

Two Band Approximation による不規則格子の電子状態Ⅱ

—— ホール効果と熱起電能 ——

金沢大学工学部電子工学科 清水立生・渡辺一郎

(10月14日受理)

Synopsis

不規則格子の電子状態に対するYonezawaモデルを伝導帯と価電子帯の2つのバンドを考慮するように拡張して、弱磁場の極限でのホール係数と熱起電能を計算した。フェルミ準位の位置によってホール係数は符号を変え、熱起電能とホール係数の符号は必ずしも一致しないという結果が得られた。

§ 1. Introduction

前の報告 (I)¹⁾ ではYonezawaモデル²⁾ を伝導帯と価電子帯の2つのバンドを考慮するように拡張して、不規則格子の電子に対する状態密度と易動度を計算した。ここでは(I)で得られたグリーン関数を用いて、弱磁場の極限でのホール係数と熱起電能の計算を行なう。

非晶質半導体では多くの場合、熱起電能は正であるが、ホール係数は負であることが知られている³⁾。またホール移動度は電気伝導度から期待される値に較べて非常に小さく、大約 $10^{-1} \text{ cm}^2/\text{volt} \cdot \text{sec}$ 程度である⁴⁾。さらに液体半導体においてもホール係数と熱起電能の符号が一致しないことが知られている⁵⁾。これらの実験事実を説明する試みはいくつかあるが、理論的に未解決な問題であると思われる。この論文の目的はそれらの実験事実に対して理論的な知見を与えることにある。

SaitohらはYonezawaモデルを磁場がある場合に拡張してホール係数などの計算を行なっているが、彼らは伝導帯のみしか考慮していないためにフェルミ準位がどこにあってもホール係数は常に負となるという結果を得ている⁶⁾。伝導帯と価電子率の2つのバンドを考慮することによってフェルミ準位の位置によりホール係数の符号は変るといふ結果が得られる。またホール係数と熱起電能

の符号も必ずしも一致しないという結果が得られる。

§ 2. ホール係数

ホール係数 R は電気伝導度テンソル σ_{ij} によって次式で与えられる。⁷⁾

$$R = \sigma_{xy} / H(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2) \quad (1)$$

したがって弱磁場の極限でのホール係数 R_0 は

$$R_0 = \sigma_{xy} / H \sigma_{xx}^2 \quad (H \rightarrow 0) \quad (2)$$

となる。 $H = 0$ での σ_{xx} は論文(I)を参照すれば次のようになる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = & \frac{2}{3} \frac{e^2}{h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \frac{1}{|\epsilon_3|} \left[\sqrt{m_e} \left(\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_1 \right)^{3/2} \right. \\ & \left. + \sqrt{m_h} \left(\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_2 \right)^{3/2} \right] \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、それぞれの記号については論文(I)を参照されたい。次に $H \rightarrow 0$ での σ_{xy} を計算する。不規則なデルタ関数型のポテンシャル中の自由電子に対する $\sigma_{xy}(H \rightarrow 0)$ は Saitoh ら⁶⁾ によって計算されており、論文(I)の σ_{xx} の計算と同様、電流オペレータのバンド間行列要素ならびにグリーン関数のバンド間非対角要素からの寄与を無視すれば、伝導帯と価電子帯の2つのバンドを考慮した場合にも容易に拡張することができる。その結果は次のようになる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{4}{9} \frac{e^3 \hbar^4 H}{\pi c} \cdot \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^4 dk \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \\ & \times \left[\frac{1}{m_h^3} \left\{ \text{Im} G_{v\mathbf{k}}(E) \right\}^3 - \frac{1}{m_e^3} \left\{ \text{Im} G_{c\mathbf{k}}(E) \right\}^3 \right] \end{aligned} \quad (4)$$

ここで c は光速である。但しここで e は正に取ってある。 k についての積分を行なえば

$$\sigma_{xy} = \frac{e^3 H}{12\pi\hbar c} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \frac{1}{\epsilon_3^2} \left[\frac{(\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_2)^{5/2}}{\sqrt{m_h} \sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}} - \frac{(\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_1)^{5/2}}{\sqrt{m_e} \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2}} \right] \quad (5)$$

となる。従って絶対零度での弱磁場の極限でのホール係数は

$$\sigma_{ij} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sigma_{ij}(E) \quad (6)$$

なる定義を用いれば次のようになる。

$$R_0 = \frac{\sigma_{xy}(E_F)}{H \sigma_{xx}^2(E_F)} = \frac{3\hbar^3}{16\pi c e} \frac{\frac{(\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_2)^{5/2}}{\sqrt{m_h} \sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}} - \frac{(\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_1)^{5/2}}{\sqrt{m_e} \sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2}}}{\left\{ \sqrt{m_e} (\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_1)^{3/2} + \sqrt{m_h} (\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2} + \epsilon_2)^{3/2} \right\}^2} \quad (7)$$

ここで E_F はフェルミエネルギーである。論文(I)で用いたのと同じ数値 $E_g = 1$ eV, $m_e = m$, $m_h = 0.5m$, $V_0 = 5$ eV, $a = 2$ Å, $k^* = 1.78/a$ を用い, 不純物濃度 $N = 0.1 N_0$, $0.06 N_0$, $0.02 N_0$ について数値計算を行なった結果を図1に示す。

E_F がほぼバンドギャップの中間にあるときにホール係数は符号を変えることがわかった。 $N = 0.02 N_0$ の場合 $E = 0.6$ eV 及び -0.7 eV 付近で無限大になっているのは状態密度 $D(E)$ がゼロになっているためであり(論文(I)の図2参照), 物理的にはあまり意味のないものと思われる。

§ 3. 熱起電能

熱起電能 S は次式によって与えられる。

$$S = - \frac{\int \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sigma(E) (E - E_F) dE}{eT \int \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sigma(E) dE} \quad (8)$$

$k_B T$ 程度の E の変化に対して $\sigma(E)$ があまり変化しないときには

$$S = - \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e} \left. \frac{\partial \ell_n \sigma(E)}{\partial E} \right|_{E=E_F} \quad (9)$$

となる。⁸⁾ (3)式および § 2. で与えられた数値を用いて数値計算を行なった結果を図 2 に示す。 $N=0.02N_0$ の場合、 $E=0.6$ eV 及び -0.7 eV 付近で無限大になっているのは § 2. と同じ理由による。

§ 4. Discussions

非晶質半導体では易動度ギャップの存在のために、伝導現象に効くキャリアは易動度ギャップの上下に励起された電子、正孔であると考えられているが、我々の計算では論文(1)で述べたように易動度ギャップが実験事実ほど明確に現われていないために、ギャップ内にあるキャリアが伝導に効くという結果になっている。従って(3)、(5)式及び(8)式を用いてホール係数や熱起電能の温度変化を計算して、非晶質半導体に対する実験結果と比較してもあまり意味がない。そこで我々は(7)式及び(9)式を用いて低温の極限でのみ数値計算を行なった(図 1 並びに図 2)。

液体半導体の場合にはこのような低温近似が室温においても成立している場合があると思われる。図 1 及び図 2 で得られた結果はホール係数がギャップの中間付近で符号を変えること、従ってその近辺でのホール係数の大きさは非常に小さくなっていること、熱起電能とホール係数の符号はフェルミ準位の位置によって必ずしも一致しないということである。

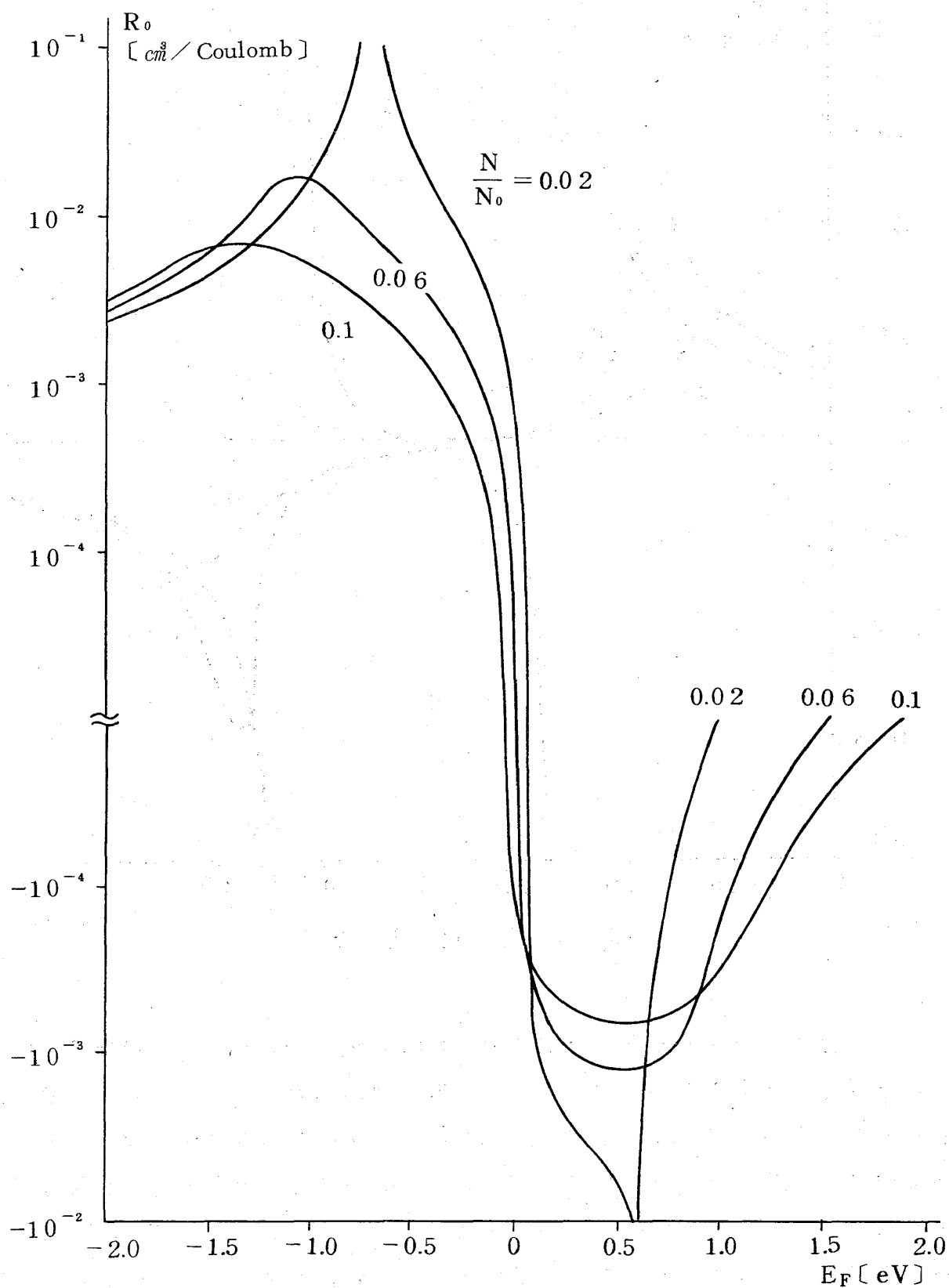


図 1 ホール係数

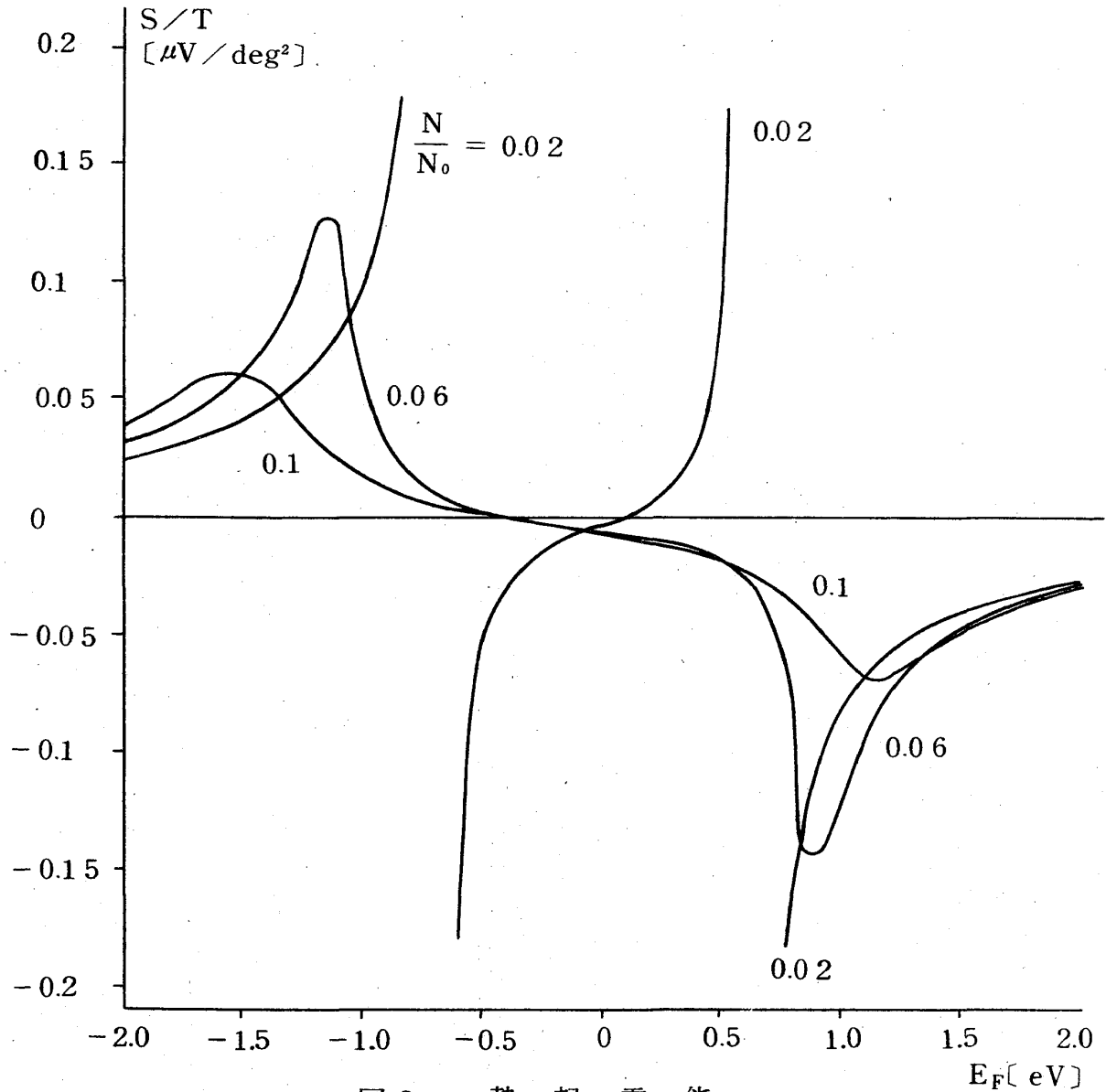


図 2 熱起電能

もし本論文での電子と正孔を逆に考えれば ($m_h > m_e$ として不純物ポテンシャルを斥力的とすることに対応し、非晶質半導体に対してはこのような考える方が妥当と思われる。) 図 1 並びに図 2 のエネルギーの向きは逆になり、ホール係数並びに熱起電能の符号も逆になる (図 1 並びに図 2 を上下、左右共に逆にすればよい)。そうすれば図 2 から分るように $N = 0.1 N_0$, $0.06 N_0$ に対する熱起電能の符号はギャップ内では正となり、非晶質半導体や多くの液体半導体に対する実験事実と一致する。一方ホール係数はギャップ内において正の値も負の値も取り得る。

参 考 文 献

- 1) 清水立生, 渡辺一郎 ; 物性研究 16 (1971) 560.
- 2) F.Yonezawa ; Prog. theor. Phys. 31 (1964) 357.
- 3) A.D.Pearson ; J.Electrochem. Soc. 111 (1964) 753.
- 4) J.C.Male ; Brit. J.Appl. Phys. 18 (1967) 1543.
- 5) J.E.Enderby and E.W.Collings ; J.Non Crystalline Solids 4 (1970) 161.
- 6) M.Saitoh, H.Fukuyama, Y.Uemura, and H.Shiba ; J.Phys. Soc. Japan 27 (1969) 26 ; ibid. 28 (1970) 842 ; ibid. 29 (1970) 1470.
- 7) 植村泰忠, 菊池誠 ; 半導体の理論と応用(上) p.234 (裳華房)
- 8) J.M.Ziman ; Principles of the Theory of Solids (Cambridge Univ. Press, 1964) p.202.