (6)$$

対応する1電子基底状態 $a = C_{1a}^\dagger |0\rangle + b = C_{2a}^\dagger |0\rangle$ 、及びそのエネルギー $\epsilon$ は下記で与えられる。

$$a^2 = \frac{t^2}{2(t^2 + U^2\Delta^2) + 2U\Delta\sqrt{t^2 + U^2\Delta^2}}, \quad b^2 = \frac{t^2 + 2U^2\Delta^2 + 2U\Delta\sqrt{t^2 + U^2\Delta^2}}{2(t^2 + U^2\Delta^2) + 2U\Delta\sqrt{t^2 + U^2\Delta^2}} \quad (7)$$

$$\epsilon_- = \frac{U}{2} - \sqrt{t^2 + U^2\Delta^2}$$

$a$ スピン電子に対し

$$\langle n_{1a} \rangle = \frac{1}{2} - \Delta, \quad \langle n_{2a} \rangle = \frac{1}{2} + \Delta \quad (5)'$$

が成り立つ (Self-Consistency) 条件は (7) 式より下記で与えられる。

$$\frac{U\Delta}{\sqrt{t^2 + U^2\Delta^2}} = 2\Delta \quad (8)$$

結局、2電子基底状態エネルギー  $E_g$  は、2重に教えている相互作用エネルギーと差し引いて下記で与えられる。

$$E_g = \frac{U}{2} + 2U\Delta^2 - 2\sqrt{t^2 + U^2\Delta^2} \quad (9)$$

お1図にス原子分子の基底状態エ

ネルギー  $E_g$  の厳密解 (4) 式、及び

H.F. 解 (9) 式を  $\Delta$  と合わせて示す。

この図より H.F. 解は厳密解の  $t/U$

が小さい所と大きい所の間の内挿

式を与えている事が理解される。

### B) 不純物ドープ半導体

電子濃度が不純物濃度  $C$  (1サイト  
の濃度) に等しい場合を取り

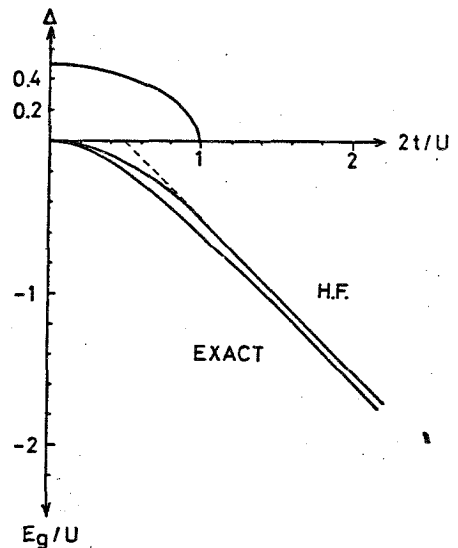
扱う。以下に幾つかの仮定と近似を述べる。

i)  $V = U = 0$  の bulk のバンドの状態密度  $D^0(E)$  として下記の形を  
仮定する。

$$D^0(E) = \frac{2}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - E^2}$$

ii) 電子相関は H.F. 近似で取り扱う。即ち、ハミルトニアン (1) の中  
で下記の置きかえを行う。

$$U \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} n_{i-\alpha} \Rightarrow U \sum_{i\alpha} n_{i\alpha} \langle n_{i-\alpha} \rangle$$



お1図

ii) 不純物サイトでの電子数  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  は半分のサイト ( $A_1$  サイト、濃度  $C/2$ ) で  $\bar{n} + \Delta$ 、残りの半分のサイト ( $A_2$  サイト、濃度  $C/2$ ) で  $\bar{n} - \Delta$  であると仮定し、 $\langle n_{i\sigma} \rangle$  に対しては  $A_1$  サイトで  $\bar{n} - \Delta$ 、 $A_2$  サイトで  $\bar{n} + \Delta$  になる Self-Consistency の条件を置く。(Paramagnetic)

iii) 不純物ポテンシヤルと相同エネルギーによるランダムなサイトエネルギーを  $C$  PA で取り扱う。

ここで不純物濃度  $C$  が十分小さいにも関わらず  $C$  PA を用いたのは  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  を計算する必要性からであり、電子濃度が十分小さくても不純物サイトには電子が集まり、電子相同距離がきいてスピン密度の揺動が生じる。

条件 ii) は  $A_1$  及び  $A_2$  サイトの  $\sigma$  スピン電子の状態密度への寄与を  $D_{A_1}^{\sigma}(E)$ 、 $D_{A_2}^{\sigma}(E)$  と書き表わせば、

$$\int D_{A_1}^{\sigma}(E) f(E) dE = \bar{n} - \Delta \quad (10)$$

$$\int D_{A_2}^{\sigma}(E) f(E) dE = \bar{n} + \Delta$$

と表わされる。ここで  $f(E)$  はフェルミ分布関数を与え、フェルミエネルギー  $\mu$  は全体の状態密度  $D(E)$  を用い、

$$\int D(E) f(E) dE = C/2 \quad (11)$$

の条件で決まる。(10) 式は

$$\bar{n} = \frac{1}{2} \int [D_{A_1}^{\sigma}(E) + D_{A_2}^{\sigma}(E)] f(E) dE \quad (10)'$$

$$\Delta = \frac{1}{2} \int [D_{A_2}^{\sigma}(E) - D_{A_1}^{\sigma}(E)] f(E) dE$$

に変形されるが、ここで  $[D_{A_2}^{\sigma}(E) - D_{A_1}^{\sigma}(E)]$  は一般に  $\Delta g(\Delta, E)$

( $g(\Delta, E)$  は  $\Delta$  と  $E$  の関数) と書き表わされるので、 $\Delta = 0$

(homogeneous-solution)は常に(10)式の下式を満たすか、更に

$$\frac{1}{2} \int g(\Delta, E) f(E) dE = 1 \quad (12)$$

を満たす  $\Delta \neq 0$  (inhomogeneous solution) の解も存在する。

### §3 数値計算結果

注目する系はバルクのバンド幅  $W$ 、不純物ポテンシヤル強度  $V$ 、電子相関エネルギー  $U$ 、不純物濃度  $C$  (=電子濃度)、及び温度  $T$  で特徴づけられるか、簡単な為には  $T=0$  に話を限る。  
Ge や Si 等の半導体を念頭において、エネルギースケールを  $W=100$  とする様取った時、 $V$  の値は孤立不純物束縛エネルギー  $V_0$  には  $V=58$  と取る。  $U$  の値としては浅い  $U$  電子束縛状態  $U=30$  と取った。

不純物濃度  $C$  を変えた時の、不純物サイトでの平均電子数  $\bar{n}$ 、スピン密度揺動  $\Delta$  の変化を示す図に示す。この図には更に、フェルミエネルギーでの状態密度  $D(E_F)$ 、及びフェルミエネルギーを挟んだエネルギーギャップ  $E_2$  の濃度依存性も示してある。  
不純物濃度  $C$  を高濃度側から下げてゆくと、 $\bar{n}$  値は減少し、 $D(E_F)$  も  $C^{1/2}$  に比例し減少するが

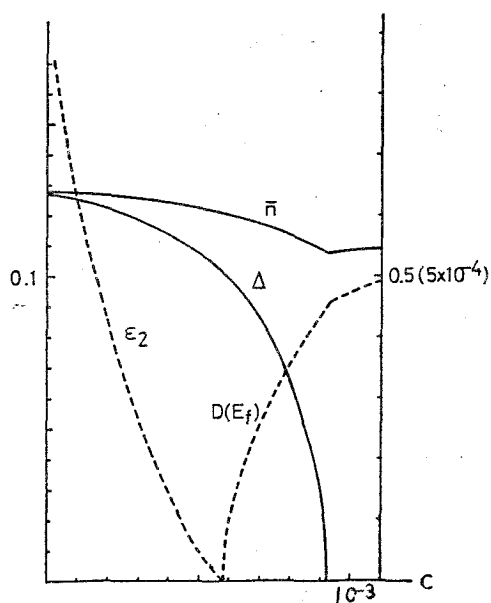
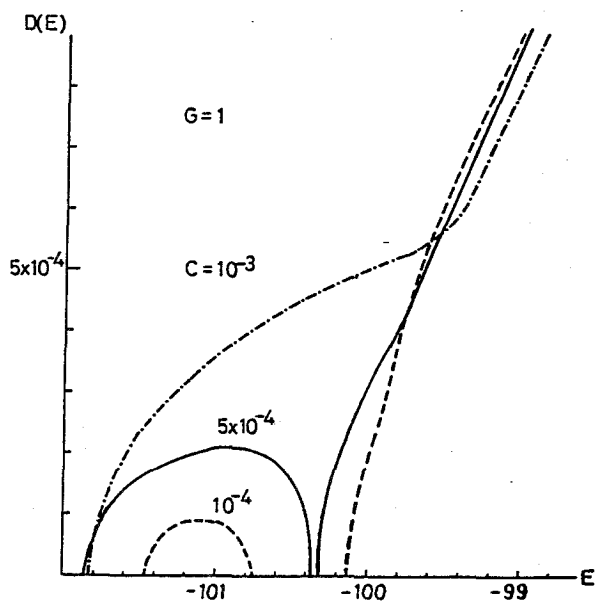


図2

ある濃度  $C_1$  からスピン密度揺動  $\Delta$  が生長を始める。それに連れて不純物サイトでの居心地が良くなり  $\bar{n}$  は増加し始め、遂に  $D(E_F)$  は急激に減少し出し、遂に濃度  $C_2$  で 0 となり、フェルミエネルギーを挟んでエネルギーギャップ  $E_g$  が発生する。以上の変化の様子は状態密度に対して見たのが次の図である。

図 3

図 3 では伝導帯の底近傍に電子相肉による  $D$  バンド状態が形成されている事に注意されたい。これは電子相肉  $U=0$  の場合の状態密度(図 4)と比較して見れば明らかである。更に両図の相



異は、電子相肉効果による不純物ポテンシアル強度の遮蔽効果に顕著に表われている。

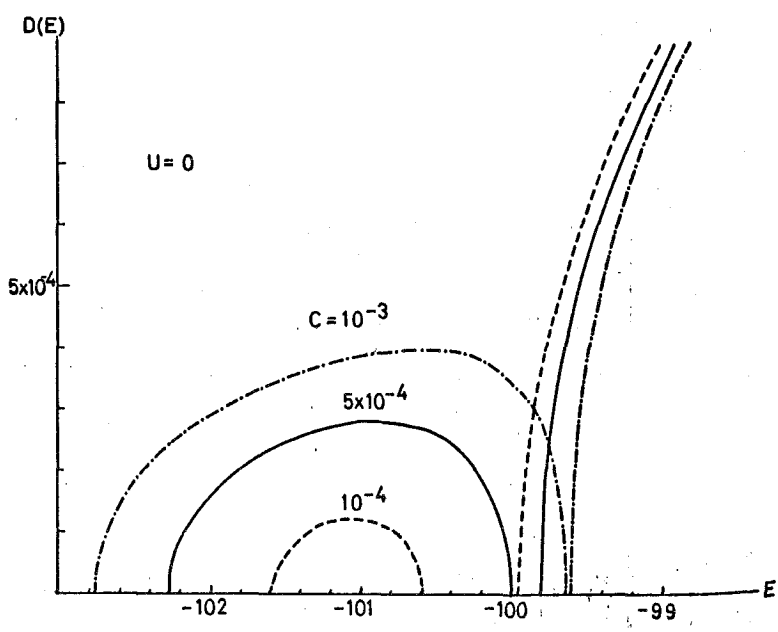


図 4

#### §4 おわりに

(1)で与えたモデルハミルトニアニは實際の系に適用するには余りに簡単すぎる形をしているが、§3に示した様に物理的には Reasonable な結果を与えている。現在、谷縮電の効果、磁場印加の効果について計算を進めている。

#### 参考文献

(1) F. Yonezawa and M. Watabe : Phys Rev B 8 (1973) 4540