

太陽電池デバイス・シミュレータ・プログラム基本設計仕様書

version 1.50

2012年10月10日

AA&S 吾妻広夫

1 はじめに

この書類は、独立行政法人、物質・材料研究機構、角谷正友主幹研究員様からの依頼により開発が予定されている、太陽電池デバイス・シミュレータのプログラム基本設計仕様書である。本書類では、シミュレータ・プログラムの基本動作原理、プログラミング作業の進め方に関する方針、等が記載されている。

従って、太陽電池デバイスをシミュレーションするのに必要な、半導体物理学に関する必要最小限の知識、問題を解くための物理学的な方程式の具体的な形、等が、出来る限り簡潔に書かれている。また、コード実装作業に関して、使用されるプログラミング言語、どの関数からコーディングを行うかの順序、単体テストの指針、等も記載されている。

しかし、プログラムを実装する際の、アルゴリズム上の細かなテクニック、出入力データ形式、等については、本書類では取り上げないことにする。これらの細かな事項は、プログラミング実装作業が開始された段階で、担当プログラマが適宜判断して決定して行くものとする。

2 シミュレーション・モデルの概要

太陽電池デバイスは、基本的には、半導体 pn 接合で構成されるダイオードと同じ原理で動作していると見なして良い。従って、太陽電池デバイスのシミュレーションを行って、電流-電圧特性やその他の物理的知見を得ようとする場合、キャリア電子(および、キャリア正孔)の移動に着目して現象を調べるのが一般的である。

ダイオード内部でのキャリア電子の移動は、古典的な輸送方程式で十分正しく記述出来ることが経験的に知られている。これは、デバイスの大きさがサブミクロンのオーダー、すなわち、 10^{-6}m から 10^{-9}m の中間領域に相当し、量子力学的な効果が現れ難いと考えられるからである。一方、半導体のエネルギーバンド構造、キャリア電子の散乱等は、量子力学的な取り扱いが必要と考えられる。半導体のバンド構造は、既に多くの研究が行われており、それらの実験データ等は、比較的簡単に手に入る状況である。従って、この点に関しては、これらの既存のデータを流用して全く問題無いと考えられる。

キャリア電子の散乱の取り扱い方法は、まだ完全には確立されていない状況である。通常、散乱過程を記述する Schrödinger 方程式を、フェルミの黄金律と呼ばれる 1 次の摂動論で近似的に解いて、それによって散乱確率を求める方式が採用される場合が多い。しかし、キャリア電子に対する、どのような相互作用を計算に含めるかは、研究者の主観に依存する部分が有り、簡単には決められないのが実情である。

そこで、本仕様書では、「エネルギーバンドは放物線形で、かつ、等方的」、「価電子帯から伝導帯へ電子が遷移する場合は、直接遷移」、というように、出来るだけ問題を簡単

化して、プロトタイプシミュレーション・プログラムを完成させることを、第一の目的とする。計算モデルの更なる精密化は、次の開発段階の目的として、後回しにすることとする。本仕様書では、ひとまず、簡単な太陽電池デバイス・モデルを、実際にシミュレーション計算出来るようにすることを目的とする。

3 ボルツマン輸送方程式およびバランス方程式

本仕様書では、半導体ダイオード、太陽電池デバイス内部での、キャリア電子の運動を、バランス方程式と呼ばれる古典輸送方程式で記述する。このバランス方程式は、ボルツマン輸送方程式の近似として与えられるもので、数値計算シミュレーションに適した形をしている。本節では、キャリア電子のボルツマン輸送方程式、および、バランス方程式について、その導出方法等の説明を行う。デバイス内でキャリア電子・正孔の運動を同時に取り扱うのは、第 11 節の具体的な数値計算方法の説明においてとする。

3.1 ボルツマン輸送方程式、および、キャリア濃度、運動量、エネルギー保存方程式

半導体内部でのキャリア電子の移動は、以下に説明する Boltzmann 方程式で記述するのが一般的である。まず、キャリア電子の分布関数として、次の関数を考える。

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (3.1)$$

これは、時刻 t において、位置座標が \mathbf{r} と $(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r})$ の間、運動量が \mathbf{p} と $(\mathbf{p} + \Delta\mathbf{p})$ の間に存在するキャリア電子の個数を表しているとする。

もし、全てのキャリア電子が互いに相互作用せず、また、キャリア電子の生成・消滅も起こらず、単なる自由粒子として系全体が時間発展する場合、分布関数 $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ の時間変数 t に関する全微分はゼロとなるべきで、それゆえ、以下の関係式が成り立つはずである。

$$\frac{d}{dt}f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\partial f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \cdot \nabla f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = 0 \quad (3.2)$$

ただし、 $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ 、 $\nabla_{\mathbf{p}} = (\partial/\partial p_x, \partial/\partial p_y, \partial/\partial p_z)$ とする。

しかし、もしキャリア電子の散乱を考慮するならば、式 (3.2) の右辺はゼロにはならず、散乱の様子を表現する項が代入されるべきと考えられる。そのような項を $(\partial f/\partial t)_c$ として、以下の方程式が得られる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \cdot \nabla f - \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c \quad (3.3)$$

ただし、 $(\partial f/\partial t)_c$ の添え字 c は、collision(衝突)を表わしているとする。通常、この式がボルツマン輸送方程式と呼ばれる。本節では、常に、半導体中でのキャリア電子に関するボルツマン輸送方程式を考察する。従って、 \mathbf{r} および \mathbf{p} の時間微分を、以下のように書き換えた方が分かり易くて便利である。

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \mathbf{v}, \quad \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = -e\mathbf{F} \quad (3.4)$$

これより、 v はキャリア電子の速度、 F はキャリア電子の受ける電界とする。ただし、この電界 F は、外部から印加される電界 F_{ext} と、キャリア電子・正孔の静的な分布 (濃度勾配) から生じる内部電界 F_{int} の和とする。

上記の議論をふまえて、改めてボルツマン輸送方程式を書き下すと、以下のようになる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v \cdot \nabla f + eF \cdot \nabla_p f + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (3.5)$$

このボルツマン輸送方程式の解となる分布関数 $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ は、合計 7 個の変数に依存する。そのため、方程式 (3.5) を直接的に解いて $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ の具体的な形を求めるのは、一般に非常に難しい。

そこで、式 (3.5) を、キャリア電子の濃度 $n(t, \mathbf{r})$ 、平均速度 $v(t, \mathbf{r})$ 、平均エネルギー $w(t, \mathbf{r})$ に関する保存方程式に書き換え、これを解くことにする。もう少し具体的に述べると、まず、式 (3.5) に対して、 $\int d^3p$ を作用させることで、キャリア電子の濃度 $n(t, \mathbf{r})$ に関する保存方程式を得る。次に、式 (3.5) に運動量変数 \mathbf{p} を掛け合わせたものに対して、 $\int d^3p$ を作用させることで、キャリア電子の平均運動量に関する保存方程式を得る。ところが、キャリア電子の平均運動量を、電子の有効質量 m^* で割れば平均速度 $v(t, \mathbf{r})$ が得られることから、結果的に、キャリア電子の平均速度 $v(t, \mathbf{r})$ に関する保存方程式を得る。さらに、式 (3.5) にキャリア電子の運動エネルギー w を掛け合わせたものに対して、 $\int d^3p$ を作用させることで、キャリア電子の平均運動エネルギー $w(t, \mathbf{r})$ に関する保存方程式を得る。

ところで、電子の平均エネルギー w は、運動量変数 \mathbf{p} の 2 次の物理量に、熱力学的エネルギーを加えたものに相当する。従って、上記の操作によって得られた三種類の方程式は、それぞれ、ボルツマン輸送方程式について、運動量の 0 次、1 次、2 次のモーメントを考慮することに相当する。そして、同時に、運動量の 3 次以上のモーメントに関する物理量は無視することを意味する。本仕様書では、ボルツマン方程式を解く代わりに、上述の三種類の保存方程式を連立させて解くことで、キャリア電子の振る舞いを調べる。通常、これらの連立保存方程式はバランス方程式と呼ばれる。従って、本仕様書で採用するバランス方程式による解法は、ボルツマン輸送方程式を近似的に解くための手段でしかない点に注意すべきである。

まず、キャリア電子の平均濃度 $n(t, \mathbf{r})$ に関する方程式を導出する。式 (3.5) に $\int d^3p$ を作用させる。その結果、以下の関係式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} n(t, \mathbf{r}) = - \int v \cdot \nabla f d^3p + \int eF \cdot \nabla_p f d^3p + \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d^3p \quad (3.6)$$

ただし、キャリア電子の平均濃度を、次のように定義した。

$$n(t, \mathbf{r}) = \int f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p \quad (3.7)$$

ここで、キャリア電子の速度 v について、以下の変数の読み換えを行う。すなわち、本来 v は、式 (3.4) で定義された物理量であるが、これを、 $v = p/m^*$ と読み換えるのである。ただし、 m^* はキャリア電子の半導体中での有効質量とする。ここでは、 m^* は \mathbf{r} に依らず定数と見なせることにする。後でも触れるが、有効質量 m^* は、半導体の物性値として与えられる。よって、半導体の組成が空間座標 \mathbf{r} によって変化するなら、 m^* は \mathbf{r} に依存することになる。しかし、今は、そのような場合を考えないことにする。また、後で

説明するが、このキャリア電子の速度 v は、運動エネルギーに寄与する v_D と、熱力学的エネルギーに寄与する v_T の、和に相当する。

以上の考察により、キャリア電子の速度 v は、 r には依存しないが、 p には依存することとなる。このような準備の後、式 (3.6) の右辺第 1 番目の項について考える。速度 v が r に依存しないことから、以下の書き換えが可能である。

$$\int v \cdot \nabla f d^3p = \nabla \cdot \int v f d^3p = \nabla \cdot (\langle v \rangle n) \quad (3.8)$$

ただし、 $\langle v \rangle$ はキャリア電子の平均速度とし、さらに、 $\langle v \rangle$ は変数 t および r の関数とする。平均速度 $\langle v \rangle(t, r)$ の定義を、改めて以下に与えることにする。

$$\langle v \rangle(t, r) n(t, r) = \int v f(t, r, p) d^3p \quad (3.9)$$

ここで、 v に関して以下の仮定を置く。すなわち、 v は、次のようにドリフト速度 v_D と熱速度 v_T に分解されるとする。(添え字 D は drift、添え字 T は thermal を表わしている。)

$$v = v_D + v_T \quad (3.10)$$

さらに、熱運動は等方性を持つことから、 $\langle v_T \rangle = 0$ とする。すると、式 (3.8) の右辺の項は、次のように書き下して差し支えないことが分かる。

$$\nabla \cdot (v_D n) \quad (3.11)$$

ただし、上の式では、本来 $\langle v_D \rangle$ と書くべき所を、 v_D と書いている。今後、特に混乱が生じない限り、このような表記法を採用することとする。

次に、式 (3.6) の右辺第 2 番目の項について考える。実は、この項の値は、ゼロと近似して構わない。その理由は以下の通りである。まず、分布関数 $f(t, r, p)$ は、変数 p に関して等方的であると仮定する。すなわち、関数 $f(t, r, p)$ は、 $p \rightarrow -p$ という変換に対して、偶関数として振る舞うと見なす。すると、 $\nabla_p f$ は、変数 p について奇関数ということになる。従って、

$$\int eF \cdot \nabla_p f d^3p = 0 \quad (3.12)$$

という結論を得る。

ただし、式 (3.12) の導出では、電界 F が変数 p に依存しないことを暗に仮定している。この仮定は、物理的な見地からすれば妥当である。キャリア電子が感ずる電界 F は、結局のところ、外部 (external) から印加された電界 F_{ext} か、半導体内部 (internal) のキャリア電子濃度の勾配によって生じる電界 F_{int} のどちらかである。外部電界 F_{ext} がキャリア電子の運動量 p に依らないのは自明である。また、内部電界 F_{int} は、キャリア電子濃度 $n(t, r)$ によって決まるので、やはり、 p に依存しないのである。[さらに厳密に述べるなら、キャリア電子濃度 $n(t, r)$ は、時間変数 t に対して、十分ゆっくりとした変化しか生じず、このため $n(t, r)$ の時間変化による電磁場の発生は、無視出来るとしている。内部電界 F_{int} は、あくまで、静的な電磁場として取り扱われるとする。]

以上の議論をまとめると、以下の関係式を得る。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_D n) + \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c \quad (3.13)$$

ただし、

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_c = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c d^3p \quad (3.14)$$

としている。式 (3.13) および (3.14) が、キャリア濃度保存方程式である。

次に、キャリア電子の平均ドリフト速度 v_D に関する保存方程式を導出する。式 (3.5) に $\int d^3p p$ を作用させる。その結果、以下の関係式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int p f d^3p = - \int p(v \cdot \nabla f) d^3p + \int p(e\mathbf{F} \cdot \nabla_p f) d^3p + \int p \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c d^3p \quad (3.15)$$

まず、式 (3.15) の左辺について考える。以下の式により、キャリア電子の平均運動量 p_D を定義する。

$$\int p f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p = n(t, \mathbf{r}) p_D(t, \mathbf{r}) \quad (3.16)$$

本来なら、 $\langle p_D \rangle$ と書くべき所だが、混乱が生じない限りにおいて、 p_D と書くことにする。また、式 (3.16) においては、熱運動に由来する平均速度は、等方性を持つと仮定していることを思い出して、

$$\langle \mathbf{p} \rangle = m^* \langle \mathbf{v}_D \rangle + m^* \langle \mathbf{v}_T \rangle = m^* \langle \mathbf{v}_D \rangle = \langle p_D \rangle \quad (3.17)$$

としている。ただし、 m^* は、半導体中でのキャリア電子の有効質量とする。前にも述べたように、有効質量 m^* は、半導体の物性値として与えられるもので、具体的には、バンド構造を波数ベクトルによる分散関係で表示したときの、二階微分係数に相当する。本仕様書では、多くの場合、半導体のバンド構造は空間的に等方性を持つと仮定し、 $p_D = m^* v_D$ が成立するとする。従って、 m^* は、変数 t 、 \mathbf{p} には依存しない。しかし、半導体(ダイオード)の組成は、空間変数 \mathbf{r} によって変化するので、 m^* が \mathbf{r} の関数として表わされる場合はあり得る。そのような事情から、厳密には $m^*(\mathbf{r})$ と書くべきである。以上の考察から、式 (3.15) の左辺は、以下のように書き下せる。

$$m^* \frac{\partial}{\partial t} (n v_D) \quad (3.18)$$

次に、式 (3.15) の右辺第 1 番目の項について考える。既に、キャリア電子の速度 v が変数 \mathbf{r} に依存しないものと見なせることは、式 (3.8) の導出の際に説明した。そこで、式 (3.15) の右辺第 1 番目の項は、次のように書き換えられる。

$$\int p(v \cdot \nabla f) d^3p = \nabla \cdot \int \mathbf{v} p f d^3p = \nabla \cdot \mathbf{J}_p \quad (3.19)$$

ただし、次の量を、運動量の流れのテンソルと呼ぶことにする。

$$\mathbf{J}_p = \int \mathbf{v} p f d^3p \quad (3.20)$$

式 (3.19) の $\nabla \cdot \mathbf{J}_p$ がどのような量であるか見積もるために、テンソル \mathbf{J}_p の (i, j) -成分を以下に調べることにする。

$$\begin{aligned} J_{p,ij} &= \int v_i p_j f d^3p \\ &= \int (v_{D,i} + v_{T,i}) m^* (v_{D,j} + v_{T,j}) f d^3p \\ &= \int m^* (v_{D,i} v_{D,j} + v_{T,i} v_{T,j}) f d^3p \\ &= m^* n (\langle v_{D,i} v_{D,j} \rangle + \langle v_{T,i} v_{T,j} \rangle) \end{aligned} \quad (3.21)$$

式 (3.21) の導出の過程において、以下の事実を利用した。まず、 v_D は電界 F に由来し、 v_T は熱力学的エネルギー $k_B T$ に由来すると考え、 v_D と v_T を独立な自由度を持つ物理量と見なし、

$$\int v_{D,i} v_{T,j} f d^3 p = \langle v_{D,i} \rangle \langle v_{T,j} \rangle \quad (3.22)$$

というように、分離可能だとする。また、 $\langle v_T \rangle = 0$ という熱的運動に関する空間的等方性の仮定を使った。ここでさらに、運動エネルギーおよび熱エネルギーのテンソルが、以下に示される性質を持つことを仮定する。

$$\langle v_{D,i} v_{D,j} \rangle = \langle v_{D,i} \rangle \langle v_{D,j} \rangle, \quad (3.23)$$

$$\langle v_{T,i} v_{T,j} \rangle = 0 \quad \text{for } i \neq j \quad (3.24)$$

式 (3.21)、(3.23) および (3.24) より、以下を得る。

$$(\nabla \cdot \mathbf{J}_p)_i = \nabla \cdot (n v_D p_{D,i}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (m^* n \langle v_{T,i}^2 \rangle) \quad (3.25)$$

上式に現れる v_D 、 $p_{D,i}$ は、平均化された物理量で、正しくは、 $\langle v_D \rangle(t, \mathbf{r})$ 、 $\langle p_{D,i} \rangle(t, \mathbf{r})$ と書くべき点に注意する。さらに、ここで、理想気体における熱エネルギーの等分配則を思い起こす。キャリア電子が理想気体のように振る舞うと仮定すると、1 自由度当たり $k_B T/2$ の熱エネルギーを保持することになり、

$$\frac{1}{2} m^* \langle v_{T,i}^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (3.26)$$

が成立する。従って、式 (3.25) は以下のように書き下せる。

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_p = \nabla \cdot (n v_D \mathbf{p}_D) + \nabla (n k_B T) \quad (3.27)$$

上式では、温度 T は、変数 t 、 \mathbf{r} に依存する温度の場合、 $T = T(t, \mathbf{r})$ である点にも注意する。

次に、式 (3.15) の右辺第 2 番目の項について考える。部分積分によって、以下の変形が可能である。

$$\begin{aligned} \int \mathbf{p} (e\mathbf{F} \cdot \nabla_p f) d^3 p &= e\mathbf{F} \cdot \int \nabla_p (\mathbf{p} f) d^3 p - e\mathbf{F} \cdot \int f \nabla_p \mathbf{p} d^3 p \\ &= -e\mathbf{F} \int f d^3 p \\ &= -en\mathbf{F} \end{aligned} \quad (3.28)$$

ただし、上の式の導出では、電界 F が \mathbf{p} に依存しないこと、および、 $\int \nabla_p (\mathbf{p} f) d^3 p$ が境界での表面積分としてゼロに落とせる事実を利用している。

これまでの結果をまとめると、式 (3.15) は次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial}{\partial t} n \mathbf{p}_D = -\nabla \cdot (n v_D \mathbf{p}_D) - \nabla (n k_B T) - en\mathbf{F} + \left(\frac{\partial}{\partial t} (n \mathbf{p}_D) \right)_c \quad (3.29)$$

ただし、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} (n \mathbf{p}_D) \right)_c = \int \mathbf{p} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d^3 p \quad (3.30)$$

としている。式 (3.29) および (3.30) に現れる v_D 、 p_D は、厳密には、平均化された物理量 $\langle v_D \rangle(t, r)$ 、 $\langle p_D \rangle(t, r)$ であり、さらに、 $\langle p_D \rangle = m^* \langle v_D \rangle$ という関係式が成立している。ここで、キャリア電子の平均エネルギー $w(t, r)$ を、式 (3.26) を参考にして、以下のように書くことにする。

$$w = \frac{3}{2}k_B T + \frac{1}{2}m^*v_D^2 \quad (3.31)$$

そこで、式 (3.31) を式 (3.29) に代入して、最終的に以下の形にまとめることにする。

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\mathbf{p}_D) = -\nabla \cdot (n\mathbf{v}_D\mathbf{p}_D) - en\mathbf{F} - \frac{2}{3}\nabla(nw - \frac{1}{2}m^*nv_D^2) + \left(\frac{\partial}{\partial t}(n\mathbf{p}_D)\right)_c \quad (3.32)$$

式 (3.30) および (3.32) が、運動量保存方程式である。

最後に、キャリア電子の平均エネルギー w に関する保存方程式を導出する。式 (3.5) に $\int d^3p w$ を作用させる。その結果、以下の関係式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int w f d^3p = - \int w(\mathbf{v} \cdot \nabla f) d^3p + \int w(e\mathbf{F} \cdot \nabla_p f) d^3p + \int w \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c d^3p \quad (3.33)$$

まず、式 (3.33) の左辺について考える。以下の式によって、キャリア電子の平均エネルギー w が定義されたことになる。

$$\int w f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p = n(t, \mathbf{r})w(t, \mathbf{r}) \quad (3.34)$$

上式の左辺の $w(t, \mathbf{r})$ は、本来、 $\langle w \rangle(t, \mathbf{r})$ と書くべき所だが、混乱が生じない限りにおいて $w(t, \mathbf{r})$ と書くことにする。

次に、式 (3.33) の右辺第 1 番目の項について考える。ここで、二種類の変数 w 、 v が、両方とも r に依存せず、 p にのみ依存することに注意する。変数 v が p にのみ依存することは、式 (3.8) および (3.19) の導出において説明した。変数 w も、

$$w = \frac{m^*}{2}v^2 = \frac{p^2}{2m^*} \quad (3.35)$$

と解釈することで、 p にのみ依存する量と見なすことが可能である。ただし、式 (3.35) において、厳密には、有効質量 m^* は r の関数なのだが、近似として r に依存しない定数と見なした。また、式 (3.35) の w は運動エネルギーと熱エネルギーの和を表していることに注意する。これは、すなわち、式 (3.35) において、 $v = v_D + v_T$ 、および、 $p = p_D + p_T$ と見なすことに相当する。

二つの物理量 w 、 v が r に依存しないことから、式 (3.33) の右辺第 1 番目の項は、次のように書き換え可能となる。

$$\int w(\mathbf{v} \cdot \nabla f) d^3p = \nabla \cdot \mathbf{J}_w, \quad (3.36)$$

$$\mathbf{J}_w = \int \mathbf{v} w f d^3p \quad (3.37)$$

ここで、 \mathbf{J}_w について、以下の手順で詳しく調べることにする。まず、 \mathbf{J}_w を次のように分解する。

$$\mathbf{J}_w = \int (\mathbf{v}_D + \mathbf{v}_T) w f d^3p \quad (3.38)$$

式 (3.38) の v_D に関する部分は、以下のように近似的な書き換えが可能とする。

$$\int v_D w f d^3 p \simeq n(t, \mathbf{r}) \langle v_D \rangle w(t, \mathbf{r}) \quad (3.39)$$

また、式 (3.38) の v_T に関する部分は、次のように変形しておく。

$$\int v_T w f d^3 p = \frac{1}{2} n m^* \langle v^2 v_T \rangle \quad (3.40)$$

ところが、式 (3.40) の $\langle v^2 v_T \rangle$ は、さらに以下の書き換えが可能である。

$$\begin{aligned} \langle v^2 v_T \rangle &= \langle [(\mathbf{v}_D + \mathbf{v}_T) \cdot (\mathbf{v}_D + \mathbf{v}_T)] v_T \rangle \\ &= \langle v_D^2 v_T \rangle + \langle 2(\mathbf{v}_D \cdot \mathbf{v}_T) v_T \rangle + \langle v_T^2 v_T \rangle \end{aligned} \quad (3.41)$$

式 (3.41) の右辺第 1 番目の項は、 v_D は電界 F に由来し、 v_T は熱力学的エネルギー $k_B T$ に由来すると考え、 v_D と v_T は互いに全く独立な物理量と解釈することで、

$$\langle v_D^2 v_T \rangle = \langle v_D^2 \rangle \langle v_T \rangle \quad (3.42)$$

と書き換える。すると、系は熱力学的には空間的等方性を持つという仮定から $\langle v_T \rangle = 0$ を得て、その結果、 $\langle v_D^2 v_T \rangle = 0$ として、落してしまうことが可能である。

式 (3.41) の右辺第 2 番目の項は、次のように変形しておく。

$$\begin{aligned} \langle 2(\mathbf{v}_D \cdot \mathbf{v}_T) v_{T,j} \rangle &= 2 \langle \sum_i v_{D,i} v_{T,i} v_{T,j} \rangle \\ &= 2 \sum_i \langle v_{D,i} \rangle \langle v_{T,i} v_{T,j} \rangle \\ &= 2 \langle v_{D,j} \rangle \langle v_{T,j}^2 \rangle \\ &= 2 \langle v_{D,j} \rangle \frac{k_B T}{m^*} \end{aligned} \quad (3.43)$$

ただし、上の式変形では、 v_D と v_T が独立なこと、さらには、式 (3.24) および (3.26) を使った。

これまでの議論をまとめると、式 (3.38) は最終的に以下のように書き下される。

$$\mathbf{J}_w = n v_D w + v_D n k_B T + n \mathbf{q}, \quad (3.44)$$

ただし、

$$\mathbf{q} = \frac{m^*}{2} \langle v_T^2 v_T \rangle, \quad (3.45)$$

とする。ここで、次の点に注意する。これまでの計算では、熱的運動の等方性を仮定して、 $\langle v_T \rangle = 0$ として来た。それにならえば、明らかに式 (3.45) より、 $\mathbf{q} = 0$ となるべきである。しかし、ここであえて、 $\langle v_T^2 v_T \rangle$ がゼロにならないと仮定する。そうする理由は、式 (3.45) で与えられる熱流量 \mathbf{q} が、半導体中での熱伝導方程式と結び付けることが可能だからである。そして、熱伝導方程式の導入は、シミュレーションの解の安定性に寄与することが経験的に知られている。このような事情から、 \mathbf{q} を意図的に残して、数値計算を行うことにする。

さらに、式 (3.33) の右辺第 2 番目の項について考える。式 (3.12) を導出する際に、電界 F が変数 p に依存しない理由を説明した。この点を思い出して、部分積分によって、以下の書き換えを行う。

$$\begin{aligned}
\int w(e\mathbf{F} \cdot \nabla_p f) d^3p &= e\mathbf{F} \cdot \int \nabla_p(wf) d^3p - e\mathbf{F} \cdot \int f \nabla_p w d^3p \\
&= -e\mathbf{F} \cdot \int f \nabla_p \frac{p^2}{2m^*} d^3p \\
&= -e\mathbf{F} \cdot \int f \frac{\mathbf{p}}{m^*} d^3p \\
&= -e\mathbf{F} \cdot n \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} \\
&= -e\mathbf{F} \cdot n \langle \mathbf{v} \rangle \\
&= -e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_D n
\end{aligned} \tag{3.46}$$

ただし、上記の式変形では、 $\int \nabla_p(wf) d^3p$ が境界での表面積分としてゼロに落とせること、および、 $w = p^2/(2m^*)$ 、さらには式 (3.17) より $\langle \mathbf{p} \rangle = m^* \langle \mathbf{v}_D \rangle$ という関係式を使った。これまでの計算結果をまとめると、以下を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t}(nw) = -\nabla \cdot (n\mathbf{v}_D w + \mathbf{v}_D n k_B T + n\mathbf{q}) - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_D n + \left(\frac{\partial(nw)}{\partial t} \right)_c \tag{3.47}$$

ただし、上式において

$$\left(\frac{\partial(nw)}{\partial t} \right)_c = \int w \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d^3p \tag{3.48}$$

としている。

ここでさらに、式 (3.47) の熱流量 \mathbf{q} に着目する。熱流量 \mathbf{q} は、本来、熱伝導方程式によって定められるべきであり、従って、以下の方程式を追加すべきである。

$$n\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \tag{3.49}$$

ただし、上式の係数 κ は熱伝導率を表しており、Wiedemann-Franz の法則より、以下の形で与えられる。

$$\kappa \simeq \frac{5}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \sigma T = \frac{5k_B^2 n T}{2m^* \nu_p(w)} \tag{3.50}$$

[式 (3.50) の導出の詳細は不明であり、現在調査中である。] 上式の右辺の分母に現れる $\nu_p(w)$ は、運動量緩和レートと呼ばれる量である。運動量緩和レート $\nu_p(w)$ の値の評価方法は、第 4 節および第 10 節で説明される。

式 (3.49) を式 (3.47) の右辺に代入することを考える。そのために、まず、以下の計算を行う。

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_D n k_B T + n\mathbf{q} &= \mathbf{v}_D n k_B T - \kappa \nabla T \\
&= (n\mathbf{v}_D k_B - \kappa \nabla) \frac{2}{3k_B} \left(w - \frac{m^*}{2} v_D^2 \right) \\
&= \frac{2}{3} \left(n\mathbf{v}_D - \frac{\kappa}{k_B} \nabla \right) \left(w - \frac{m^*}{2} v_D^2 \right)
\end{aligned} \tag{3.51}$$

ただし、上の式変形において、式 (3.31) を使っている。

式 (3.51) を式 (3.47) に代入して、最終的に以下を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(nw) &= -\nabla \cdot [n\mathbf{v}_D w + \frac{2}{3}(n\mathbf{v}_D w - \frac{\kappa}{k_B} \nabla)(w - \frac{m^*}{2} v_D^2)] \\ &\quad - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_D n + \left(\frac{\partial(nw)}{\partial t} \right)_c \end{aligned} \quad (3.52)$$

式 (3.48) および (3.52) が、エネルギー保存方程式である。

3.2 バランス方程式

バランス方程式は、式 (3.13)、(3.32)、(3.52) を基にして構成される。ここで言うバランス方程式とは、キャリア電子の平均濃度 $n(t, \mathbf{r})$ 、平均速度 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ 、平均エネルギー $w(t, \mathbf{r})$ の五つの未知の関数を含む連立1次偏微分方程式のことを指す。以下に、その構成方法について説明する。

まず、関数 $n(t, \mathbf{r})$ に関するバランス方程式は、式 (3.13) をそのままの形で利用することが出来る。

次に、関数 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ に関するバランス方程式を求めることにする。式 (3.32) の左辺を、以下のように展開する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(n\mathbf{p}_D) &= n \frac{\partial \mathbf{p}_D}{\partial t} + \mathbf{p}_D \frac{\partial n}{\partial t} \\ &= n \frac{\partial \mathbf{p}_D}{\partial t} + \mathbf{p}_D [-\nabla \cdot (n\mathbf{v}_D) + \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c] \end{aligned} \quad (3.53)$$

ただし、上の式変形において、式 (3.13) が代入されている。さらに、式 (3.53) の右辺第2番目の項を、以下の関係式を使って書き換えることにする。

$$-\nabla \cdot (n\mathbf{v}_D \mathbf{p}_D) = -\mathbf{p}_D \nabla \cdot (n\mathbf{v}_D) - n(\mathbf{v}_D \cdot \nabla) \mathbf{p}_D \quad (3.54)$$

式 (3.32) に、式 (3.53) および (3.54) を代入して、以下を得る。

$$\begin{aligned} &n \frac{\partial \mathbf{p}_D}{\partial t} + n(\mathbf{v}_D \cdot \nabla) \mathbf{p}_D + \mathbf{p}_D \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c \\ &= -en\mathbf{F} - \frac{2}{3} \nabla(nw - \frac{1}{2} m^* n v_D^2) + \left(\frac{\partial}{\partial t}(n\mathbf{p}_D) \right)_c \end{aligned} \quad (3.55)$$

ここで、さらに、以下の関係式が成立すると仮定する。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}(n\mathbf{p}_D) \right)_c = \mathbf{p}_D \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c + n \left(\frac{\partial \mathbf{p}_D}{\partial t} \right)_c \quad (3.56)$$

これにより、式 (3.55) は以下の形にまとめられる。

$$n \frac{\partial \mathbf{p}_D}{\partial t} = -n(\mathbf{v}_D \cdot \nabla) \mathbf{p}_D - en\mathbf{F} - \frac{2}{3} \nabla(nw - \frac{1}{2} m^* n v_D^2) + n \left(\frac{\partial \mathbf{p}_D}{\partial t} \right)_c \quad (3.57)$$

さらに、式 (3.57) に、式 (3.17) の帰結として得られる関係式 $\langle \mathbf{p}_D \rangle = m^* \langle \mathbf{v}_D \rangle$ を代入して、以下を得る。

$$\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} = - \left(\frac{\mathbf{v}_D \cdot \nabla}{m^*} \right) (m^* \mathbf{v}_D) - \frac{e\mathbf{F}}{m^*} - \frac{2}{3nm^*} \nabla (nw - \frac{1}{2} m^* n v_D^2) + \left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} \right)_c \quad (3.58)$$

式 (3.58) を関数 $v(t, r)$ に関するバランス方程式と呼ぶ。なお、式 (3.58) においては、キャリア電子の有効質量 m^* も位置座標 r に依存する関数 $m^*(r)$ として取り扱われていることに注意する。

最後に、関数 $w(t, r)$ に関するバランス方程式を求めることにする。式 (3.52) の左辺を以下のように展開する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(nw)}{\partial t} &= w \frac{\partial n}{\partial t} + n \frac{\partial w}{\partial t} \\ &= n \frac{\partial w}{\partial t} + w [-\nabla \cdot (n\mathbf{v}_D) + \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c] \end{aligned} \quad (3.59)$$

ただし、上の式変形において、式 (3.13) が代入されている。さらに、式 (3.59) の右辺第 2 番目の項を、以下の関係式を使って書き換えることにする。

$$-\nabla \cdot (n\mathbf{v}_D w) = -w \nabla \cdot (n\mathbf{v}_D) - n(\mathbf{v}_D \cdot \nabla)w \quad (3.60)$$

式 (3.52) に、式 (3.59) および (3.60) を代入して以下を得る。

$$\begin{aligned} n \frac{\partial w}{\partial t} &= -w \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c - n(\mathbf{v}_D \cdot \nabla)w - \frac{2}{3} \nabla \cdot [(n\mathbf{v}_D w - \frac{\kappa}{k_B} \nabla)(w - \frac{m^*}{2} v_D^2)] \\ &\quad - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_D n + \left(\frac{\partial(nw)}{\partial t} \right)_c \end{aligned} \quad (3.61)$$

ここで、さらに、以下の関係式が成立すると仮定する。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} (nw) \right)_c = n \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)_c + w \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c \quad (3.62)$$

これにより、式 (3.61) は、以下の形にまとめられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= -(\mathbf{v}_D \cdot \nabla)w - \frac{2}{3n} \nabla \cdot [(n\mathbf{v}_D w - \frac{\kappa}{k_B} \nabla)(w - \frac{m^*}{2} v_D^2)] \\ &\quad - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_D + \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)_c \end{aligned} \quad (3.63)$$

式 (3.63) を、関数 $w(t, r)$ に関するバランス方程式と呼ぶ。

4 衝突項について

第 3.2 節で得られたバランス方程式を改めて、以下に書き下す。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}_D n) + \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_c, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t} = -\left(\frac{\mathbf{v}_D}{m^*} \cdot \nabla\right)(m^* \mathbf{v}_D) - \frac{e\mathbf{F}}{m^*} - \frac{2}{3nm^*} \nabla(nw - \frac{1}{2}m^*nv_D^2) + \left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t}\right)_c, \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} = & -(\mathbf{v}_D \cdot \nabla)w - \frac{2}{3n} \nabla \cdot [(n\mathbf{v}_D w - \frac{\kappa}{k_B} \nabla)(w - \frac{m^*}{2}v_D^2)] \\ & - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_D + \left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)_c \end{aligned} \quad (4.3)$$

上記の連立方程式を解くには、衝突項を定める必要がある。そこで、以下に示す3種類の緩和レートを導入する。

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_c = -\nu_n(w)(n - n_0), \quad (4.4)$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{v}_D}{\partial t}\right)_c = -\nu_p(w)\mathbf{v}_D, \quad (4.5)$$

$$\left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)_c = -\nu_w(w)(w - w_0), \quad (4.6)$$

ただし、上式においては、 n_0 は熱平衡状態での平均キャリア濃度、 w_0 は熱平衡状態でのキャリアの平均熱エネルギーを表している。例えば、 n 型半導体の場合、 N_D を半導体中にドーピングした不純物イオン濃度、 E_C を伝導帯の底の準位、 E_F をフェルミ準位として、 n_0 は以下で与えられる。

$$n_0 = N_D \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right), \quad (4.7)$$

半導体シリコン Si 中にリン P を不純物として添加した場合や、化合物半導体ガリウムヒ素 GaAs 中にシリコン Si を不純物として添加した場合がこれに相当する。一方、 p 型半導体の場合、 N_A を半導体中にドーピングした不純物イオン濃度、 E_V を価電子帯の頂上の準位として、 n_0 は以下で与えられる。

$$n_0 = N_A \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right), \quad (4.8)$$

半導体シリコン Si 中にホウ素 B を不純物として添加した場合や、化合物半導体ガリウムヒ素 GaAs 中にベリリウム Be を不純物として添加した場合がこれに相当する。また、キャリアの平均熱エネルギーは、以下の式で与えられる。

$$w_0 = \frac{3}{2}k_B T \quad (4.9)$$

式(4.4)、(4.5)、(4.6)に現れる $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ は、それぞれ、物理量 $\langle n \rangle$ 、 $\langle p \rangle$ 、 $\langle w \rangle$ の緩和レートと呼ばれる量で、時間の逆数の次元を持つ。式(4.4)、(4.5)、(4.6)は、3種類の衝突項を、それぞれ、3種類の緩和レートに置き換えただけで、物理学理論の表現として、大きな差異は無い。しかし、式(4.4)、(4.5)、(4.6)において、 ν_n 、 ν_p 、 ν_w は、変数 t 、 r には依存せず、平均エネルギー w にのみ依存する関数と見なしている。この処置は、厳密に言えば近似なのだが、この仮定によって、 ν_n 、 ν_p 、 ν_w は非常に計算し易くなる。本仕様書では、 $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ をモンテカルロ法によって計算する方法を採用する。以下に、その説明を行う。

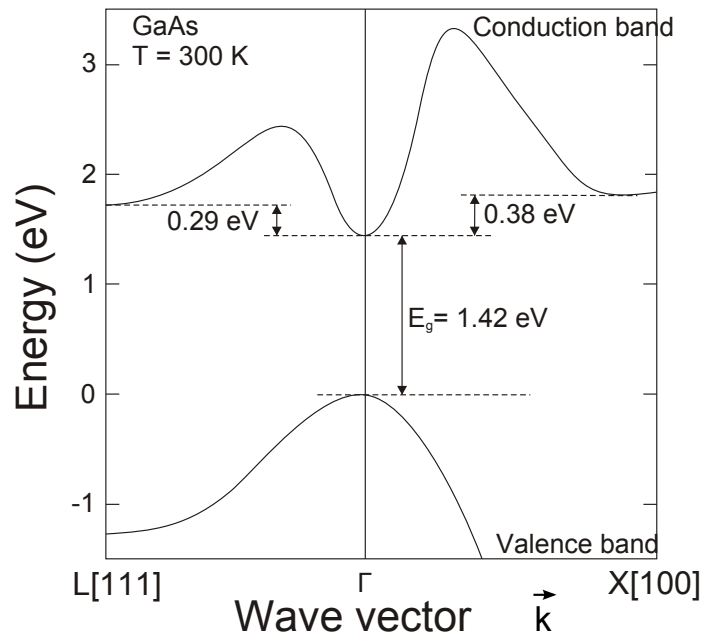


Figure 1: GaAs のバンド構造 (Wikipedia 英語版、“Gallium arsenide”の項目から引用)

あらかじめ散乱確率が求められているとして、この確率に従ってモンテカルロ法で、緩和レート $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ の値を推定することは可能である。この方法の利点は、分布関数 $f(t, r, p)$ の形を厳密に知らなくても、確率論的な手法で $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ の値を推定出来る点にある。

ここで、次の点に注意する。キャリア電子の散乱について議論する場合、以下の二種類に分けて考察すると都合が良い。

- [バンド内散乱]
例えば、伝導帯のエネルギー準位を占めるキャリア電子が、散乱を繰り返しながら、電界の向きに進んで行く状況に相当する。キャリア電子は、散乱を受けても、エネルギーの変化が小さく、伝導帯より上のバンドにも、下のバンドにも遷移しないとす。主として、音響フォノン散乱、不純物イオン散乱が、このような場合に相当する。
- [バンド間散乱]
キャリア電子が、散乱によって二つのバンド間を遷移しながら電界の向きに進んで行く状況に相当する。光学フォノン散乱は、このような現象を引き起こすことが有る。

これより以下、緩和レートを計算する方法を説明する。簡単な例として、GaAs 半導体の Γ 谷と L 谷の間でのバンド間散乱を考える。図 1 を見ると分かるように、GaAs の伝導帯は、単純な放物線では描けず、異なる波数ベクトルで複数の谷が存在する。特に、 Γ 谷の底の準位と L 谷の底の準位エネルギー差は $0.29[\text{eV}]$ で、非有極性光学フォノン散乱によって、バンド間散乱が起こり易い状況にある。以下において、このような場合の $\nu_n(w)$ の求め方の概略を説明する。なお、第 10 節において、緩和レートの数値計算方法について補足説明を行う。

一様な外部電界の印加された半導体を考え、キャリア電子の流れは、定常状態にあるとする。ここで、半導体中のある1個のキャリア電子に注目する。キャリア電子は、一様な外部電界によりドリフト運動を続けながら、散乱を繰り返すことになる。ここで言う散乱とは、前に述べたように、例えば、結晶格子の振動によって発生した光学的準粒子(フォノン)とキャリア電子との散乱、等を想定している。

説明を簡略化するために、今の場合、キャリア電子の存在し得るエネルギーバンドが二つしかなく、それらのバンド端のエネルギー準位が w_1 、 w_2 、ただし、 $w_2 - w_1 > 0$ で与えられているとする。(半導体 GaAs の伝導帯の、 Γ 谷の底の準位を w_1 、L 谷の底の準位を w_2 とすると、理解し易い。) 第1準位エネルギーバンドに属し、全エネルギー、すなわち、運動エネルギーと熱エネルギーの和が w' で与えられるキャリア電子が、単位時間当たり第2エネルギーバンド準位 w_2 に遷移する確率を $W_{12}(w')$ とする。また、逆に、第2準位エネルギーバンドに属する、全エネルギー(すなわち、運動エネルギーと熱エネルギーの和)が w' のキャリア電子が、単位時間当たり第1エネルギーバンド準位 w_1 に遷移する確率を $W_{21}(w')$ とする。

初期状態(時刻 $t = 0$)において、第1準位エネルギーバンドを占めるキャリア電子が時間 τ だけドリフト運動して、その後、第2準位エネルギーバンドに遷移する確率を $P_{12}(\tau)$ とすると、 $P_{12}(\tau)$ は以下の関係式を満たすべきである。

$$P_{12}(0) = W_{12}(w'), \quad P_{12}(+\infty) = 0, \quad P_{12}(\tau + d\tau) = [1 - W_{12}(w')d\tau]P_{12}(\tau) \quad (4.10)$$

式(4.10)は次の微分方程式を意味する。

$$\frac{d}{d\tau}P_{12}(\tau) = -W_{12}(w')P_{12}(\tau) \quad (4.11)$$

従って、上記の微分方程式を解くことにより、

$$P_{12}(\tau) = W_{12}(w') \exp[-\tau W_{12}(w')] \quad (4.12)$$

を得る。

たった今得られた確率を表す関数 $P_{12}(\tau)$ について、以下の関係式に注目する。時刻 $t = 0$ から時刻 $\tilde{t} (> 0)$ までの間に、第1準位エネルギーバンドのキャリア電子が散乱される確率は、以下の式で表される。

$$\begin{aligned} \int_0^{\tilde{t}} P_{12}(\tau) d\tau &= W_{12}(w') \left[\frac{\exp[-\tau W_{12}(w')]}{-W_{12}(w')} \right]_{\tau=0}^{\tau=\tilde{t}} \\ &= 1 - \exp[-\tilde{t} W_{12}(w')] \end{aligned} \quad (4.13)$$

上の式の値は、確率である以上、必ず0と1の間の実数値をとる。その値を $r \in [0, 1]$ とする。すると、

$$r = 1 - \exp[-\tilde{t} W_{12}(w')] \quad (4.14)$$

という関係から、時刻 \tilde{t} について、以下の表式を得る。

$$\tilde{t} = -\frac{\log(1-r)}{W_{12}(w')} \quad (4.15)$$

これらの結果は、モンテカルロ法によるシミュレーション計算において、次のことを意味する。すなわち、区間 $[0, 1]$ において一様乱数 r を発生させ、それに応じて、ドリフト時間 $\tau(r)$ を以下のように定めると良い。

$$\tau(r) = -\frac{\log(1-r)}{W_{12}(w')} \quad (4.16)$$

一様な外部電界 F が印加されている際の第1準位エネルギーバンドに属するキャリア電子のドリフト運動は、以下のように記述される。まず、キャリア電子のハミルトニアンを、

$$H = w_1 + w_0 + E_k - e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4.17)$$

として与える。ただし、 w_0 は熱平衡状態でのキャリアの平均熱エネルギー、 E_k は電子の運動エネルギーである。このとき、 $w' = E_k + w_0$ となる。上式で与えられるハミルトニアン H は、時間変数 t に依存していないので、ドリフト過程において、キャリア電子の全エネルギーは保存される。しかし、波数ベクトル k は以下の変化を受ける。

$$\mathbf{k} \longrightarrow \mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}, \quad \Delta\mathbf{k} = -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar}\tau \quad (4.18)$$

このドリフト運動後、キャリア電子は一定の確率で第2準位エネルギーバンドに遷移する。なお、上記の考察、および、式(4.17)、(4.18)では、 F を外部から印加されている電界とした。これは、本質的には、キャリア電子の一体問題を解いていることに相当する。もし、キャリア電子の多体効果を取り入れたいのであれば、 F を外部電界 F_{ext} と、キャリア分布勾配より引き起される内部電界 F_{int} の和として計算すべきである。ただし、今の段階では、このような複雑な多体効果は無視することにする。

第2準位エネルギーバンドに励起したキャリア電子は、 $(w_2 - w_1)$ に相当する運動エネルギーを失う。これは、第1準位エネルギーバンドに存在するキャリア電子が、ドリフト運動過程によって $(w_2 - w_1)$ より大きな運動エネルギーを持たなければ、第2準位エネルギーバンドに励起不可能であることを意味する。

また、第2準位エネルギーバンドにおいてドリフト運動しているキャリア電子が、第1準位エネルギーバンドに遷移した場合、電子はエネルギー準位差 $(w_2 - w_1)$ に相当する運動エネルギーを得る。このとき、キャリア電子は、大まかに述べると、およそ $|\Delta\mathbf{k}'| \sim \sqrt{2m^*(w_2 - w_1)/\hbar^2}$ という波数ベクトルの変化を獲得する。しかし、キャリア電子の受けるほとんどの相互作用は、空間的等方性を持っており、従って、 $\Delta\mathbf{k}'$ の向きは、多くの場合、完全にランダムと見なすべきである。

以上のことから、外部電界 F によってドリフト運動しているキャリア電子にとって、エネルギーバンド準位間の遷移は、ドリフト運動速度を減少させる抵抗力の効果を持つことが理解される。この減速効果を定量的に記述するのが緩和レートである。

上記の一連の過程において、全体としては、エネルギー保存則が守られていることにも注意する。また、キャリア電子が、第1準位、第2準位のどちらのエネルギーバンドに属しても、平均熱エネルギー w_0 は保持してはならない。よって、キャリア電子のバンド間遷移において、 w_0 は無関係と考えて良い。

以上述べたような確率過程を全時間 T だけ続けたとする。キャリア電子の遷移の様子は、図2のようになるはずである。全ドリフト時間 T の間で、キャリア電子が第1準位工

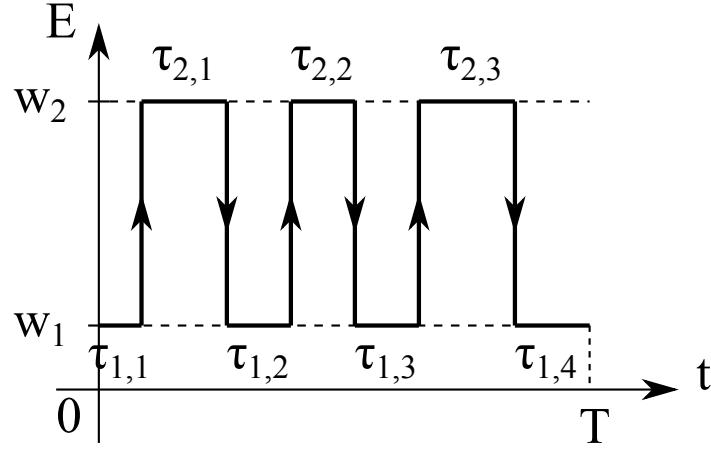


Figure 2: ドリフト運動過程でのキャリア電子の遷移の様子

エネルギーバンドに滞在した時間の合計 T_1 は、以下で与えられる。

$$T_1 = \sum_{i=1}^{n_1+1} \tau_{1,i} \quad (4.19)$$

ただし、 n_1 は、キャリア電子が第 1 準位エネルギーバンドから第 2 準位エネルギーバンドに遷移した回数である。このとき、 $\nu_{n,12}(w)$ は以下の極限で与えられる。

$$\nu_{n,12}(w) = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{n_1}{T_1} \quad (4.20)$$

ただし、 w は、モンテカルロ・シミュレーションによって得られる、キャリア電子の持つ平均運動エネルギーとする。

キャリア電子平均濃度 $n(t, \mathbf{r})$ の緩和レート $\nu_{n,12}(w)$ および $\nu_{n,21}(w)$ がモンテカルロ・シミュレーション法で得られた場合、そのシミュレーション計算過程で得られる結果を利用して、 $\nu_{p,1}(w)$ 、 $\nu_{p,2}(w)$ 、 $\nu_{w,1}(w)$ 、 $\nu_{w,2}(w)$ を求めることが可能となる。それには、以下のようにすると良い。

まず、 $\nu_{p,1}(w)$ の求め方について説明する。平均速度のバランス方程式として、既に式 (4.2) および (4.5) が得られている。今、一様な外部電界の印加されたバルク半導体の定常状態を考えているので、時間微分 $\partial/\partial t$ および空間微分 ∇ の作用している項は、ゼロとして落とせる。従って、以下の方程式を得る。

$$0 = -\frac{e\mathbf{F}}{m^*} - \nu_{p,1}(w)\mathbf{v}_{D,1} \quad (4.21)$$

よって、

$$\nu_{p,1}(w) = \frac{e\mathbf{F}}{m^*\mathbf{v}_{D,1}} \quad (4.22)$$

を得る。式 (4.22) では、分子および分母にベクトル量 \mathbf{F} 、 $\mathbf{v}_{D,1}$ が含まれているため、一般には、このような数式は無意味である。しかし、実際のシミュレーションでは、 \mathbf{F} と $\mathbf{v}_{D,1}$ は互いに平行なベクトルとなり、式 (4.22) は物理的に意味の有る関係式となる。

実は、式 (4.22) で示される $\nu_{p,1}(w)$ は、 $\nu_{n,12}(w)$ および $\nu_{n,21}(w)$ を求める際に行ったモンテカルロ・シミュレーションで同時に算出することが可能である。それには、平均ドリフト速度 v_D が、

$$v_D = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_k}{\Delta k} \quad (4.23)$$

で書き下せることに注目する。キャリア電子が散乱を受けてから、次の散乱を受けるまでの自由にドリフト運動する時間間隔を τ とする。また、ドリフト運動開始時のキャリア電子の運動エネルギーを E_k とする。ドリフト過程での波数ベクトルの変化は、既に、式 (4.18) で与えられることが分かっている。よって、ドリフト運動終了時の運動エネルギーは、

$$E_{k+\Delta k} = \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k})^2}{2m^*} \quad (4.24)$$

で与えられる。よって、

$$\Delta E_k = E_{k+\Delta k} - E_k = \frac{\hbar^2(2\mathbf{k} \cdot \Delta\mathbf{k} + \Delta k^2)}{2m^*} \quad (4.25)$$

および

$$v_D = \frac{\hbar}{2m^*} (2\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \quad (4.26)$$

を得る。式 (4.26) で与えられる v_D が、時間間隔 τ のドリフト運動の間の、平均速度を表すことになる。

なお、次の点にも注意が必要である。キャリア電子の波数ベクトルは、ドリフト運動を時間 τ だけ受けたことによって、 k から $(k + \Delta k)$ に変化している。そこで、さらに散乱を受けることにより、波数ベクトルは k' に変化することになる。第 8 節において、非有極性光学フォノン散乱について詳しく調べるのだが、その結果によれば、

$$|\mathbf{k}'| = \sqrt{\frac{2m^*(E_{k+\Delta k} \pm \hbar\omega_{ij} - \Delta E_{ij})}{\hbar^2}} \quad (4.27)$$

ただし、 $\Delta E_{12}(= \Delta E_{21} = E_L - E_T)$ 、 $\omega_{12}(= \omega_{21})$ はバンド間散乱に寄与する光学フォノンの角周波数となる。光学フォノンの角周波数 ω_{ij} は、結晶格子によって定まる、固定された物理量であることに注意する。複合 \pm は、フォノンの吸収・放出に対応する。例えば、キャリア電子が、フォノンを吸収して、エネルギー準位 w_1 から w_2 に励起するには、 $E_{k+\Delta k} \geq \Delta E_{12} - \hbar\omega_{12}$ を満たす運動エネルギーをキャリア電子が持っている必要が有る。また、 k' の向きは、全くランダムとなる。さらに、バンド間散乱による遷移後のキャリア電子の運動エネルギーは

$$E_{k'} = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}'|^2}{2m^*} \quad (4.28)$$

となる。

モンテカルロ・シミュレーションでは、今度は、キャリア電子がエネルギーバンド準位 w_2 に属しているとして、上記のようにして得られる k' 、 $E_{k'}$ に対して、再度散乱を確率的に発生させることになる。そして、このような過程を何度も繰り返すのである。

時刻 $t = 0$ での波数ベクトルを、 $\mathbf{k}_0 = (0, 0, k_0)$ 、すなわち、時刻 $t = 0$ でのキャリア電子の運動エネルギーを $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / (2m^*)$ とする。この場合、キャリア電子の持つ全エネルギーは、 $w = E_0 + w_0$ で与えられる。(w_0 は熱平衡状態における平均エネルギーを表し

ている。) 準位 w_1 のエネルギーバンド内における、初期状態から数えて i 回目の散乱での自由ドリフト時間を $\tau_{1,i}$ 、そのときの平均速度を $v_{D,1}^{(i)}$ とする。ただし、 $v_{D,1}^{(i)}$ は、式 (4.18) および (4.26) で与えられるものとする。このとき、 $\nu_{p,1}(w)$ は次のようにして求められる。

$$\begin{aligned}\langle v_{D,1} \rangle &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \sum_{i=1}^{n_1+1} \frac{\tau_{1,i}}{T_1} v_{D,1}^{(i)}, \\ \nu_{p,1}(w) &= -\frac{e\mathbf{F}}{m^* \langle v_{D,1} \rangle}\end{aligned}\quad (4.29)$$

ただし、 n_1 はキャリア電子が第 1 準位エネルギーバンドから第 2 準位エネルギーバンドに遷移した回数、 T_1 はシミュレーション時間 T の間にキャリア電子が第 1 準位エネルギーバンドを占める時間の合計、 $\tau_{1,i}$ は図 2 で示されるように i 回目の第 1 準位エネルギーバンドでのドリフト時間を表している。

式 (4.29) を求める際、以下の不都合が生じる可能性が有る。それは、二つのベクトル量 \mathbf{F} と $\langle v_{D,1} \rangle$ が平行でなければ、式 (4.29) は計算不可能という問題である。(ただし、通常、モンテカルロ・シミュレーションにおいて、散乱回数を十分大きく取った場合、 \mathbf{F} と $\langle v_{D,1} \rangle$ は、ほとんど平行になるはずである。) そこで、式 (4.29) を、次のように書き換えるのが有効と考えられる。

$$\begin{aligned}\langle v_{D,1} \rangle_F &= \frac{\langle v_{D,1} \rangle \cdot \mathbf{F}}{|\mathbf{F}|}, \\ \nu_{p,1}(w) &= -\frac{e\mathbf{F}}{m^* \langle v_{D,1} \rangle_F}\end{aligned}\quad (4.30)$$

次に、 $\nu_{w,1}(w)$ について説明する。平均エネルギーのバランス方程式として、既に式 (4.3) および (4.6) が得られている。今、一様な外部電界の印加されたバルク半導体の定常状態を考えているので、時間微分 $\partial/\partial t$ および空間微分 ∇ の作用している項は、ゼロとして落とせる。従って、以下の方程式を得る。

$$0 = -e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_{D,1} - \nu_{w,1}(w)(w - w_0)\quad (4.31)$$

よって、

$$\nu_{w,1}(w) = -\frac{e\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_{D,1}}{w - w_0}\quad (4.32)$$

を得る。

実は、式 (4.32) で示される $\nu_{w,1}(w)$ は、 $\nu_{n,12}(w)$ および $\nu_{n,21}(w)$ を求める際に行ったモンテカルロ・シミュレーションで同時に算出することが可能である。キャリア電子の平均速度 $\langle v_{D,1} \rangle$ は既に式 (4.29) で得られている。また、初期状態から数えて n 回目の散乱におけるキャリア電子の平均エネルギーを、

$$w^{(n)} = \frac{1}{2}(E_{k+\Delta k} + E_k) + w_0\quad (4.33)$$

で近似する。ただし、 E_k 、 $E_{k+\Delta k}$ は式 (4.24) で与えられるキャリア電子の運動エネルギーとする。このとき、キャリア電子の平均エネルギーは以下の式に書き表わされる。

$$\langle w_{DT,1} \rangle = \lim_{T \rightarrow +\infty} \sum_{i=1}^{n_1+1} \frac{\tau_{1,i}}{T_1} w_{DT,1}^{(i)}\quad (4.34)$$

上式で、 $w_{DT,1}^{(i)}$ は、準位 w_1 のエネルギーバンド内における、初期状態から数えて i 回目の散乱でのドリフト時間間隔内での、キャリアの平均エネルギーとする。添え字の DT は、ドリフト運動に由来する運動エネルギーと熱的エネルギーの和であることを表している。よって、

$$\nu_{w,1}(w) = -\frac{e\mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v}_{D,1} \rangle}{\langle w_{DT,1} \rangle - w_0} \quad (4.35)$$

を得る。

さらに、第 11 節で説明される事柄ではあるが、バンド間遷移をバランス方程式で記述する場合、一回の遷移で電子が持ち去る平均エネルギー $w_{12}(w)$ が必要な場合がある。これは、次のようにして算出する。

$$w_{12}(w) = \frac{1}{n_1} \sum_{i=1}^{n_1} E_{k+\Delta k,1}^{(i)} \quad (4.36)$$

ただし、 $E_{k+\Delta k,1}^{(i)}$ は、準位 w_1 のエネルギーバンド内における、初期状態から数えて i 番目の散乱直前の、ドリフト運動による影響 Δk を加えたキャリア電子の運動エネルギーとする。式 (4.36) では、運動エネルギー $E_{k+\Delta k,1}^{(i)}$ が、第 1 準位から第 2 準位に励起する際、全て失われると仮定している。これは、散乱によって、第 2 準位のエネルギーバンドに励起したキャリア電子の波数ベクトル k' の向きはランダムなので、平均すると実質的に全運動エネルギーが失われると見なして差し支えないからである。

最後に、以下の点について考えてみる。これまでの議論から、 $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ をモンテカルロ・シミュレーションで数値計算する際、一様な外部電界 F を仮定した。ここで、 $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ の値が F に依存するのでは、という疑問が生じる。実は、このようにして求められた三種類の緩和レートは、 $|F|$ が極端に大きくならない限り、外部電界 F に依存しない。従って、シミュレーションの際は、 F は自由なベクトル値に設定出来る。その理由は、以下の通りである。

議論を簡単にするため、 $\nu_p(w)$ についてのみ考えることにする。有効質量 m^* 、電荷 e のキャリア電子が、一様な外部電界 $F = (0, 0, F)$ の下で、ドリフト運動に関して定常状態にあるとする。すると、以下の運動方程式が成立すると考えられる。

$$m^* \frac{dv}{dt} + Rv - eF = 0 \quad (4.37)$$

ただし、上式の R は抵抗係数と呼ばれる物理量で、 v に依らず一定の値を取ると考える。式 (4.37) は、粒子に対して速度に比例した抵抗力が生じることを意味する。このような仮定は一般的な経験則に由来する。

式 (4.37) の解は、

$$v = \left(v_0 + \frac{eF}{R}\right) \exp\left(-\frac{R}{m^*}t\right) - \frac{eF}{R} \quad (4.38)$$

で与えられる。式 (4.38) は、緩和レートとして、

$$\nu_p(w) = \frac{R}{m^*} \quad (4.39)$$

を与える。式 (4.39) において、明らかに $\nu_p(w)$ は F に依存しない。このような考察から、緩和レートは一様外部電界 F に依存しないと結論出来る。

5 フェルミの黄金律

第4節で説明したように、緩和レート $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ を求めるには、キャリア電子の散乱による遷移確率を、前もって計算しておく必要が有る。本仕様書では、キャリア電子の遷移確率を評価する方法として、フェルミの黄金律を採用する。それは、時間変数に依存するハミルトニアンについて、1次の摂動論で物理量を近似的に計算することに相当する。

そこでまず初めに、この節で、フェルミの黄金律による遷移確率公式を導出し、第6節以降において、具体的な相互作用を仮定して散乱行列を評価することにする。なお、本仕様書では、以下の三種類の相互作用を取り上げることにする。

- 音響フォノン散乱 (バンド内散乱を引き起す)
- 非有極性光学フォノン散乱 (バンド内散乱、バンド間散乱の両方を引き起す)
- イオン化不純物散乱 (バンド内散乱を引き起す)

上記の三種類の相互作用を取り上げる理由は、一般的な半導体ダイオードのシミュレーションにおいて、これらの相互作用が重要であることが経験的に知られているからである。従って、今後、ユーザーの要望によって、別の異なる相互作用をシミュレーションに組み込む可能性は残っている。

以下に、フェルミの黄金律の導出を説明する。時間変数に依存するハミルトニアンに対して、1次の摂動論で得られる散乱確率の公式を、フェルミの黄金律と呼ぶ。そこで、以下のハミルトニアンが与えられているとする。

$$H = H_0 + H_1 e^{-i\omega t} \quad (5.1)$$

ただし、 H_0 は、自由粒子のハミルトニアン等のように、可解で時間変数に依存せず、さらに、容易に対角化が可能という性質を持っているとする。一方、 $H_1 e^{-i\omega t}$ は相互作用ハミルトニアンを表現しており、時間変数依存性は $e^{-i\omega t}$ で与えられるものとする。

式 (5.1) より、Schrödinger 方程式は以下のように書き下せる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_S = (H_0 + H_1 e^{-i\omega t}) |\psi(t)\rangle_S \quad (5.2)$$

上式において、 $|\psi(t)\rangle_S$ は Schrödinger 表示の波動関数とする。ここで、相互作用表示の波動関数 $|\psi(t)\rangle_I$ を以下のように導入する。

$$|\psi(t)\rangle_I = \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) |\psi(t)\rangle_S \quad (5.3)$$

ただし、上の式では、 $|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_S$ を暗に仮定している。

このとき、以下が成立する。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I &= -H_0 \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) |\psi(t)\rangle_S + \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_S \\ &= -H_0 \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) |\psi(t)\rangle_S + \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) (H_0 + H_1 e^{-i\omega t}) |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{-i\omega t} \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) H_1 |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{-i\omega t} \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) H_1 \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned} \quad (5.4)$$

そこで、相互作用ハミルトニアン H_I を、改めて次のように定義し直して、

$$H_I(t) = \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t)H_1 \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t - i\omega t) \quad (5.5)$$

相互作用表示の波動関数 $|\psi(t)\rangle_I$ の満たすべき微分方程式として以下を得る。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = H_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (5.6)$$

上の微分方程式を形式的に解いて、以下を得る。

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_I(t') |\psi(t')\rangle_I dt' \quad (5.7)$$

上の解に対して、逐次代入を行い、1次の摂動まで考慮することにして、以下を得る。

$$|\psi(t)\rangle_I = [1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_I(t') dt'] |\psi(0)\rangle_I \quad (5.8)$$

上式を Schrödinger 表示に戻すと以下を得る。

$$\exp(i\frac{H_0}{\hbar}t) |\psi(t)\rangle_S = [1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t') H_1 \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t' - i\omega t') dt'] |\psi(0)\rangle_S \quad (5.9)$$

これは、次の形にまとめられる。

$$|\psi(t)\rangle_S = \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t) [1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t') H_1 \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t' - i\omega t') dt'] |\psi(0)\rangle_S \quad (5.10)$$

よって、 $|\psi(0)\rangle_S$ が時刻 t において $|\psi_f\rangle$ に遷移する確率は、以下で与えられる。

$$\begin{aligned} |\langle \psi_f | \psi(t) \rangle_S|^2 &= |\langle \psi_f | \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t) |\psi(0)\rangle_S \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_f | \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t) \int_0^t \exp(i\frac{H_0}{\hbar}t') H_1 \\ &\quad \times \exp(-i\frac{H_0}{\hbar}t' - i\omega t') dt' |\psi(0)\rangle_S|^2 \end{aligned} \quad (5.11)$$

上式より、十分な時間が経過した後の単位時間当たりの遷移率は、次の形で与えられる。

$$T_{i \rightarrow f} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{d}{dt} |\langle \psi_f | \psi(t) \rangle_S|^2 \quad (5.12)$$

遷移率 $T_{i \rightarrow f}$ の、より詳細な形を見るために、以下の計算を実行する。まず、初期状態 $|\psi(0)\rangle_S = |\psi_i\rangle$ 、終状態 $|\psi_f\rangle$ が共に H_0 の固有状態で、それらの固有値を E_i 、 E_f とする。さらに、 $\langle \psi_f | \psi_i \rangle = 0$ を仮定する。以上の仮定の下で、式 (5.12) の内積をより詳細に計算すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} |\langle \psi_f | \psi(t) \rangle_S|^2 &= \left| \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_f | \exp(-i\frac{E_f}{\hbar}t) \int_0^t \exp(i\frac{E_f}{\hbar}t') H_1 \exp(-i\frac{E_i}{\hbar}t' - i\omega t') dt' |\psi_i\rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \left| \exp(-i\frac{E_f}{\hbar}t) \left[\frac{\exp[(i/\hbar)(E_f - \hbar\omega - E_i)t]}{(i/\hbar)(E_f - \hbar\omega - E_i)} \right]_{t'=0}^{t'=t} \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \left| \exp(-i\frac{E_f}{\hbar}t) \frac{e^{i\Omega t} - 1}{i\Omega} \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 (e^{i\Omega t} - 1)(e^{-i\Omega t} - 1) \\ &= \frac{2(1 - \cos \Omega t)}{\hbar^2 \Omega^2} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \end{aligned} \quad (5.13)$$

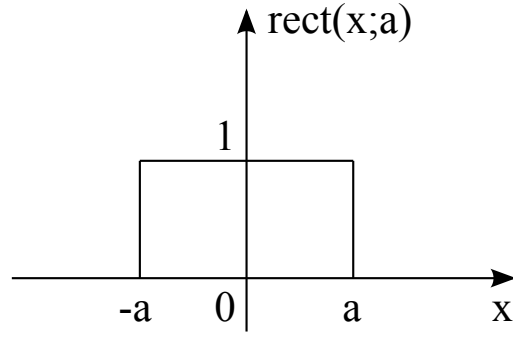


Figure 3: 関数 $\text{rect}(x; a)$ のグラフ

ただし、上式の導出過程において、

$$\Omega = \frac{E_f}{\hbar} - \omega - \frac{E_i}{\hbar} \quad (5.14)$$

とした。

式 (5.13) を式 (5.12) に代入して、以下を得る。

$$\begin{aligned} T_{i \rightarrow f} &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{d}{dt} \left[\frac{2(1 - \cos \Omega t)}{\hbar^2 \Omega^2} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \right] \\ &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{2 \sin \Omega t}{\hbar^2 \Omega} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \end{aligned} \quad (5.15)$$

式 (5.15) は、以下に説明するテクニックを使って、 δ -関数を含む式に変形可能である。

まず、図 3 に示す特別な形をした関数 $\text{rect}(x; a)$ を導入する。

$$\text{rect}(x; a) = \begin{cases} 0 & a < x \\ 1 & -a \leq x \leq a \\ 0 & x < -a \end{cases} \quad (5.16)$$

関数 $\text{rect}(x; a)$ の Fourier 変換は、以下のようにして得られる。

$$\begin{aligned} \widetilde{\text{rect}}(t; a) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi i x t} \text{rect}(x; a) dx \\ &= \int_{-a}^a e^{-2\pi i x t} dx \\ &= \left[\frac{e^{-2\pi i x t}}{-2\pi i t} \right]_{x=-a}^{x=a} \\ &= \frac{\sin(2\pi a t)}{\pi t} \end{aligned} \quad (5.17)$$

上式を逆 Fourier 変換して以下を得る。

$$\begin{aligned} \text{rect}(x; a) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i x t} \widetilde{\text{rect}}(t; a) dt \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i x t} \frac{\sin(2\pi a t)}{\pi t} dt \end{aligned} \quad (5.18)$$

式 (5.18) に $x = 0$ を代入して以下を得る。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(2\pi at)}{\pi t} dt = 1 \quad (5.19)$$

ここで、式 (5.19) の被積分関数 $\sin(2\pi at)/(\pi t)$ に着目する。まず、 $t = 0$ 付近で、以下の関係が成立する。

$$\lim_{t \rightarrow +0} \frac{\sin(2\pi at)}{\pi t} = \lim_{t \rightarrow +0} \frac{2\pi at}{\pi t} = 2a \quad (5.20)$$

その一方で、 $a \rightarrow +\infty$ という極限を取ると、 $t \neq 0$ のとき、 \sin 関数は非常に速く振動して、結局、その寄与はゼロとなる。すなわち、以下の関係式が成立する。

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} \frac{\sin(2\pi at)}{\pi t} = 0 \quad \text{for } t \neq 0 \quad (5.21)$$

上記の三つの関係式 (5.19)、(5.20)、および、(5.21) は、 $\sin(kt)/(\pi t)$ が $k \rightarrow +\infty$ の極限において、 $\delta(t)$ と同じ振舞いを示すことを意味する。そこで、以下の公式を得る。

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\sin(kt)}{\pi t} = \delta(t) \quad (5.22)$$

式 (5.15) に式 (5.22) を代入して、以下を得る。

$$\begin{aligned} T_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \delta(\Omega) |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | H_1 | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \end{aligned} \quad (5.23)$$

ただし、上式の導出では $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$ という関係式を使った。[この関係式は、式 (5.22) より簡単に得られる。] 式 (5.23) が、一般にフェルミの黄金律と呼ばれる公式である。

6 音響フォノンと光学フォノン

半導体中のキャリア電子の散乱を考える際、フォノンの寄与が重要な役割を果たす場合がある。ここで述べるフォノンとは、半導体結晶格子の振動によって生ずる準粒子のことである。格子振動は、波数ベクトル q 、角振動数 ω_q で定まる、様々な波の重ね合わせの形で書き下されるはずである。角振動数 ω_q の波は、そのモード固有の質量ゼロの準粒子と見なすことが可能である。この準粒子をフォノンと呼んでいるのである。半導体中のキャリア電子とフォノンとの散乱を調べる場合、音響フォノンと光学フォノンという二種類のフォノンについて、異なる取り扱いを適用するのが通常である。この節では、音響フォノンと光学フォノンの違いについて説明する。

半導体バルクの格子振動について調べるために、以下の非常に簡略化されたモデルを考える。図4のように、1次元格子に、二種類のイオンが交互に配置されていて、それらがばね定数 g のばねで連結されているとする。1次元の格子は、右向きに正の実数を表す数直線を、定められた格子間隔 a で区切ることで構成される。格子間隔は、 $\dots, n-1, n, n+1, \dots$ というように番号付けされているとする。第 n 番目の格子間隔中には、図4で示すように白丸と黒丸の二種類のイオンが配置されているとする。

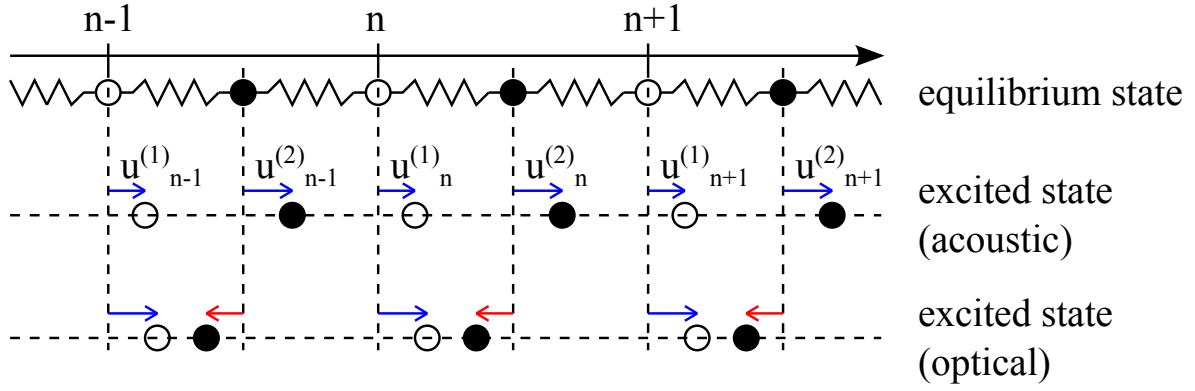


Figure 4: 音響フォノンと光学フォノンの違いを説明するための、1次元ばね格子モデル

安定した平衡状態からのイオンの位置のずれを、 $u_n^{(1)}$ 、 $u_n^{(2)}$ で表すとする。すなわち、第 n 番目の格子間隔中に配置されている第1イオン (白丸) の、平衡状態からの位置のずれを $u_n^{(1)}$ と表し、第 n 番目の格子間隔中に配置されている第2イオン (黒丸) の、平衡状態からの位置のずれを $u_n^{(2)}$ と表わす。全てのイオンは隣接する左右のイオンとばね定数 $g(> 0)$ のばねで連結されているとする。このとき、 n 番目の格子間隔中の第1、および、第2イオンの満たすべき古典力学的な運動方程式は、以下のように書き下される。

$$\begin{aligned} M_1 \frac{d^2}{dt^2} u_n^{(1)} &= -g(u_n^{(1)} - u_{n-1}^{(2)}) + g(u_n^{(2)} - u_n^{(1)}) \\ &= g(u_n^{(2)} - 2u_n^{(1)} + u_{n-1}^{(2)}), \end{aligned} \quad (6.1)$$

$$\begin{aligned} M_2 \frac{d^2}{dt^2} u_n^{(2)} &= -g(u_n^{(2)} - u_n^{(1)}) + g(u_{n+1}^{(1)} - u_n^{(2)}) \\ &= g(u_{n+1}^{(1)} - 2u_n^{(2)} + u_n^{(1)}) \end{aligned} \quad (6.2)$$

ただし、 M_1 、 M_2 は、第1、第2イオンの質量とする。

イオンの変位 $u_n^{(1)}$ 、 $u_n^{(2)}$ を、以下の形に変数分離可能と仮定する。

$$u_n^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{M_1}} u^{(1)}(q) e^{i(qan - \omega t)}, \quad (6.3)$$

$$u_n^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{M_2}} u^{(2)}(q) e^{i(qan - \omega t)} \quad (6.4)$$

ただし、上の式に現れる an は、 n 番目の格子点の位置座標に相当する。式 (6.1)、(6.2) に式 (6.3)、(6.4) を代入して以下を得る。

$$(\omega^2 - \frac{2g}{M_1}) u^{(1)}(q) + \frac{g}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{-iqa}) u^{(2)}(q) = 0, \quad (6.5)$$

$$(\omega^2 - \frac{2g}{M_2}) u^{(2)}(q) + \frac{g}{\sqrt{M_1 M_2}} (1 + e^{iqa}) u^{(1)}(q) = 0 \quad (6.6)$$

式 (6.5)、(6.6) を以下のように一つにまとめる。

$$\begin{pmatrix} \omega^2 - (2g/M_1) & (g/\sqrt{M_1 M_2})(1 + e^{-iqa}) \\ (g/\sqrt{M_1 M_2})(1 + e^{iqa}) & \omega^2 - (2g/M_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{(1)}(q) \\ u^{(2)}(q) \end{pmatrix} = 0 \quad (6.7)$$

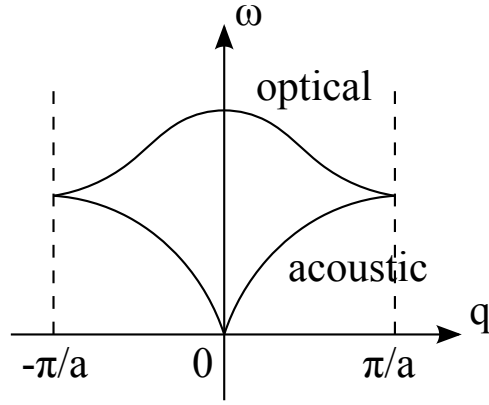


Figure 5: フォノンの分散関係

上式は、左辺の 2×2 行列の行列式がゼロであることを意味する。よって、以下を得る。

$$\omega^4 - 2g\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)\omega^2 + \frac{4g^2}{M_1M_2} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) = 0 \quad (6.8)$$

上式を ω^2 に関する 2 次方程式と見なせば、以下の解が得られる。

$$\omega^2 = g\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm g\sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1M_2} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)} \quad (6.9)$$

角振動数 ω を波数ベクトル q の関数と見なした場合、周期 $2\pi/a$ の周期関数となる。図 5 に示すように、 $q=0$ において $\omega=0$ となるモードを音響フォノン、 $q=0$ において $\omega > 0$ となるモードを光学フォノンと呼ぶ。

音響フォノンでの $q=0$ 、 $\omega=0$ の場合の式 (6.7) は、以下のように書き下せる。

$$\begin{pmatrix} -2g/M_1 & 2g/\sqrt{M_1M_2} \\ 2g/\sqrt{M_1M_2} & -2g/M_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{(1)}(q) \\ u^{(2)}(q) \end{pmatrix} = 0 \quad (6.10)$$

このとき、以下を得る。

$$\begin{pmatrix} u^{(1)}(q) \\ u^{(2)}(q) \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} \sqrt{M_1/M_2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

光学フォノンでの、 $q=0$ 、 $\omega = \sqrt{2g[(1/M_1) + (1/M_2)]}$ の場合の式 (6.7) は、以下のように書き下せる。

$$\begin{pmatrix} 2g/M_2 & 2g/\sqrt{M_1M_2} \\ 2g/\sqrt{M_1M_2} & 2g/M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^{(1)}(q) \\ u^{(2)}(q) \end{pmatrix} = 0 \quad (6.12)$$

このとき、以下を得る。

$$\begin{pmatrix} u^{(1)}(q) \\ u^{(2)}(q) \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} \sqrt{M_2/M_1} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

これらの議論から、図 4 に示すように、音響フォノンは第 1 イオン、第 2 イオンの変位が同じ向き、光学フォノンは第 1 イオン、第 2 イオンの変位が反対の向きであることが分かる。

7 音響フォノン散乱による遷移確率

この節では、音響フォノンと半導体中のキャリア電子の散乱について考察する。第6節での音響フォノン、光学フォノンの説明は、古典力学の範囲内のものであった。しかし、この節では、フェルミの黄金率によって遷移確率を評価することを目的としているので、半古典的量子論による音響フォノンの取り扱いが必要となる。

また、次の点にも注意が必要である。すなわち、音響フォノンは、図5を見ると分かるように、エネルギーが比較的小さな準粒子と見なすことが出来る。従って、通常、音響フォノン散乱を受けたキャリア電子は、バンド準位に留まると考えて良い。キャリア電子が音響フォノンを放出・吸収しても、キャリア電子の運動エネルギーはほとんど変化せず、従って別のエネルギー準位のバンドに移るということは起こらない。これらの点に留意して、以下に議論を進めることにする。

まず、位置座標 r 、時間座標 t で指定されるイオンの、平衡な位置からの変位を $u(r, t)$ で与えることにする。簡単な次元解析より、量子化された $u(r, t)$ は以下の形に書き下すのが適当と分かる。

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} [a_{\mathbf{q}} \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)] + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \exp[-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)]] \quad (7.1)$$

ただし、 $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ は実成分の単位ベクトルで、 $\mathbf{e}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{q} = q$ 、および、 $\mathbf{e}_{-\mathbf{q}} = \mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ を満たすものとする。(従って、 $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ は \mathbf{q} と平行な単位ベクトルとなっている。) さらに、 $\omega_{-\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}}$ とする。また、 ρ は結晶の密度、 Ω は格子の単位結晶の体積とする。さらに、結晶の弾性定数 c_L により、音響フォノンの音速は、

$$v_s = \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{q} = \sqrt{\frac{c_L}{\rho}} \quad (7.2)$$

で与えられるものとする。また、 $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ 、 $a_{\mathbf{q}}$ はフォノンの生成・消滅演算子である。

キャリア電子とフォノンの相互作用ハミルトニアンを導出することを考える。フォノンは、結晶格子の振動によって生じる準粒子である。従って、フォノンと相互作用するキャリア電子のエネルギー変化 E_c は、結晶格子の体積変化に比例するはずである。格子振動による体積変化は、式(7.1)の平衡点からの変位ベクトル \mathbf{u} を使って次のように書ける。空間座標の変位が以下で与えられるので、

$$x \rightarrow \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right)x, \quad y \rightarrow \left(1 + \frac{\partial u_y}{\partial y}\right)y, \quad z \rightarrow \left(1 + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right)z, \quad (7.3)$$

微小体積素の変化は、

$$\left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right)\Delta x \left(1 + \frac{\partial u_y}{\partial y}\right)\Delta y \left(1 + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right)\Delta z - \Delta x \Delta y \Delta z \simeq (\nabla \cdot \mathbf{u}) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (7.4)$$

となる。

従って、キャリア電子のエネルギー E_c の変化は、

$$\Delta E_c = \Xi \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (7.5)$$

で与えられる。(このような格子振動の近似的取り扱い方法を、Bardeen のポテンシャル理論と呼ぶことがある。) 上記の式において、比例定数 Ξ は deformation potential と呼ばれる量で、その値は表1に示す通りである。

Table 1: 様々な半導体の deformation potential の絶対値 $|\Xi|$ を示した表である。単位は [eV] である。

	conduction band	valence band
Si	7.81	1.78
Ge	7.25	1.65
GaAs	6.34	1.65

以上の議論から、相互作用ハミルトニアンは次のように書き下せる。

$$\begin{aligned}
\Xi \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= \Xi \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} i \mathbf{e}_q \cdot \mathbf{q} \\
&\quad \times [a_q \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_q t)] - a_q^\dagger \exp[-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_q t)]] \\
&= \Xi \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} i q \\
&\quad \times [a_q \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_q t)] - a_q^\dagger \exp[-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_q t)]] \\
&= \sum_q [H_1(\mathbf{r}; \mathbf{q}) e^{-i\omega_q t} + H_1^\dagger(\mathbf{r}; \mathbf{q}) e^{i\omega_q t}] \tag{7.6}
\end{aligned}$$

ただし、

$$H_1(\mathbf{r}; \mathbf{q}) = \Xi \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} i q a_q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \tag{7.7}$$

としている。

上式で定義される相互作用ハミルトニアンを、フェルミの黄金律に代入する。まず、初期状態 $|\mathbf{k}, n_q\rangle$ 、終状態 $|\mathbf{k}', n_q - 1\rangle$ という遷移行列要素について考える。これは、図6の示すように、波数ベクトル \mathbf{k} のキャリア電子が、波数ベクトル \mathbf{q} のフォノンを1個吸収し、波数ベクトル \mathbf{k}' のキャリア電子に遷移する過程に相当する。このときの遷移行列要素は、以下のように書き下される。

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}', n_q - 1 | \Xi \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{k}, n_q \rangle &= \langle \mathbf{k}', n_q - 1 | H_1(\mathbf{r}; \mathbf{q}) | \mathbf{k}, n_q \rangle \exp(-i\omega_q t) \\
&= i q \Xi \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \sqrt{n_q} \exp(-i\omega_q t) \tag{7.8}
\end{aligned}$$

ただし、上式の導出において、

$$a_q |n_q\rangle = \sqrt{n_q} |n_q - 1\rangle, \quad a_q^\dagger |n_q\rangle = \sqrt{n_q + 1} |n_q + 1\rangle \tag{7.9}$$

という関係式を使った。

次に、初期状態 $|\mathbf{k}, n_q\rangle$ 、終状態 $|\mathbf{k}', n_q + 1\rangle$ という遷移行列要素について考える。これは、図7の示すように、波数ベクトル \mathbf{k} のキャリア電子が、波数ベクトル \mathbf{q} のフォノンを1個放出し、波数ベクトル \mathbf{k}' のキャリア電子に遷移する過程に相当する。このときの遷移行列要素は、以下のように書き下される。

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}', n_q + 1 | \Xi \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{k}, n_q \rangle &= \langle \mathbf{k}', n_q + 1 | H_1^\dagger(\mathbf{r}; \mathbf{q}) | \mathbf{k}, n_q \rangle \exp(i\omega_q t) \\
&= i q \Xi \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \sqrt{n_q + 1} \exp(i\omega_q t) \tag{7.10}
\end{aligned}$$

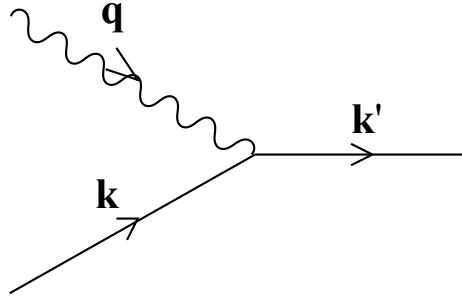


Figure 6: フォノン吸収過程

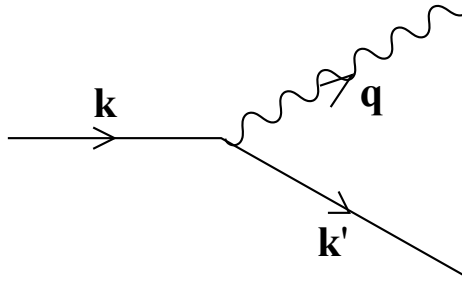


Figure 7: フォノン放出過程

よって、最終的に以下を得る。

$$\begin{aligned}
 T_{i \rightarrow f} &= S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\
 &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{q^2 \Xi^2 \hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}} \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_q)
 \end{aligned} \quad (7.11)$$

上式において、以下の運動量保存則、エネルギー保存則が成立している事に注意する。

$$E_{\mathbf{k}'} = E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_q, \quad (7.12)$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \quad (7.13)$$

式 (7.11) で求められた遷移行列要素 $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ において、終状態を表す波数ベクトル \mathbf{k}' について、全ての場合を足し上げること考える。そのようにして得られた遷移確率 $W(\mathbf{k})$ は、キャリア電子の初期状態の波数ベクトル \mathbf{k} にのみ依存する形にまとめられているので、モンテカルロ法による数値計算において威力を発揮する。そこで、以下に、遷移行列要素 $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ を $\int d^3k'$ によって足し上げる方法について考察する。

まず、半導体伝導帯のエネルギーバンドが放物線形で等方的と仮定する。すると、式 (7.12) のエネルギー保存則は、以下のように書き換えられる。

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_q \quad (7.14)$$

式 (7.14) に式 (7.13) を代入して以下を得る。

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} (k^2 + q^2 \pm 2kq \cos \theta') = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_q \quad (7.15)$$

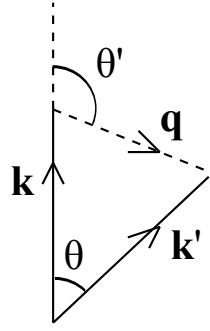


Figure 8: フォノン吸収過程での角度 θ' の定義

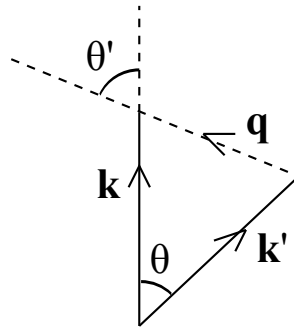


Figure 9: フォノン放出過程での角度 θ' の定義

ただし、角度 θ' の定義は、吸収過程の場合は図 8、放出過程の場合は図 9 の通りとする。
遷移行列 $S(k, k')$ を表現する、式 (7.11) の δ -関数の部分に着目する。式 (7.15) を使えば、この δ -関数の部分を次のように書き換えることが可能である。

$$\delta_{k', k \pm q} \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_q) = \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 k q \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_q\right) \quad (7.16)$$

上式は、 $\cos \theta'$ が次の関係式を満たすことを意味する。

$$\cos \theta' = \frac{1}{2} \left(\mp \frac{q}{k} + \frac{\hbar\omega_q}{E_k} \frac{k}{q} \right) \quad (7.17)$$

ここで、以下の近似を行う。結晶格子の温度を T_L とする。すると、フォノン数 n_q は、Bose-Einstein 統計に従うとして、以下のように見積もることが可能である。

$$n_q = \frac{1}{\exp[\hbar\omega_q / (k_B T_L)] - 1} \quad (7.18)$$

ここで、 $k_B T_L \gg \hbar\omega_q$ を仮定する。このとき、以下の近似が成立する。

$$n_q \simeq \frac{k_B T_L}{\hbar\omega_q} \gg 1, \quad (7.19)$$

$$n_q \simeq n_q + 1 \quad (7.20)$$

よって、式 (7.16) および (7.20) を式 (7.11) に代入して、以下を得る。

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &\simeq \frac{\pi \Xi^2 q^2}{\rho \omega_q \Omega} n_q \frac{k}{2q E_k} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta' \mp \frac{m^* \omega_q}{\hbar k q}\right) \\ &\simeq \frac{\pi \Xi^2 q^2}{\rho \omega_q \Omega} n_q \frac{k}{2q E_k} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta'\right) \end{aligned} \quad (7.21)$$

ただし、上式の導出では、 $\hbar^2 k q / m^* = 2 E_k q / k$ 、および、 $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$ という関係式を使っている。また、今考察しているフォノン音響フォノンであり、その分散関係は図 5 に示されている下半分の曲線であることを思い出す。光学フォノンとの差異を明確にするために、ここでは、 δ -関数内の ω_q を含む項をゼロとして落としている。この処置は、式 (7.20) の近似とつじつまが合っている。式 (7.21) に対して、さらに、式 (7.2) および (7.19) を代入して以下を得る。

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \simeq \frac{\pi \Xi^2 k_B T_L}{\hbar c_L \Omega} \frac{k}{2q E_k} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta'\right) \quad (7.22)$$

上式の複合 \pm は、 $+$ がフォノン吸収、 $-$ がフォノン放出を表している。

式 (7.22) で与えられる $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ に対して $\int d^3 k'$ で足し上げて、遷移確率 $W(\mathbf{k})$ を得ることは、以下に示すように、比較的簡単な積分計算により実行可能である。

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^3 k' \\ &= \frac{\Omega}{8\pi^3} \frac{\pi \Xi^2 k_B T_L}{\hbar c_L \Omega} \frac{k}{2E_k} \int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta'\right) d^3 q \end{aligned} \quad (7.23)$$

式 (7.23) の $\int d^3 q$ の積分に関する部分は、以下の要領で計算される。まず、フォノンの波数ベクトル \mathbf{q} を、極座標表示 (q, θ', ϕ) に変更する。すると、 $d\theta' \sin \theta' = -d(\cos \theta')$ という関係式に注意して、次のように書き換えられる。

$$\int \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta'\right) d^3 q = \int_0^{+\infty} dq \int_{-1}^1 d(\cos \theta') \int_0^{2\pi} d\phi q^2 \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta'\right) \quad (7.24)$$

上式において、 $\int_{-1}^1 d(\cos \theta')$ を実行する場合、明らかに $-1 \leq \cos \theta' \leq 1$ より、 q の積分範囲が $0 \leq q \leq 2k$ に狭められる。よって、上の積分は、最終的に次の形に落ち着く。

$$2\pi \int_0^{2k} q dq = 4\pi k^2 \quad (7.25)$$

従って、式 (7.23) の遷移確率 $W(\mathbf{k})$ は、次の形に書き下せる。

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Xi^2 k_B T_L}{4\pi \hbar c_L} \frac{k^3}{E_k} \quad (7.26)$$

ここで、エネルギー E_k と $E_{k+\Delta k} = E_k + \Delta E$ の間のキャリア電子の状態密度を $N(E_k)$ とする。波数ベクトル \mathbf{k} が 3 次元空間で定義されている場合、エネルギーが E_k 以下の電

子の全準位数 $D(E_k)$ は次で与えられる。

$$\begin{aligned}
 E_k &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \\
 D(E_k) &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k^3 \\
 &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m^* E_k}{\hbar^2} \right)^{3/2} \\
 &= \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m^* E_k}{\hbar^2} \right)^{3/2} \tag{7.27}
 \end{aligned}$$

ただし、上式では電子のスピン自由度を考慮して、 $D(E_k)$ に因子 2 がかけられている点に注意する。また、 V は考察の対象となっている系の全体積を表わしている。よって、状態密度 $N(E_k)$ は

$$\begin{aligned}
 N(E_k) &= \frac{1}{V} \frac{dD(E_k)}{dE_k} \\
 &= \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_k} \tag{7.28}
 \end{aligned}$$

を得る。式 (7.28) を式 (7.26) に代入して以下を得る。

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\Xi^2 k_B T_L}{2\hbar c_L} \pi N(E_k) \tag{7.29}$$

上の遷移確率 $W(\mathbf{k})$ は、フォノンの吸収・放出過程のどちらでも、同じ形の式として与えられることを意味している。そこで、キャリア電子のフォノンによる吸収・放出の二つの過程を合計して、

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi \Xi^2 k_B T_L}{\hbar c_L} N(E_k) \tag{7.30}$$

となる。

ところで、音響フォノン散乱は、等方的な散乱である。従って、モンテカルロ法で散乱後のキャリア電子の波数ベクトル k' を決定する場合、 k' の向きは、全くランダムに取って良い。ここで、半径 1 の原点を中心とする球面上に、 (θ, ϕ) による極座標を設けた場合、微小面素が $\sin \theta d\theta d\phi$ で与えられること、および、 $\sin \theta d\theta = -d(\cos \theta)$ という公式より、 k' の方向は、以下の二つの一様乱数で決定して構わないと分かる。

$$\begin{aligned}
 \forall \phi &\in [0, 2\pi], \\
 \forall \cos \theta &\in [-1, 1] \tag{7.31}
 \end{aligned}$$

最後に、音響フォノン散乱を受けた後のキャリア電子の波数ベクトル k' のノルムは、どのような値になるかについて考察する。これは結局の所、

$$|k'| = |k| \tag{7.32}$$

とすべきである。その理由は、式 (7.21) を導出する際、 δ -関数内の ω_q を含む項をゼロとして落としてしまっているからである。このような処置は、 $\omega_q \simeq 0$ 、すなわち、 $|q| = 0$ という近似を意味し、これは、キャリア電子の波数ベクトルのノルム $|k|$ は、散乱によって変化しないことを意味する。

8 非有極性光学フォノン散乱による遷移確率

この節では、光学フォノンと半導体中のキャリア電子の散乱について考察する。光学フォノン散乱には、非有極性、すなわち、散乱後のキャリア電子の波数ベクトルの分布が等方性を示すものと、有極性、すなわち、散乱後のキャリア電子の波数ベクトルの分布が非等方性を示すものの、二種類に大別される。有極性光学フォノン散乱は、光学フォノンとして伝搬する格子振動の縦波が、化合物半導体中のイオンの分極を引き起こすことにより生じる。この節では、このような複雑な物理現象は取り扱わず、非有極性の場合についてのみ考慮することとする。

ここで、次の点に注意する。第7節において、音響フォノン散乱は、キャリア電子のバンド内散乱を引き起こし、バンド間の遷移には寄与しないと説明した。しかし、光学フォノン散乱においては、図5からも分かるように、比較的大きなエネルギーの吸収・放出が可能であり、キャリア電子のバンド間遷移も可能である。そこで、本節では、最初にバンド内散乱を、そして次に、バンド間散乱を考察することにする。

非有極性光学フォノンによるバンド内散乱の場合の相互作用ハミルトニアンは、半古典的量子論においては、以下の形で与えるのが一般的である。

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}} [a_{\mathbf{q}} \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)] + a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \exp[-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{q}}t)]] \quad (8.1)$$

キャリア電子と光学フォノンの相互作用ハミルトニアンが、式(8.1)で与えられる根拠は次の通りである。キャリア電子-音響フォノン散乱の相互作用ハミルトニアンは式(7.6)で与えられた。しかし、光学フォノンは音響フォノンと異なり、フォノンの波数がゼロ・ベクトルでも正の角振動数 $\omega_{\mathbf{q}}$ を持つ。そこで、式(7.6)の微分作用素 ∇ を、定ベクトル \mathbf{D} で置き換えて、式(8.1)が得られる。

さらに、散乱が等方的であるという仮定を思い起こすと、 $\mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ は、 \mathbf{q} に依存しない定数と見なして良いことになる。そこで、 $\mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}} = D$ (定数) として、相互作用ハミルトニアンを以下のように書き下す。

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} [H_1(\mathbf{r}; \mathbf{q}) e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t} + H_1^{\dagger}(\mathbf{r}; \mathbf{q}) e^{i\omega_{\mathbf{q}}t}] \quad (8.2)$$

ただし、

$$H_1(\mathbf{r}; \mathbf{q}) = D \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (8.3)$$

とする。式(8.3)に現れる定数 D は、optical-phonon deformation potential と呼ばれる物性値で、一般の半導体の伝導帯においては、およそ、 $D = 1.0 \times 10^{11}$ [eV/m] 程度の値を取る。

前の節と同様の計算から、以下の結果を得る。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', n_q - 1 | \mathbf{D} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{k}, n_q \rangle &= \langle \mathbf{k}', n_q - 1 | H_1(\mathbf{r}; \mathbf{q}) | \mathbf{k}, n_q \rangle \exp(-i\omega_{\mathbf{q}}t) \\ &= D \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \sqrt{n_q} \exp(-i\omega_{\mathbf{q}}t), \\ \langle \mathbf{k}', n_q + 1 | \mathbf{D} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) | \mathbf{k}, n_q \rangle &= \langle \mathbf{k}', n_q + 1 | H_1^{\dagger}(\mathbf{r}; \mathbf{q}) | \mathbf{k}, n_q \rangle \exp(i\omega_{\mathbf{q}}t) \\ &= D \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \sqrt{n_q + 1} \exp(i\omega_{\mathbf{q}}t), \end{aligned} \quad (8.4)$$

$$\begin{aligned}
T_{i \rightarrow f} &= S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{D^2 \hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \left(n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}} \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_q)
\end{aligned} \tag{8.5}$$

ここで、以下の近似を導入する。図5で示したフォノンの分散関係のグラフを見ると、光学フォノンにおいては、波数ベクトル q がどのような値を取っても、 ω_q がゼロになることはない。そこで、非常に粗い近似ではあるが、光学フォノン・モードにおいては、 ω_q は q に依らず一定と見なすことにする。すなわち、

$$\omega_q \simeq \omega_0 \quad \forall \mathbf{q} \tag{8.6}$$

とする。このとき、Bose-Einstein 統計の関係式 (7.18) より、

$$n_q \simeq n_0 = \frac{1}{\exp[\hbar\omega_0/(k_B T_L)] - 1} \tag{8.7}$$

が得られる。ここで、次の点に注意する。一般に、光学フォノンのエネルギー $\hbar\omega_0$ は室温の平均熱エネルギー $k_B T$ と同程度になる。そのため、音響フォノンの場合と異なり、散乱は非弾性的となる。式 (8.5) に、式 (8.6)、(8.7)、および、(7.16) を代入して、以下を得る。

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi D^2}{\rho\omega_0\Omega} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_0\right) \tag{8.8}$$

ただし、

$$\cos \theta' = \frac{1}{2} \left(\mp \frac{q}{k} + \frac{\hbar\omega_0 k}{E_k q}\right) \tag{8.9}$$

とする。

そこで、式 (8.8) で与えられる $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ を $\int d^3 k'$ で足し上げて、遷移確率 $W(\mathbf{k})$ を求めることにする。

$$\begin{aligned}
W(\mathbf{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3 k' S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\
&= \frac{D^2}{8\pi^2 \rho\omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \int d^3 q \delta\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq \cos \theta'}{m^*} \mp \hbar\omega_0\right) \\
&= \frac{D^2}{8\pi^2 \rho\omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \frac{2m^*}{\hbar^2} \int d^3 q \delta\left(q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* \omega_0}{\hbar}\right)
\end{aligned} \tag{8.10}$$

式 (8.10) の δ -関数の引数である、次の方程式について考える。

$$q^2 \pm 2kq \cos \theta' \mp \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} = 0 \tag{8.11}$$

上の式を q についての二次方程式と見なすと、その解は、

$$q = \frac{1}{2} \left[-2k \cos \theta' \pm \sqrt{4k^2 \cos^2 \theta' + \frac{8m^* \omega_0}{\hbar}}\right] \tag{8.12}$$

または、

$$q = \frac{1}{2} \left[2k \cos \theta' \pm \sqrt{4k^2 \cos^2 \theta' - \frac{8m^* \omega_0}{\hbar}}\right] \tag{8.13}$$

となる。従って、 $-1 \leq \cos \theta' \leq 1$ を考慮して、

$$\begin{aligned} q_{\min} &= k \left| 1 - \sqrt{1 \pm \frac{\hbar\omega_0}{E_k}} \right|, \\ q_{\max} &= k \left(1 + \sqrt{1 \pm \frac{\hbar\omega_0}{E_k}} \right) \end{aligned} \quad (8.14)$$

を得る。ただし、上の式に含まれる E_k は、式 (7.28) で与えられるものとする。

式 (8.10) の $\int d^3q$ による積分の部分だけを取り出して計算すると、以下ようになる。

$$\begin{aligned} & \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} dq \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta') \int_0^{2\pi} d\phi q^2 \frac{1}{2kq} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta' \mp \frac{\hbar\omega_0}{E_k} \frac{k}{2q}\right) \\ &= \frac{1}{2k} 2\pi \left[\frac{q^2}{2} \right]_{q_{\min}}^{q_{\max}} \\ &= 2\pi k \sqrt{1 \pm \frac{\hbar\omega_0}{E_k}} \\ &= \frac{2\pi k}{\sqrt{E_k}} \sqrt{E_k \pm \hbar\omega_0} \\ &= \frac{2\pi k}{\sqrt{E_k}} 2\pi^2 \hbar^3 \frac{1}{(2m^*)^{3/2}} N(E_k \pm \hbar\omega_0) \\ &= 2\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2 k^2}} \pi k 2\pi^2 \hbar^3 \frac{1}{(2m^*)^{3/2}} N(E_k \pm \hbar\omega_0) \\ &= \frac{2\pi^3 \hbar^2}{m^*} N(E_k \pm \hbar\omega_0) \end{aligned} \quad (8.15)$$

ただし、上式の導出で状態密度の公式 (7.28) を使った。よって、最終的に、遷移確率として以下を得る。

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}) &= \frac{D^2}{8\pi^2 \rho \omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) 4\pi^3 N(E_k \pm \hbar\omega_0) \\ &= \frac{\pi D^2}{2\rho \omega_0} \left(n_0 + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) N(E_k \pm \hbar\omega_0) \end{aligned} \quad (8.16)$$

なお、既に説明したように、非有極性フォノン散乱は、等方的な散乱である。従って、モンテカルル法で散乱後のキャリア電子の波数ベクトル k' を決定する場合、 k' の向きについては、全くランダムに取って良い。すなわち、 k' の方向は、式 (7.31) で与えられる二つの一様乱数で決定して構わない。また、 k' のノルム k' は次のようにして定める。

$$k' = \sqrt{\frac{2m^*(E_k \pm \hbar\omega_0)}{\hbar^2}} \quad (8.17)$$

上式の複号 \pm は、フォノンの吸収・放出を表わしているとする。

次に、非有極性光学フォノンによるバンド間散乱について考えることにする。バンド i からバンド j へキャリア電子が遷移する場合を考える。バンド j の底の準位とバンド i の

底の準位のエネルギー差を ΔE_{ij} とする。また、バンド間散乱に寄与する光学フォノンのエネルギーを $\hbar\omega_{ij}$ とする。

ここで、次の点に注意する。シリコンの価電子帯から伝導帯への遷移には、大きな運動量変化が必要である。これは、シリコンにおいては、価電子帯の頂上と伝導帯の底では、波数ベクトルの大きなずれが有り、直接遷移ではなく間接遷移を必要とするからである。このため、光学フォノンによるバンド間遷移では、図5に示される分散関係に従えば、波数ベクトルの絶対値 $|q|$ を大きくするために、角振動数 ω を小さく取る場合がある。従って、 $\omega_{ij} < \omega_0$ という設定が必要な場合がある。

非有極性光学フォノンによるバンド間散乱の場合の相互作用ハミルトニアンは、式(8.1)とほぼ同じ次の形で与えられる。

$$D_{ij} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (8.18)$$

遷移確率も、式(8.5)とほぼ同じで次の形となる。

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho \omega_{ij} \Omega} \left[n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}_{ij}} \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_{ij} + \Delta E_{ij}) \quad (8.19)$$

ただし、 Z_j は、準位 j の縮退数を表している。最終的に、遷移確率は次の形となる。

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi D_{ij}^2 Z_j}{\rho \omega_{ij}} \left[n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right] N(E_k \pm \hbar\omega_{ij} - \Delta E_{ij}) \quad (8.20)$$

なお、上式において、 $\omega_{ij} = \omega_{ji}$ 、 $\Delta E_{ij} = E_j - E_i = -\Delta E_{ji}$ としていることに注意する。

例えば、GaAs 内の電子が伝導帯の Γ 谷から L 谷へ散乱される場合、以下のパラメータを使うと良い。

$$D_{ij} = 1.0 \times 10^{-11} [\text{eV/m}], \quad \Delta E_{ij} = E_L - E_\Gamma = 1.72 - 1.42 = 0.29 [\text{eV}] \quad (8.21)$$

9 不純物散乱による遷移確率

この節では、n型もしくはp型半導体中にドーパされた不純物イオンとキャリア電子との散乱について考える。実は、本節の後半で示されるのだが、キャリア電子は、不純物散乱過程において、エネルギーが保存される。従って、不純物散乱によってキャリア電子がバンド間を遷移することは起こり得ない。不純物散乱は、キャリア電子のバンド内散乱を記述する。

議論を単純にするため、n型半導体の場合に限って考察を進める。まず、ある1個の不純物イオンを、原点に置かれた正の点電荷 $Ze\delta(\mathbf{r})$ と見なすことにする。原点に正電荷が配置されることにより、キャリア電子の分布に変化が生じる。その様子は、およそ図10のように表わされると考えられる。

今、Si半導体中に、B原子イオンが不純物として混入されていて、その単位体積当たりの不純物イオン濃度が N_D^+ で与えられるとする。B原子イオン1個当たり、1個のキャリア電子が供給されるので、半導体バルク中でのキャリア電子濃度は N_D^+ で与えられることになる。しかし、原点に配置された正電荷 $Ze\delta(\mathbf{r})$ の影響で、原点 $\mathbf{r} = 0$ 付近にキャリア電子が引き付けられることになり、キャリア電子濃度は $n = N_D^+ + \delta n$ というように、もはや半導体バルク中で均一な値ではなくなってしまうはずである。

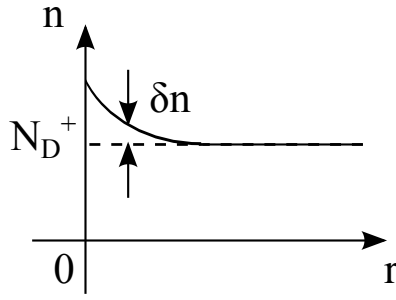


Figure 10: 原点に配置された不純物イオンによる、キャリア電子の分布の変化

上記の考察から、キャリア電子濃度は、次のポアソン方程式に従うと考えられる。

$$\Delta V(r) = -\frac{e}{\epsilon}[Z\delta(r) - \delta n(r)] \quad (9.1)$$

ただし、 ϵ は半導体中の誘電率、 $V(r)$ は遮蔽されたクーロン・ポテンシャルを表わしている。以下に、 $V(r)$ が具体的にどのような形で書き下されるかについて調べる。上の微分方程式に現れる関数は全て $r = |r|$ にのみ依存しているので、演算子 $\Delta = \nabla^2$ は $(1/r^2)(d/dr)[r^2(d/dr)]$ に置き換えて構わない。また、キャリア電子の分布関数 $n(r) = \delta n(r) + N_D^+$ に対して、 $N_D^+ = n_0$ と書くことにして、さらに、

$$n(r) = n_0 \exp\left(\frac{eV(r)}{k_B T}\right) \quad (9.2)$$

と見なすことにする。式 (9.2) はキャリア電子の濃度が古典的な統計力学に従うと仮定したことに相当する。

式 (9.1) を、さらに $eV(r) \ll k_B T$ と仮定して、以下のように近似することにする。

$$\begin{aligned} \delta n(r) &= n(r) - n_0 \\ &= n_0 \left[\exp\left(\frac{eV(r)}{k_B T}\right) - 1 \right] \\ &\simeq \frac{eV(r)}{k_B T} n_0 \end{aligned} \quad (9.3)$$

よって、ポアソン方程式 (9.1) は、以下のように近似される。

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) = q_D^2 V(r) - \frac{Ze}{\epsilon} \delta(r) \quad (9.4)$$

ただし、

$$q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_0}{\epsilon k_B T}} \quad (9.5)$$

とする。式 (9.5) の定数 q_D は、デバイ長の逆数になっている点に注意する。[式 (9.4)、(9.5) での添え字 D は Debye を表わしていて、ドリフト (drift) の意味ではないことに注意する。]

そこで、微分方程式 (9.4) を解いて得られる $V(r)$ がキャリア電子-不純物散乱における相互作用ハミルトニアンを与えると解釈する。式 (9.4) を解くために、以下の二つの公式を利用する。

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} a e^{-br} \right) = \frac{ab^2}{r} e^{-br} \quad (9.6)$$

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta(r) \quad (9.7)$$

式 (9.6) は、実際に計算すれば容易に確かめられる。式 (9.7) は、ポアソン方程式の特解として良く知られている。式 (9.4) と式 (9.6) を見比べると、

$$V(r) = V_0 \frac{a}{r} e^{-qDr} \quad \text{for } r \neq 0 \quad (9.8)$$

を得る。

また、物理的な考察により、

$$\lim_{r \rightarrow +0} \Delta V(r) = -\frac{Ze}{\epsilon} \delta(r) \quad (9.9)$$

が成立すべきである。これは、式 (9.1) の右辺において、 $r \rightarrow +0$ という極限を取った場合、 $\delta(r)$ は無碍大の大きさとなるが、 $\delta n(r)$ は有限の大きさに留まり、そのため、 $\delta(r)$ を残して $\delta n(r)$ を落とすという近似が許されるからである。式 (9.8) を、

$$V(r) \simeq V_0 \frac{a}{r} \quad \text{for } r \neq 0 \quad (9.10)$$

と読み替えて、式 (9.7) に代入すると以下を得る。

$$\Delta V(r) \simeq \Delta V_0 \frac{a}{r} = -4\pi V_0 a \delta(r) \quad (9.11)$$

式 (9.9) と式 (9.11) を見比べて、

$$V_0 a = \frac{Ze}{4\pi\epsilon} \quad (9.12)$$

を得る。以上の議論から、最終的に、

$$V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon} \frac{1}{r} e^{-qDr} \quad (9.13)$$

という、遮蔽されたクーロン・ポテンシャルが得られる。

そこで、摂動ハミルトニアンは、上式の遮蔽されたクーロン・ポテンシャルを参考にして、次のように書き下せる。

$$H_1 = eV(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{r} e^{-qDr} \quad (9.14)$$

よって、遷移行列は、結晶の体積を Ω として、以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | H_1 | \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon} \int_{\Omega} d^3r e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \frac{e^{-qDr}}{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon} 2\pi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr r^2 \sin\theta \frac{e^{-qDr - iqr \cos\theta}}{r}, \end{aligned} \quad (9.15)$$

ただし、 $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ としている。

式 (9.15) の積分を実行するために、以下の公式を準備する。

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{-iqr \cos\theta} &= \left[\frac{e^{-iqr \cos\theta}}{-iqr} \right]_{\theta=0}^{\theta=\pi} \\ &= \frac{2}{qr} \sin(qr) \end{aligned} \quad (9.16)$$

式 (9.16) を式 (9.15) に代入して、以下を得る。

$$\langle \mathbf{k}' | H_1 | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{2\epsilon} \frac{2}{q} \int_0^\infty dr \sin(qr) e^{-qDr} \quad (9.17)$$

式 (9.17) の積分を実行するために、式 (9.5) より得られる $q_D > 0$ という条件に注意して、以下の公式を準備する。

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dr \sin(qr) e^{-qDr} \\ &= \left[-\frac{1}{q} \cos(qr) e^{-qDr} \right]_{r=0}^{r=\infty} - q_D \int_0^\infty dr \frac{1}{q} \cos(qr) e^{-qDr} \\ &= \frac{1}{q} - \frac{q_D}{q} \int_0^\infty dr \cos(qr) e^{-qDr} \\ &= \frac{1}{q} - \frac{q_D}{q} \left(\left[\frac{1}{q} \sin(qr) e^{-qDr} \right]_{r=0}^{r=\infty} + q_D \int_0^\infty dr \frac{1}{q} \sin(qr) e^{-qDr} \right) \\ &= \frac{1}{q} - \left(\frac{q_D}{q} \right)^2 \int_0^\infty dr \sin(qr) e^{-qDr} \\ &= \frac{1}{q} \frac{1}{1 + (q_D/q)^2} \\ &= \frac{q}{q^2 + q_D^2} \end{aligned} \quad (9.18)$$

式 (9.17) に式 (9.18) を代入して以下を得る。

$$\langle \mathbf{k}' | H_1 | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \frac{Ze^2}{\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2 + q_D^2} \quad (9.19)$$

式 (5.23) に、上の結果を代入して、以下の遷移確率を得る。

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{\Omega\epsilon} \right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{(q^2 + q_D^2)^2} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{Ze^2}{\Omega\epsilon} \right)^2 \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}|^2 + q_D^2)^2} \end{aligned} \quad (9.20)$$

上式を見ると、散乱過程において、キャリア粒子の運動エネルギーが保存されること、すなわち、 $k' = k$ であることが理解される。

ところで、図 8、9 のように、二つの波数ベクトル \mathbf{k} と \mathbf{k}' の成す角を θ とすると、

$$q^2 = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) \quad (9.21)$$

を得る。さらに、結晶体積 Ω 内の不純物イオンの個数を $N_I\Omega$ とする。すると、最終的に、遷移確率 $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は、以下の式で与えられることになる。

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \epsilon^2} \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (9.22)$$

そして、散乱レートは、次で与えられることになる。

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k' S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{2\pi N_I Z^2 e^4}{\hbar \Omega \epsilon^2} 2\pi \int_0^\infty dk' \int_0^\pi d\theta k'^2 \sin \theta \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \end{aligned} \quad (9.23)$$

ここで、電子の状態密度 $N(E_k)$ が式 (7.28) で与えられることを思い出す。キャリア電子の運動エネルギーは $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m^*)$ で与えられることに注意して、以下の式変形を行う。

$$\begin{aligned} N(E_k) &= \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_k} \\ &= \left(\frac{2m^*}{\hbar^2 k^2}\right)^{3/2} \sqrt{E_k} k^3 \frac{1}{2\pi^2} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} E_k^{-1} k^3 \end{aligned} \quad (9.24)$$

よって、以下を得る。

$$\begin{aligned} N(E_{k'}) dE_{k'} &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m^*}{\hbar^2 k'^2} k'^3 \frac{\hbar^2 k'}{m^*} dk' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} 8\pi k'^2 dk' \end{aligned} \quad (9.25)$$

式 (9.23) に式 (9.25) を代入して、以下を得る。

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}) &= \frac{\pi N_I Z^2 e^4}{2\hbar \epsilon^2} \int_0^\infty dE_{k'} \int_0^\pi d\theta \sin \theta N(E_{k'}) \frac{\delta(E_{k'} - E_k)}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \\ &= \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{2\hbar \epsilon^2} \int_0^\pi d\theta \frac{\sin \theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \end{aligned} \quad (9.26)$$

上式の変数 θ に関する積分は以下の要領で実行する。まず、 $d(\cos \theta) = -\sin \theta d\theta$ に注意して、

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \frac{\sin \theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} &= \int_{-1}^1 dx \frac{1}{[2k^2(1 - x) + q_D^2]^2} \\ &= \left[\frac{1}{2k^2[2k^2(1 - x) + q_D^2]} \right]_{x=-1}^{x=1} \\ &= \frac{2}{q_D^2(4k^2 + q_D^2)} \end{aligned} \quad (9.27)$$

よって、散乱レートは、最終的に、以下の形に落ち着く。

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon^2} \frac{1}{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)} \quad (9.28)$$

不純物散乱では、散乱角 θ は等方的ではない。その理由は、式 (9.26) の $\int_0^\theta d\theta$ に対する被積分関数 $\sin \theta / [2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2$ が、 $\sin \theta$ を含むことにより、非等方性を生み出すからである。(被積分関数が、変数 θ を $\cos \theta$ の形でしか含まないのであれば、散乱は等方的と言える。) 従って、モンテカルル口法によるシミュレーション計算では、 $W(\mathbf{k})$ の他に、終状態を決めるため、散乱角 θ の情報も必要となる。

キャリア電子が角度 θ と $(\theta + d\theta)$ の間に散乱される確率を $P(\theta)d\theta$ とする。式 (9.26) より、以下を得る。

$$P(\theta)d\theta = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon^2} \frac{\sin \theta d\theta}{[2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]^2} \quad (9.29)$$

角度 $[0, \theta]$ の区間での散乱確率を $W(\theta)$ で表すことにすると、以下を得る。

$$\begin{aligned} \frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})} &= \frac{1}{W(\mathbf{k})} \int_0^\theta d\beta P(\beta) \\ &= -\frac{\tilde{W}}{W(\mathbf{k})} \int_1^{\cos \theta} d\eta \frac{1}{[2k^2(1 - \eta) + q_D^2]^2} \\ &= \frac{\tilde{W}}{W(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2k^2[2k^2(1 - \eta) + q_D^2]} \right]_{\eta=\cos \theta}^{\eta=1} \end{aligned} \quad (9.30)$$

ただし、

$$\tilde{W} = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon^2} \quad (9.31)$$

としている。式 (9.30) は、さらに、以下のように簡単な形に変形出来る。

$$\begin{aligned} \frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})} &= \frac{\tilde{W}}{W(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2k^2 q_D^2} - \frac{1}{2k^2 [2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]} \right] \\ &= \frac{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)}{2} \frac{1}{2k^2 q_D^2 [2k^2(1 - \cos \theta) + q_D^2]} \frac{2k^2(1 - \cos \theta)}{2k^2(1 - \cos \theta)} \\ &= \frac{(1 - \cos \theta)[1 + (2k/q_D)^2]}{2 + (1 - \cos \theta)(2k/q_D)^2} \end{aligned} \quad (9.32)$$

以上の計算結果を利用して、モンテカルル口法を次の手順で実行する。まず、一様乱数 $r \in [0, 1]$ を発生させる。次に、以下の関係式を満たす θ を求める。

$$\frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})} = r \quad (9.33)$$

式 (9.33) は、 $\cos \theta$ を次の式で求めることに相当する。

$$\cos \theta = 1 - \frac{2r}{1 + (1 - r)(2k/q_D)^2} \quad (9.34)$$

また、散乱角 ϕ は、区間 $[0, 2\pi]$ の一様乱数を使って構わない。

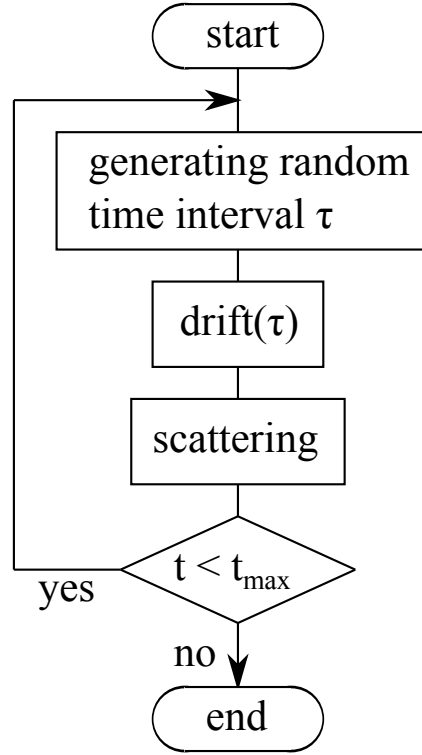


Figure 11: 緩和係数数値計算アルゴリズムのフローチャート

10 緩和係数の数値計算に関する補足説明

第4節において、緩和レート $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ をモンテカルロ・シミュレーションで求める方法の概略を述べた。この節では、緩和レートの数値計算方法 (プログラム) に関して、補足的な説明を行う。プログラムの概要は図11のフローチャートに従うとする。

図11では、シミュレーションを、時刻 $t = 0$ から開始して、時刻 $t = t_{max}$ で終了するように設定されている。関数 $\text{drift}(\tau)$ は、粒子が一定電界の下で、ランダムに決定された飛行時間 τ だけドリフト運動する様子をシミュレートする。関数 scattering は、粒子が、フォノンや不純物イオンによって散乱される様子をシミュレートする。

まず、粒子の飛行時間 τ をランダムに発生させる方法について説明する。粒子の全散乱レート $W_T(E_k)$ を次のように定義する。

$$W_T(E_k) = \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad (10.1)$$

上式の添え字 $j = 1, \dots, N$ は、散乱機構を識別するためのものである。例えば、散乱機構としてバンド内散乱に限り、音響フォノン散乱と不純物散乱を考慮する場合、式 (8.16)、(9.28) より、以下を得る。

$$W_T(E_k) = W_1(E_k) + W_2(E_k), \quad (10.2)$$

$$W_1(\mathbf{k}) = \frac{\pi \Xi^2 k_B T_L}{\hbar c_L} N(E_k),$$

$$W_2(\mathbf{k}) = \frac{\pi N_I Z^2 e^4 N(E_k)}{\hbar \epsilon^2} \frac{1}{q_D^2 (4k^2 + q_D^2)} \quad (10.3)$$

全散乱レート $W_T(E_k)$ を基にして、粒子の飛行時間 τ を確率的に求めなくてはならない。それには、式 (4.10) 以降の議論を思い出せば良い。すなわち、キャリア電子が時間 τ だけドリフト運動して、その後、散乱される確率を $P_T(\tau)$ とすると、

$$P_T(\tau) = W_T(E_k) \exp[-\tau W_T(E_k)] \quad (10.4)$$

を得る。そこで、時刻 $t = 0$ から時刻 $\tilde{t} (> 0)$ までの間にキャリア電子が散乱される確率は、以下のように書き下せる。

$$\int_0^{\tilde{t}} P_T(\tau) d\tau = 1 - \exp[-\tilde{t} W_T(E_k)] \quad (10.5)$$

上の式の値は、確率である以上、必ず 0 と 1 の間の実数を取る。その値を $r \in [0, 1]$ とすると、

$$r = 1 - \exp[-\tilde{t} W_T(E_k)] \quad (10.6)$$

という関係から、時刻 \tilde{t} について、以下の表式を得る。

$$\tilde{t} = -\frac{\log(1-r)}{W_T(E_k)} \quad (10.7)$$

よって、モンテカルロ・シミュレーションにおいては、一様乱数 $r \in [0, 1]$ に対して、ドリフト (飛行) 時間 $\tau(r)$ を次の式で決定すれば良いことになる。

$$\tau(r) = -\frac{\log(1-r)}{W_T(E_k)} \quad (10.8)$$

ドリフト時間 τ が決定したら、式 (4.17)、(4.18)、(4.24)、(4.26) に従って、新たな運動エネルギー $E_{k+\Delta k}$ 、ドリフト時間間隔における平均速度 v_D 等を求める。

次に、キャリア電子を散乱させる手順に移る。今の例では、散乱機構として、音響フォノン散乱と不純物散乱を仮定している。従って、これら二種類の散乱のうち、どちらが働くかを確率的に決めなくてはならない。それには、以下の方法を取れば良い。音響フォノン散乱の散乱レートを $W_1(E_k)$ 、不純物散乱の散乱レートを $W_2(E_k)$ とする。一様乱数 $q \in [0, 1]$ を発生させ、

$$0 \leq q < \frac{W_1(E_k)}{W_1(E_k) + W_2(E_k)} \quad (10.9)$$

の場合は、音響フォノン散乱が生じたと見なし、

$$\frac{W_1(E_k)}{W_1(E_k) + W_2(E_k)} \leq q \leq 1 \quad (10.10)$$

の場合は、不純物散乱が生じたと見なすのである。

キャリア電子が散乱を受けると、その波数ベクトルは $k_1 = k + \Delta k$ から、 k' に変化する。その変化の規則は、第 7、9 節で説明した通りである。今、キャリア電子は半導体中の伝導帯エネルギーバンドに存在していると仮定する。また、キャリア電子の散乱は、バンド内散乱に限られ、キャリア電子は常に伝導帯に留まり、他のエネルギー準位に遷移

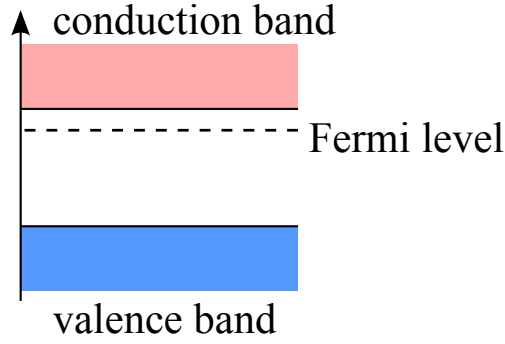


Figure 12: 半導体のバンド構造を示した図である。伝導帯においてキャリア電子が、散乱を繰り返しながら、外部から印加された電界に従って流れているとする。さらに、キャリア電子は、価電子帯の準位に落ち込むことは無いと仮定する。このとき、平均キャリア濃度 $\langle n \rangle(t, \mathbf{r})$ は一定となり、緩和レート $\nu_n(w)$ はゼロとなる。

Table 2: 半導体中でのキャリア電子の有効質量 m^* 、および、キャリア正孔の有効質量 \tilde{m}^* の表である。なお、 m_0 を電子の静止質量としている。

Si 中のキャリア電子	$m^* = 0.33m_0$
Si 中のキャリア正孔	$\tilde{m}^* = 0.52m_0$
GaAs 中のキャリア電子	$m^* = 0.08m_0$
GaAs 中のキャリア正孔	$\tilde{m}^* = 0.5m_0$
Ge 中のキャリア電子	$m^* = 0.55m_0$
Ge 中のキャリア正孔	$\tilde{m}^* = 0.37m_0$

することは無いと仮定する。さらに、熱平衡状態でのキャリア電子の平均エネルギーを、 $w_0 = (3/2)k_B T$ とする。

キャリアは、伝導帯中でドリフト運動すると考える。この場合、キャリアは、価電子帯に落ちることなく、伝導帯で動き回る。従って、平均キャリア濃度 $\langle n \rangle(t, \mathbf{r})$ は一定となり、その緩和レートは常にゼロとなる。すなわち、以下の関係式を得る。

$$\nu_n(w) = 0 \quad \forall w \quad (10.11)$$

しかし、キャリアの平均運動量 $\langle p \rangle(t, \mathbf{r})$ 、平均エネルギー $\langle w \rangle(t, \mathbf{r})$ の緩和レートは、一般にゼロとはならない。

まず、平均運動量の緩和レート $\nu_p(w)$ を求めることにする。これは、式(4.21)から(4.30)にかけての議論により計算可能である。また、平均エネルギーの緩和レートは、式(4.31)から(4.35)にかけての議論により計算可能である。

以上の手順に従えば、バンド内散乱における、緩和レートの計算が可能となる。また、バンド間散乱については、基本的には、第4節の説明に従って計算を進めれば、緩和係数の算出可能である。

なお、以下に、数値計算において必要と思われる物性値をまとめておく。表2は、半導体中のキャリアの有効質量の値をまとめたものである。

11 バランス方程式の数値計算

この節では、半導体デバイスを1次元系と見なして、バランス方程式を数値計算によって解く方法について説明する。なお、これまでの議論は、主としてキャリア電子の輸送現象に関するものであった。しかし、この節では、キャリア正孔の輸送現象についても注意を払うことにする。

系は、座標 (t, x) で記述されるので、式 (4.1) から (4.6) で示された、キャリア電子の満たすべきバランス方程式は、以下のように簡略化される。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(nv) - \nu_n(w)(n - n_0), \quad (11.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{v}{m^*} \frac{\partial}{\partial x}(m^*v) - \frac{2}{3nm^*} \frac{\partial}{\partial x}(nw - \frac{1}{2}m^*nv^2) + \frac{eF}{m^*} - \nu_p(w)v, \quad (11.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} = & -v \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{2}{3n} \frac{\partial}{\partial x} \left[(nv - \frac{\kappa}{k_B} \frac{\partial}{\partial x})(w - \frac{m^*}{2}v^2) \right] \\ & + eFv - \nu_w(w)(w - w_0). \end{aligned} \quad (11.3)$$

なお、上記の連立方程式に現れる関数 $w(t, x)$ は、キャリア電子の運動エネルギーと熱エネルギーの和を平均化したものであることに注意する。

ある一つのエネルギーバンド (例えば伝導帯) 内において、キャリア電子が散乱を繰り返しながら移動する様子を調べるには、式 (11.1)、(11.2)、(11.3) で十分である。しかし、キャリア電子が二つのエネルギーバンド 1 および 2 間を、散乱によって遷移しながら移動する場合、以下の変更が必要となる。

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(n_i v_i) + \left(\frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_c, \quad (11.4)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -\frac{v_i}{m_i^*} \frac{\partial}{\partial x}(m_i^* v_i) - \frac{2}{3n_i m_i^*} \frac{\partial}{\partial x}(n_i w_i - \frac{1}{2}m_i^* n_i v_i^2) + \frac{eF}{m_i^*} + \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} \right)_c, \quad (11.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_i}{\partial t} = & -v_i \frac{\partial w_i}{\partial x} - \frac{2}{3n_i} \frac{\partial}{\partial x} \left[(n_i v_i - \frac{\kappa_i}{k_B} \frac{\partial}{\partial x})(w_i - \frac{m_i^*}{2}v_i^2) \right] + eFv_i \\ & + \left(\frac{\partial w_i}{\partial t} \right)_c, \end{aligned} \quad (11.6)$$

$$\left(\frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_c = -\nu_{n,ij}(w_i)(n_i - n_0) + \nu_{n,ji}(w_j)(n_j - n_0), \quad (11.7)$$

$$\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} \right)_c = -[\nu_{p,i}(w_i) + \nu_{n,ij}(w_i)]v_i, \quad (11.8)$$

$$\left(\frac{\partial w_1}{\partial t} \right)_c = -\nu_{w,1}(w_1)(w_1 - w_0) + \frac{w_{12}(w_1)}{n_1} \left(\frac{\partial n_1}{\partial t} \right)_c, \quad (11.9)$$

$$\left(\frac{\partial w_2}{\partial t} \right)_c = -\nu_{w,2}(w_2)(w_2 - w_0). \quad (11.10)$$

上の連立方程式においては、添え字 i, j は、エネルギーバンド 1, 2 を表している。また、 $w_{12}(w_1)$ は、一回の遷移で電子が持ち去る平均エネルギーを表している。式 (11.8) の右辺

第2項は、キャリア電子がバンド間を遷移する際に持ち去る運動量を考慮したものである。式(11.9)の右辺第2項も、キャリア電子が第1準位エネルギーバンドから第2準位エネルギーバンドに励起する際に持ち去るエネルギーを考慮したものである。

式(11.1)で現れる n_0 は、熱平衡状態における、伝導帯に属するキャリア電子の平均濃度を表すものとする。ドナーあるいはアクセプターが添加されていない中性の半導体では、キャリア電子の熱平衡状態における平均濃度 n_0 は、以下で与えられる。

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \quad (11.11)$$

ただし、

$$N_C = 2\left(\frac{m^* k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \quad (11.12)$$

また、 E_C は伝導帯の最低エネルギー準位、 E_F はフェルミ準位とする。式(11.3)で現れる w_0 は、熱平衡状態にあるキャリア電子の平均熱エネルギーで、

$$w_0 = \frac{3}{2} k_B T \quad (11.13)$$

で与えられる。さらに、式(11.3)で現れる熱伝導率 κ は、式(3.50)で与えられるものとする。

式(11.11)、(11.12)で示される n_0 の導出方法を、ここで簡単に説明しておく。伝導帯のエネルギー E と $(E + dE)$ の間に存在するキャリア電子の状態密度を $g_C(E)dE$ とする。また、キャリア電子のフェルミ分布関数を $f(E)$ とする。このとき、

$$n_0 = \int_{E_C}^{\infty} g_C(E) f(E) dE \quad (11.14)$$

と書き下される。式(7.28)より、 $g_C(E)$ は次の式で与えられると分かる。

$$g_C(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad \text{for } E > E_C \quad (11.15)$$

フェルミ分布関数 $f(E)$ は、以下で与えられる。

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F)/(k_B T)]} \quad (11.16)$$

よって、

$$\begin{aligned} n_0 &= \int_{E_C}^{\infty} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F)/(k_B T)]} dE \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{E}}{1 + \exp[(E + E_C - E_F)/(k_B T)]} dE \end{aligned} \quad (11.17)$$

を得る。

ここで、次の変数変換を行う。

$$x = \frac{E}{k_B T}, \quad x_{CF} = \frac{E_C - E_F}{k_B T} \quad (11.18)$$

これにより、式 (11.17) は次のように書き換えられる。

$$n_0 = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{1 + \exp(x + x_{CF})} dx \quad (11.19)$$

上式 (11.19) を見ると、 $x_{CF} > 2$ のとき、被積分関数の分母において $1 \ll \exp(x + x_{CF})$ としても、十分良い近似となる。そして、ほとんどの半導体において、常温で $x_{CF} > 2$ が成立する。そこで、式 (11.19) を以下のように近似しても構わない。

$$n_0 \simeq \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \sqrt{x} \exp(-x - x_{CF}) dx \quad (11.20)$$

ここで、 Γ 関数についての以下の性質を思い出す。

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1} e^{-x} dx \quad (\text{Re } z > 0), \quad (11.21)$$

$$\int_0^\infty \sqrt{x} e^{-x} dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (11.22)$$

そこで、式 (11.22) を式 (11.20) に代入して、式 (11.11)、(11.12) を得る。

なお、中性の半導体の、熱平衡状態におけるキャリア正孔の平均濃度 \tilde{n}_0 は、式 (11.11)、(11.12) を参考にして、以下で与えられる。

$$\tilde{n}_0 = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad (11.23)$$

ただし、

$$N_V = 2 \left(\frac{\tilde{m}^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (11.24)$$

E_V は価電子帯の最高エネルギー準位とする。なお、これより、キャリア正孔の物理量に対しては、“ \sim ” の記号を添えて、キャリア電子のそれと明示的に区別することにする。

式 (11.23)、(11.24) の導出方法は以下の通りである。価電子帯のエネルギー E と $(E + dE)$ の間に存在するキャリア正孔の状態密度を $g_V(E)dE$ とする。また、キャリア電子のフェルミ分布関数を $f(E)$ とする。このとき、

$$\tilde{n}_0 = \int_{-\infty}^{E_V} g_V(E) [1 - f(E)] dE \quad (11.25)$$

と書き下される。式 (7.28) より、 $g_V(E)$ は次の式で与えられると分かる。

$$g_V(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\tilde{m}^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_V - E)^{1/2} \quad \text{for } E < E_V \quad (11.26)$$

以上の準備の後、式 (11.17) から (11.22) にかけてと同様の議論により、式 (11.23)、(11.24) が得られる。

ここで、半導体中のキャリア濃度に関して一般的に成立する法則を挙げておく。熱平衡状態にあるキャリア電子平均濃度 n_0 とキャリア正孔平均濃度 \tilde{n}_0 の積を計算すると、以下が得られる。

$$\begin{aligned} n_0 \tilde{n}_0 &= 4 \left(\frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \left(\frac{\tilde{m}^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \\ &= 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m^* \tilde{m}^*)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{k_B T}\right) \\ &\equiv n_i^2 \end{aligned} \quad (11.27)$$

上式において、 $(E_C - E_V)$ はバンド・ギャップに相当する。上式を見ると、 n_0 と \tilde{n}_0 の積は、温度 T にのみ依存する量であると分かる。実はこの関係は、中性半導体だけでなく、p型、n型半導体の全てにおいて成立する。そこで、式(11.27)で定義される n_i^2 は、熱平衡状態にあるキャリア電子平均濃度とキャリア正孔平均濃度の積を与える公式と見なして構わない。

式(11.27)で定義される n_i^2 を使うと、n型半導体、p型半導体の、熱平衡状態におけるキャリア平均濃度を求めることが可能となる。まず、n型半導体の場合について考える。n型半導体に添加された不純物ドナー濃度を N_D とする。このとき、キャリア電子平均濃度 n_0 は、式(11.11)、(11.12)を参考にして、

$$n_0 = N_D \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \quad (11.28)$$

で与えられる。すると、キャリア正孔平均濃度 \tilde{n}_0 は、 n_i^2 を使って、

$$\tilde{n}_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \frac{n_i^2}{N_D} \exp\left(\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \quad (11.29)$$

という形で得られる。一方、p型半導体の場合は、添加された不純物アクセプター濃度を N_A として、キャリア正孔平均濃度 \tilde{n}_0 は、

$$\tilde{n}_0 = N_A \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad (11.30)$$

で与えられる。従って、キャリア電子平均濃度 n_0 は、 n_i^2 を使って、

$$n_0 = \frac{n_i^2}{\tilde{n}_0} = \frac{n_i^2}{N_A} \exp\left(\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad (11.31)$$

となる。

式(11.1)、(11.2)、(11.3)の連立方程式において、 $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ は、既にモンテカルロ・シミュレーションによって計算されていると仮定する。これは、 $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ の値が、データベースとして保管されていて、 w の値を指定すれば、それに応じて、 $\nu_n(w)$ 、 $\nu_p(w)$ 、 $\nu_w(w)$ の値を取り出せることを意味する。式(11.1)、(11.2)、(11.3)の連立方程式において、未知の関数は $n(t, x)$ 、 $v(t, x)$ 、 $w(t, x)$ の三つである。そして、この三つの関数の数値解を求めるのが、本節の目的である。

ここで、次の問題が生じる。それは、電界 $F(t, x)$ をどのようにして得るかが未定である、という点である。そこで、ここでは、 $F(t, x)$ を、次のように、内部電界 F_{int} と外部電界 F_{ext} に分離することを考える。

$$F(t, x) = F_{int}(t, x) + F_{ext}(t, x) \quad (11.32)$$

Table 3: 各種半導体の電子親和力 χ 、金属の仕事関数 ϕ_m の表である。電子親和力 χ とは、半導体における、伝導体の底の準位 E_C と真空のエネルギー準位との電位差のことである。金属の場合、これに相当するものとして、フェルミ準位 E_F と真空準位との電位差である仕事関数 ϕ_m が考えられる。

Si, n-Si	$\chi = 4.05[\text{eV}]$
GaAs	$\chi = 4.07[\text{eV}]$
AlAs	$\chi = 3.5[\text{eV}]$
SiO ₂	$\chi = 0.95[\text{eV}]$
Al	$\phi_m = 4.1[\text{eV}]$
Au	$\phi_m = 4.8[\text{eV}]$
Pt	$\phi_m = 6.3[\text{eV}]$
Cu	$\phi_m = 4.18[\text{eV}]$
Ni	$\phi_m = 4.01[\text{eV}]$

外部電界 F_{ext} は、初期条件として与えられるものとする。特に、今の場合、 F_{ext} は、半導体デバイスに印加される外部電圧 V_{ext} によって引き起こされると考え、

$$F_{ext}(t, x) = \frac{V_{ext}(t)}{L}, \quad (11.33)$$

ただし、 L はデバイスの x 方向の長さとする。また、外部電圧 $V_{ext}(t)$ は、時間変数 t に関して、十分ゆっくりと変化すると仮定する。従って、 $V_{ext}(t)$ の急激な変化によって電磁場が発生することはないと仮定する。

一方、内部電界 F_{int} は、バランス方程式に加えて、次のポアソン方程式を連立させて解くことで得られる。

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{e}{\epsilon}(N_D - n - N_A + \tilde{n}) = 0. \quad (11.34)$$

ただし、 N_D は半導体中にドナーとして添加された不純物イオン濃度、 N_A は半導体中にアクセプターとして添加された不純物イオン濃度とする。また、 $\tilde{n} = \tilde{n}(t, x)$ は、キャリア正孔の平均濃度を表しているとする。この関数 \tilde{n} の値は、式 (11.27) の結果を使って、 $\tilde{n}(t, x) = n_i^2/n(t, x)$ により求めることが出来るとする。さらに、 $F_{int}(t, x)$ は、次のようにして $\varphi(t, x)$ から導出されるものとする。

$$F_{int}(t, x) = \frac{\partial}{\partial x} \varphi(t, x) + \frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial x} \chi(x), \quad (11.35)$$

ただし、 $\chi(x)$ は電子親和力と呼ばれる量で、半導体の種類毎に決まっているものとする。半導体材料の組成が空間的に均一でない場合、この $\chi(x)$ を含む項は有効となる。(厳密には、電子親和力 χ は、伝導帯の底の準位 E_C と真空のレベルとの電位差を表す。表 3 に、様々な半導体の電子親和力 χ 、および、金属の仕事関数 ϕ_m を与えておく。)

以上の考察から、電界 $F(t, x)$ は、次の形で与えられる。

$$F(t, x) = \frac{\partial}{\partial x} \varphi(t, x) + \frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial x} \chi(x) + \frac{V_{ext}(t)}{L} \quad (11.36)$$

これより、バランス方程式およびポアソン方程式を、差分方程式に書き換えて数値計算で解く方法について説明する。まず、デバイスを x 軸方向に等間隔 Δx で分割し、 x_0, x_1, \dots, x_N という一次元格子を用意する。また、時間変数 t は Δt によって離散化されているとする。時刻 t の物理量に対しては添え字を付けず、時刻 $(t + \Delta t)$ の物理量には、右肩に f という添え字を付けるとする。例えば、

$$\begin{aligned} n_j &= n(t, x_j) = n(t, j\Delta x), \\ n_j^f &= n(t + \Delta t, x_j) = n(t + \Delta t, j\Delta x), \end{aligned} \quad (11.37)$$

というように、関数を表現することにする。

キャリア電子のバランス方程式である、式 (11.1)、(11.2)、(11.3) を、以下の連立差分方程式の形に書き下す。

$$\frac{n_j^f - n_j}{\Delta t} = -v_j \frac{n_{j+1} - n_{j-1}}{2\Delta x} - n_j \frac{v_{j+1} - v_{j-1}}{2\Delta x} - \nu_n^\alpha(w_j)(n_j - n_0^\alpha), \quad (11.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{v_j^f - v_j}{\Delta t} &= -\frac{v_j}{m_j^*} \frac{m_{j+1}^* v_{j+1} - m_{j-1}^* v_{j-1}}{2\Delta x} \\ &\quad - \frac{2}{3n_j m_j^*} \frac{1}{2\Delta x} \left[n_{j+1} (w_{j+1} - \frac{m_{j+1}^*}{2} v_{j+1}^2) - n_{j-1} (w_{j-1} - \frac{m_{j-1}^*}{2} v_{j-1}^2) \right] \\ &\quad + \frac{eF_j}{m_j^*} - \nu_p^\alpha(w_j) v_j, \end{aligned} \quad (11.39)$$

$$\begin{aligned} \frac{w_j^f - w_j}{\Delta t} &= -v_j \frac{w_{j+1} - w_{j-1}}{2\Delta x} \\ &\quad - \frac{2}{3n_j} \frac{1}{2\Delta x} \left[n_{j+1} v_{j+1} (w_{j+1} - \frac{m_{j+1}^*}{2} v_{j+1}^2) - n_{j-1} v_{j-1} (w_{j-1} - \frac{m_{j-1}^*}{2} v_{j-1}^2) \right] \\ &\quad + \frac{2\kappa_j}{3n_j k_B \Delta x^2} \left[(w_{j+1} - \frac{m_{j+1}^*}{2} v_{j+1}^2) - 2(w_j - \frac{m_j^*}{2} v_j^2) + (w_{j-1} - \frac{m_{j-1}^*}{2} v_{j-1}^2) \right] \\ &\quad + eF_j v_j - \nu_w^\alpha(w_j)(w_j - w_0). \end{aligned} \quad (11.40)$$

上の三つの差分方程式に現れるいくつかの記号について、以下に説明する。まず、緩和係数 $\nu_n^\alpha(w_j)$ 、 $\nu_p^\alpha(w_j)$ 、 $\nu_w^\alpha(w_j)$ の添え字 α は半導体の種類を表している。これは、 j 番目の格子付近の半導体の組成に応じて、これら三つの緩和係数の値をデータベースに対して参照することを意味する。有効質量 m_j^* の添え字 j は、 j 番目の格子付近の半導体の組成に応じた有効質量の値を代入することを表している。熱伝導率 κ_j は、次のようにして与える。

$$\kappa_j = \frac{5k_B^2 n_j T}{2m_j^* \nu_p^\alpha(w_j)} \quad (11.41)$$

ポアソン方程式 (11.34) は、以下のように差分化する。

$$\frac{\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}}{\Delta x^2} + \frac{e}{\epsilon} (N_{D,j} - n_j - N_{A,j} + \frac{n_i^2}{n_j}) = 0 \quad (11.42)$$

電界 F_j は、次の差分化された式で与えられる。

$$F_j = \frac{\varphi_{j+1} - \varphi_{j-1}}{2\Delta x} + \frac{1}{e} \frac{\chi_{j+1} - \chi_{j-1}}{2\Delta x} + \frac{V_{ext}}{L} \quad (11.43)$$

上の式で、 χ_j は j 番目の格子における半導体の材質に応じた電子親和力の値を代入する。
 差分化されたバランス方程式、および、ポアソン方程式を見ると、

$$n_j^f, v_j^f, w_j^f \quad \text{for } j = 0, 1, \dots, N \quad (11.44)$$

は、

$$n_j, v_j, w_j \quad \text{for } j = 0, 1, \dots, N \quad (11.45)$$

から計算可能と分かる。従って、バランス方程式については、初期状態として n_j, v_j, w_j を与えれば、1時間ステップ Δt 毎に、 n_j^f, v_j^f, w_j^f が計算可能である。解の安定性を保証するには、

$$|v_j|\Delta t \leq \Delta x, \quad \forall j \quad (11.46)$$

という条件を課すべきである。

ここで、次の点に注意する。ポテンシャル φ_j は、差分化されたポアソン方程式 (11.42) を解くことによって得られる。そして、式 (11.42) を解くには、キャリア電子濃度 n_j とキャリア正孔濃度 \tilde{n}_j の両方の値が既知でなくてはならない。このことは、キャリア電子のバランス方程式、キャリア正孔のバランス方程式、および、ポアソン方程式を、同じ時間ステップで逐次的に解かなくてはならないことを意味する。この意味で、キャリア電子とキャリア正孔は互いに相互作用しながら時間発展する。

差分化されたポアソン方程式を解くには、以下の工夫が必要である。差分方程式 (11.42) を解くということは、次の連立一次方程式を解くことと同値である。

$$A\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad (11.47)$$

ただし、

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & & \vdots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & & & \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \ddots & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & & & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad (11.48)$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}, \quad (11.49)$$

$$\mathbf{y} = \frac{e\Delta x^2}{\epsilon} \begin{pmatrix} N_{D,0} - n_0 - N_{A,0} + \tilde{n}_0 \\ N_{D,1} - n_1 - N_{A,1} + \tilde{n}_1 \\ \vdots \\ N_{D,N} - n_N - N_{A,N} + \tilde{n}_N \end{pmatrix}, \quad (11.50)$$

$$\tilde{n}_j = \frac{n_i^2}{n_j} \quad \text{for } j = 1, \dots, N \quad (11.51)$$

とする。

三重対角行列 A は、以下のように下三角行列 L と上三角行列 U の積に分解可能である。

$$A = LU \quad (11.52)$$

ただし、

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & & & & & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & & & & & & \vdots \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 & 0 & & & & & & \\ 0 & 0 & -\frac{3}{4} & 1 & \ddots & & & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & \ddots & 1 & 0 & 0 & & \\ & & & & & -\frac{N-1}{N} & 1 & 0 & & \\ 0 & \cdots & & & & 0 & -\frac{N}{N+1} & 1 & & \end{pmatrix}, \quad (11.53)$$

$$U = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & & & & & 0 \\ 0 & -\frac{3}{2} & 1 & 0 & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3} & 1 & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{5}{4} & \ddots & & & & & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & \ddots & -\frac{N}{N-1} & 1 & 0 & & \\ & & & & & 0 & -\frac{N+1}{N} & 1 & & \\ 0 & \cdots & & & & 0 & 0 & -\frac{N+2}{N+1} & & \end{pmatrix}, \quad (11.54)$$

とする。

そこで、式 (11.47) を次のように書き換える。

$$LUx = y \quad (11.55)$$

ここで、

$$z = Ux \quad (11.56)$$

として、以下の方程式を解くことに集中する。

$$Lz = y \quad (11.57)$$

この場合、 L 、 y は既知の量、 z は未知の量となる。

式 (11.57) の 1 行目は、

$$z_1 = y_1 \quad (11.58)$$

より、 z_1 が簡単に得られる。式 (11.57) の 2 行目は、

$$-\frac{1}{2}z_1 + z_2 = y_2 \quad (11.59)$$

となる。ところが、既に z_1 の値を式 (11.58) より得ているので、

$$z_2 = \frac{1}{2}z_1 + y_2 \quad (11.60)$$

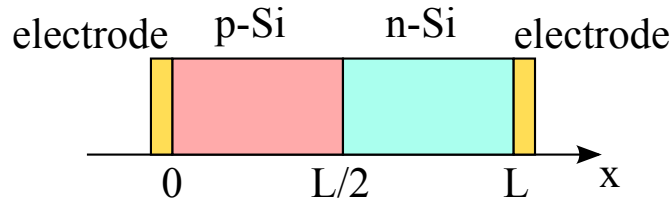


Figure 13: pn 接合ダイオードの模式図

より、 z_2 の値が求められる。以下、この過程を繰り返せば、ベクトル z の成分の値を全て求めることが出来る。

次に、

$$Ux = z \quad (11.61)$$

として、 x を求めることにする。式 (11.61) において、 U 、 z は既知の量、 x は未知の量であることは、前の議論から明らかである。式 (11.61) の $(N + 1)$ 行目は、

$$-\frac{N+2}{N+1}\varphi_N = z_N \quad (11.62)$$

より、

$$\varphi_N = -\frac{N+1}{N+2}z_N \quad (11.63)$$

というように φ_N が容易に求まる。式 (11.61) の N 行目は、

$$-\frac{N+1}{N}\varphi_{N-1} + \varphi_N = z_{N-1} \quad (11.64)$$

となる。既に、 φ_N の値を式 (11.63) より得ているので、

$$\varphi_{N-1} = \frac{N}{N+1}(\varphi_N - \varphi_{N-1}) \quad (11.65)$$

より、 φ_{N-1} の値も求められる。以下、この過程を繰り返せば、ベクトル x の成分である、 $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ の値を全て求めることが出来る。

12 pn 接合ダイオードのシミュレーション

この節では、pn 接合ダイオードのシミュレーション方法について説明する。図 13 は、pn 接合ダイオードを模式的に示した図である。具体例として、p 型 Si 半導体と n 型 Si 半導体を接合したものを考える。p 型、n 型半導体の x 方向の長さは、それぞれ $L/2$ 、全体としての長さは L となるようにする。実際のデバイスにおいては、長さ L は、およそ $0.4[\mu\text{m}]$ 程度と考えて良い。

本節では、半導体 pn 接合で形成されたダイオードの電圧・電流特性等を、第 11 節で説明したバランス方程式による定式化に従ってシミュレートする方法について考察する。図 13 のように p 型半導体と n 型半導体を接合したデバイスにおいて、外部電圧を印加しない場合、pn 接合のエネルギーバンド構造は、図 14 のようになる。

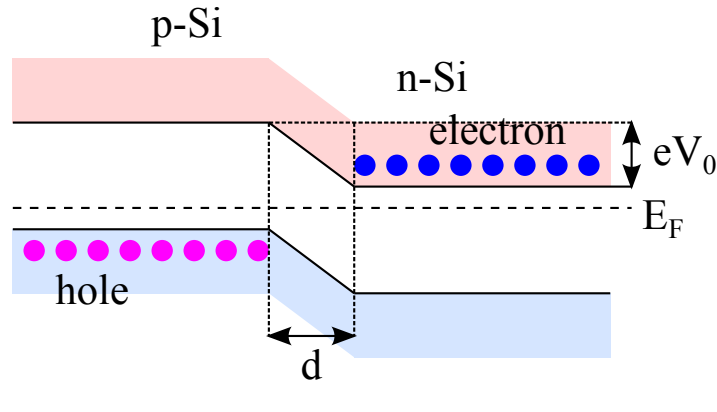


Figure 14: pn 接合ダイオードのエネルギーバンド構造を示した図である。

図 14 に示すように、左側の p 型半導体内部には余剰正孔のキャリアが、右側の n 型半導体内部には余剰電子のキャリアが、それぞれ蓄えられている。そして、接合面において、正孔と電子の結合が発生し、熱平衡状態に達した結果、結合面付近に、キャリアが存在しない空乏層と呼ばれる部分が形成される。また、外部電圧が印加されていないため、p 型半導体と n 型半導体のフェルミ準位は、一致しなくてはならない。このことから、接合面付近の空乏層において、内部電界が自発的に発生する。そこで、図 14 で示される電位差 V_0 が、内部電界を引き起こしていると解釈し、これを接触電位差 (contact potential difference) と呼ぶ。

これより、図 14 のように熱平衡状態に達した pn 接合での、接触電位差 V_0 、空乏層の厚み d を調べることにする。まず、 V_0 を評価することにする。p 型半導体のアクセプター・ドーピング濃度を N_A とする。よって、p 型半導体のキャリア正孔濃度は N_A となる。p 型半導体のキャリア正孔は、図 14 に示すポテンシャル障壁 eV_0 を飛び越えて、一種のトンネル電流となって、n 型半導体へ拡散する。この、キャリア正孔拡散濃度は、

$$N_A \exp\left(-\frac{eV_0}{k_B T}\right) \quad (12.1)$$

で与えられる。

ところで、式 (11.27) において、熱平衡状態でのキャリア電子とキャリア正孔の濃度の積は、

$$n_i^2 = 4\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 (m^* \tilde{m}^*)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{k_B T}\right) \quad (12.2)$$

で与えられることを示した。よって、キャリア正孔濃度が式 (12.1) で与えられるとき、それに対応するキャリア電子拡散濃度は、以下で与えられることになる。

$$\frac{n_i^2}{N_A} \exp\left(\frac{eV_0}{k_B T}\right) \quad (12.3)$$

しかし、実際には、pn 接合は熱平衡状態にあり、正味のキャリア電子・正孔の拡散は相殺されてゼロにはならなくてはならない。これは、n 型半導体のドナー・ドーピング濃度を N_D として、すなわち、n 型半導体のキャリア電子濃度を N_D として、

$$N_D = \frac{n_i^2}{N_A} \exp\left(\frac{eV_0}{k_B T}\right) \quad (12.4)$$

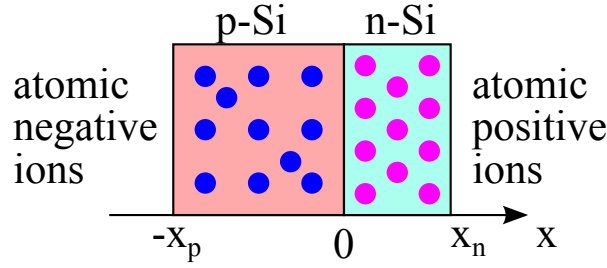


Figure 15: 空乏層における、正負のイオン原子の分布を示した図である。

が成立するということである。よって、接触電位差 V_0 は、次の式で与えられることになる。

$$V_0 = \frac{k_B T}{e} \log\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right) \quad (12.5)$$

次に、空乏層の厚み d を評価する。まず、図 15 のように、p 型半導体の空乏層の厚みを x_p 、n 型半導体の空乏層の厚みを x_n とする。明らかに、

$$x_p + x_n = d \quad (12.6)$$

が成立する。また、空乏層の全てのキャリア電子・正孔は対消滅していることから、

$$x_p N_A = x_n N_D \quad (12.7)$$

も成立する。空乏層においては、キャリア電子・正孔は全く存在せず、イオン原子が固定された電荷として残っているのみである。

この固定されたイオン原子の作る電界 F を求めてみる。簡単な考察から、次の関係式を得る。

$$\begin{aligned} F &= -\frac{eN_A}{\epsilon}(x + x_p) \quad \text{for } -x_p < x < 0, \\ F &= \frac{eN_D}{\epsilon}(x - x_n) \quad \text{for } 0 < x < x_n \end{aligned} \quad (12.8)$$

接合点 $x = 0$ での電界強度は、

$$F = -\frac{eN_A}{\epsilon}x_p = -\frac{eN_D}{\epsilon}x_n \quad (12.9)$$

となる。

式 (12.8) を変数 x について積分すれば、電位 ϕ が求められて、以下を得る。

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{eN_A}{\epsilon}\left(\frac{x^2}{2} + x_p x\right) \quad \text{for } -x_p < x < 0, \\ \phi &= -\frac{eN_D}{\epsilon}\left(\frac{x^2}{2} - x_n x\right) \quad \text{for } 0 < x < x_n \end{aligned} \quad (12.10)$$

空乏層両端の電位差は V_0 に一致するはずである。よって、

$$\frac{e}{2\epsilon}(N_A x_p^2 + N_D x_n^2) = V_0 \quad (12.11)$$

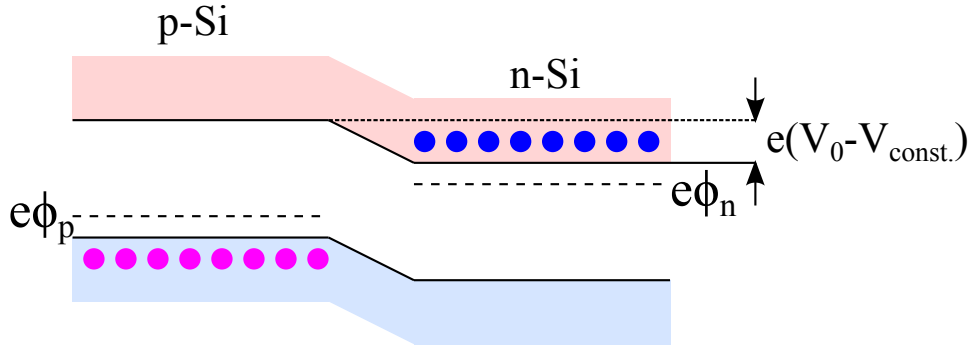


Figure 16:

を得る。上式に式 (12.7) を代入して、

$$V_0 = \frac{e}{2\epsilon} \frac{N_A x_p^2}{N_D} (N_D + N_A) \quad (12.12)$$

を得る。

式 (12.5) より V_0 の値は既に得られていること、および、式 (12.7) を思い出して、

$$\begin{aligned} x_n &= \sqrt{\frac{2\epsilon N_A V_0}{e N_D (N_D + N_A)}}, \\ x_p &= \sqrt{\frac{2\epsilon N_D V_0}{e N_A (N_D + N_A)}} \end{aligned} \quad (12.13)$$

を得る。よって、空乏層の厚み $d = x_n + x_p$ が得られたことになる。

以上の考察をふまえて、初期状態のポテンシャル $\varphi(t=0, x)$ は、次で与えられると分かる。

$$\begin{aligned} \varphi(t=0, x) &= eV_0 + eV_{const.} \quad \text{for } 0 \leq x < \frac{L}{2} - x_p, \\ \varphi(t=0, x) &= eV_0 - \frac{eN_A}{\epsilon} \left(\frac{x^2}{2} + x_p x \right) + eV_{const.} \left[1 - \frac{1}{d} \left(x + x_p - \frac{L}{2} \right) \right] \\ &\quad \text{for } \frac{L}{2} - x_p \leq x < \frac{L}{2}, \\ \varphi(t=0, x) &= eV_0 + \frac{eN_D}{\epsilon} \left(\frac{x^2}{2} - x_n x \right) + eV_{const.} \frac{1}{d} \left(\frac{L}{2} + x_n - x \right) \\ &\quad \text{for } \frac{L}{2} \leq x < \frac{L}{2} + x_n, \\ \varphi(t=0, x) &= 0 \quad \text{for } \frac{L}{2} + x_n \leq x \leq L \end{aligned} \quad (12.14)$$

上式では、 $V_{const.} < 0$ なら順方向の電圧、 $V_{const.} > 0$ なら逆方向の電圧を印加したことになる。

ここで、pn 接合ダイオードに外部電圧 $V_{const.}$ を印加した際のバンド構造を、もう少し詳細に検討することにする。まず、図 14 に示される pn 接合に対して順方向外部電圧 $V_{const.} (< 0)$ を印加した場合を考える。バンド構造は、図 16 のように変更される。このとき、p 型半導体と n 型半導体のフェルミ準位は一致しない。そこで、p 型半導体、n 型

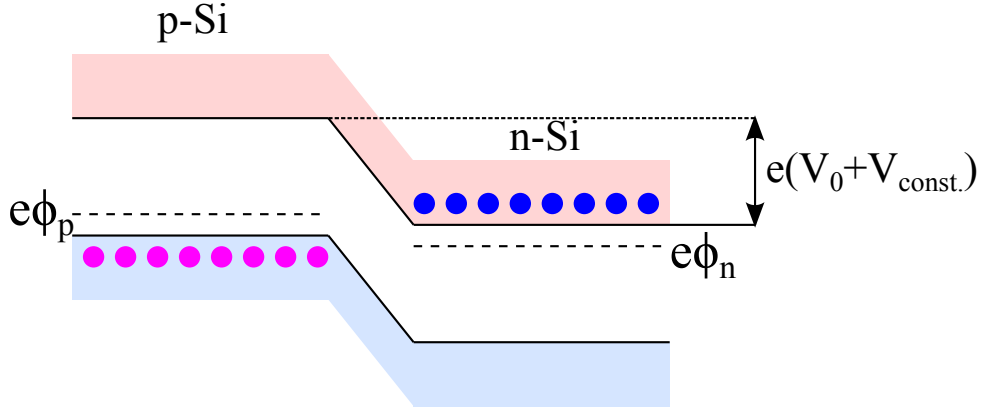


Figure 17:

半導体、それぞれの新たなフェルミ準位を ϕ_p 、 ϕ_n で表す。図 16 では、バンドギャップ $E_g (= E_C - E_V)$ が、事実上、 $e(\phi_n - \phi_p)$ だけ広げられたと解釈出来る。

このとき、式 (11.27) は、次のように変更される。

$$\begin{aligned}
 n\tilde{n} &= n_i^2 \exp\left[-\frac{e(\phi_n - \phi_p)}{k_B T}\right] \\
 &= 4\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 (m^* \tilde{m}^*)^{3/2} \exp\left[-\frac{E_g + e(\phi_n - \phi_p)}{k_B T}\right] \\
 &= 4\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 (m^* \tilde{m}^*)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g + eV_{const.}}{k_B T}\right) \\
 &\equiv n_{i,np}^2(V_{const.}) \quad (12.15)
 \end{aligned}$$

次に、図 14 に示される pn 接合に対して、逆方向外部電圧 $V_{const.} (> 0)$ を印加した場合を考える。バンド構造は、図 17 のように変更される。このときも、p 型半導体と n 型半導体のフェルミ準位は一致しない。そこで、前と同様に、p 型半導体、n 型半導体、それぞれの新たなフェルミ準位を ϕ_p 、 ϕ_n で表す。図 17 では、バンドギャップ $E_g (= E_C - E_V)$ が、事実上、 $e(\phi_p - \phi_n)$ だけ狭められたと解釈出来る。このときも、やはり、式 (12.15) が成立する。

以上の考察をふまえて、初期時刻 $t = 0$ での、キャリア濃度分布は以下のように設定する。

$$n(0, x) = \begin{cases} [n_{i,np}^2(V_{const.})/N_A] \exp[eV_0/(k_B T)] & \text{for } 0 \leq x < (L/2) - x_p \\ 0 & \text{for } (L/2) - x_p \leq x < (L/2) + x_n \\ N_D \exp[-eV_0/(k_B T)] & \text{for } (L/2) + x_n \leq x \leq L \end{cases} \quad (12.16)$$

$$\tilde{n}(0, x) = \begin{cases} N_A \exp[-eV_0/(k_B T)] & \text{for } 0 \leq x < (L/2) - x_p \\ 0 & \text{for } (L/2) - x_p \leq x < (L/2) + x_n \\ [n_{i,np}^2(V_{const.})/N_D] \exp[eV_0/(k_B T)] & \text{for } (L/2) + x_n \leq x \leq L \end{cases} \quad (12.17)$$

また、差分化されたポアソン方程式 (11.42) は、次のように変更される。

$$\frac{\varphi_{j+1} - 2\varphi_j + \varphi_{j-1}}{\Delta x^2} + \frac{e}{\epsilon} (N_{D,j} - n_j - N_{A,j} + \frac{n_{i,np}^2(V_{const.})}{n_j}) = 0 \quad (12.18)$$

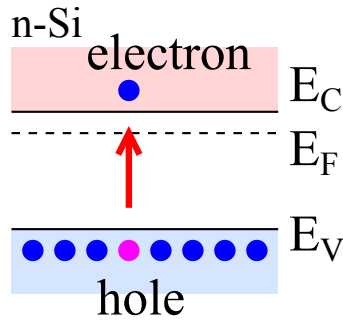


Figure 18:

最終的に、ダイオードを流れる電流は、 $x = 0$ および $x = L$ の二か所の電極部分で、

$$J = J_e + J_h \quad (12.19)$$

を評価することで得られる。ただし、 J_e はキャリア電子によるカレント、 J_h はキャリア正孔によるカレントを表している。キャリア電子のカレントは、以下で与えられる。

$$J_e = env \quad (12.20)$$

一方、キャリア正孔カレントは、熱によって p 型半導体の最高エネルギー準位の価電子が、伝導帯に跳び上がってから、n 型半導体のフェルミ準位へと、ポテンシャルの谷を転がり落ちるだけのことなので、 J_h は印加電圧 $V_{const.}$ に全く依存しない。よって、

$$J_h(V_{const.}) = J_h(V_{const.} = 0) = -J_e(V_{const.} = 0) \quad (12.21)$$

を得る。ただし、上式の導出では、 $V_{const.} = 0$ のときダイオードでは全体として電流が流れず、 $J_e + J_h = 0$ が成立する事実を使っている。

13 太陽電池デバイスのシミュレーション

本節では、pn 接合による太陽電池デバイスのシミュレーション方法について説明する。太陽電池デバイスは、原理的には pn 接合ダイオードと全く同じものと考えて良い。

通常、太陽光は、ダイオードの n 型半導体表面に照射される。図 13 を例に取って説明すると、光は $x = L$ の表面に対して、 x の負の向きに照射される。照射された光は、n 型および p 型半導体内部を通過する過程において、徐々に減衰して行く。減衰した光エネルギーは、図 18 に示すように、半導体内において、価電子帯の最高エネルギー準位 E_V にあるキャリア電子を、伝導帯の最低エネルギー準位 E_C に励起させる事に使われる。従って、減衰する光子の角振動数 ω は、

$$\hbar\omega \geq E_g (= E_C - E_V) \quad (13.1)$$

という関係を満たす必要がある。

なお、光子エネルギー $\hbar\omega$ がバンドギャップ・エネルギー E_g より大きい場合、余剰エネルギー ($\hbar\omega - E_g$) は、熱エネルギーとして散逸してしまうと考えて良い。従って、伝導帯に励起された直後のキャリア電子の運動エネルギーは 0 (ゼロ) とする。

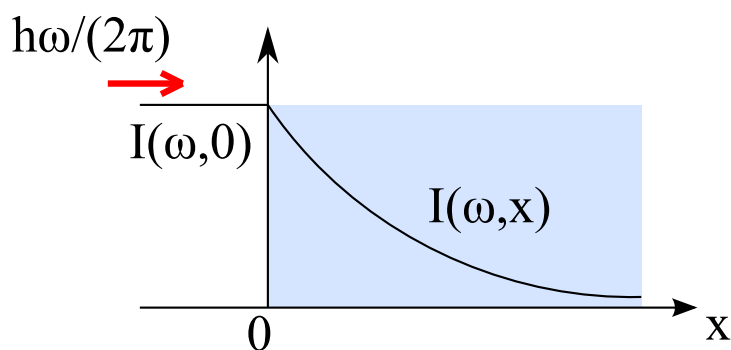


Figure 19:

Table 4: 代表的な半導体の、光吸収係数 A 、バンドギャップ E_g 、および、直接・間接遷移型の分類

	$A[\text{m}^{-1}]$	$E_g[\text{eV}]$	遷移型
Si	1.0×10^3	1.11	間接
Ge	1.0×10^2	0.67	間接
GaAs	1.0×10^4	1.43	直接

上記の光子によるキャリア電子励起現象は、結果として、価電子帯におけるキャリア正孔、伝導帯におけるキャリア電子の対生成と見なすことが出来る。対生成された直後の、キャリア正孔・電子、どちらの運動エネルギーも0(ゼロ)である。

半導体を透過する光の強度の減衰は、以下の式で表現される。

$$I(\omega, x) = I(\omega, 0)e^{-\alpha(\omega)x} \quad (13.2)$$

ただし、 $I(\omega, x)$ は、角振動数 ω の光子の位置座標 x での強度で、例えば単位は $[\text{eV}]$ 等に取りれる。仮に、半導体が $x \geq 0$ の領域を占めているとする。この際の、式(13.2)のグラフを模式的に示したのが図19である。

光吸収係数 α は、価電子帯から伝導帯へのキャリア電子の励起が直接遷移の場合、次の形の式で与えられる。

$$\alpha_d(\omega) = A\sqrt{1 - \frac{E_g}{\hbar\omega}} \quad (13.3)$$

また、励起が間接遷移の場合、 α は次の形となる。

$$\alpha_i(\omega) = A\left(1 - \frac{E_g}{\hbar\omega}\right)^2 \quad (13.4)$$

上式に現れる定数 A は、半導体の組成に依存する物性値である。定数 A 、 E_g を表4にまとめておく。

次に、入射光子によるキャリア電子・正孔対生成が、バランス方程式にどのように反映されるかについて考えてみる。これは、以下のように、キャリア電子・正孔の平均濃度の時間変化に関するバランス方程式に手を加えるだけで、対応可能である。式(11.1)は、

次のように変更される。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(nv) - \nu_n(\omega)(n - n_0) + c' \frac{\alpha(\omega)I(\omega, x)}{\hbar\omega} \theta(\hbar\omega - E_g) \quad (13.5)$$

ただし、 $c' = c\sqrt{\epsilon_0/\epsilon}$ 、 ϵ_0 は真空の誘電率、 ϵ は半導体の誘電率、 c は光速、 $\theta(x)$ は階段関数で、

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } 0 \leq x \end{cases} \quad (13.6)$$

とする。

半導体中を透過する太陽光の振る舞いは、Maxwell 方程式を解くことで調べられる。ここでは、FDTD 法 (Finite-difference time-domain method) と呼ばれる、Maxwell 方程式の数値計算的解法について説明する。

電磁気学に関する連続の方程式、および、Maxwell 方程式は、以下のように書き下される。

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (13.7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (13.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \quad (13.9)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (13.10)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t), \quad (13.11)$$

ただし、 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ は電界、 $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ は磁界、 $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ は電束密度、 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ は磁束密度、 $\rho(\mathbf{r}, t)$ は電荷密度、 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ は電流密度を表すとする。物質の誘電率を ϵ 、透磁率を μ として、

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, t), \quad (13.12)$$

が成立する。

式 (13.10) の両辺に ∇ を内積として作用させて、以下を得る。

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (13.13)$$

明らかに、上式の左辺第 1 項は 0(ゼロ) である。よって、 $(\partial/\partial t)\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0$ となり、 $\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ は時刻 t に依存しないという結果を得る。そこで、初期条件 $[\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]_{t=0} = 0$ として、

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \forall t \quad (13.14)$$

を得る。透磁率 μ が空間的に変化しない領域では、式 (13.14) を、

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \forall t \quad (13.15)$$

と書いても構わない。

式 (13.11) の両辺に ∇ を内積として作用させて、以下を得る。

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \quad (13.16)$$

明らかに、上式の左辺第1項は0(ゼロ)である。よって、式(13.7)および(13.16)より、

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) \quad (13.17)$$

を得る。よって、以下の関係式を得る。

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) + \text{Const.} \quad (13.18)$$

初期条件を $\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, 0) = \rho(\mathbf{r}, 0)$ とすると、

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (13.19)$$

を得る。誘電率 ϵ が空間的に変化しない領域では、式(13.19)を、

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{r}, t) \quad (13.20)$$

と書いても構わない。

これより、式(13.7)、(13.8)、(13.9)、(13.10)、(13.11)を数値的に解くための差分法の規則を決めることにする。既に述べたように、本仕様書では、太陽電池デバイスを1次元の構造として、時間・空間座標は (t, x) として議論を進めている。よって、これより先では、座標変数 (t, x) で記述される x 方向に進む電磁波に限って、FDTD法による数値計算を進めることにする。

まず、座標 (t, x) の2次元系における、 x 方向に進む電磁場として、振幅 E 、 H を、3次元 (x, y, z) 空間座標で、

$$\mathbf{E} = (0, E, 0), \quad \mathbf{H} = (0, 0, H), \quad (13.21)$$

というように制限することにする。この処置は、式(13.20)において、

$$\rho(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{r}, t \quad (13.22)$$

を要請することを意味する。太陽電池デバイス内においては、キャリア電子・正孔の電荷が相殺し合って、近似的の上の関係式が成立していると思なせる。なお、式(13.15)は、デバイス内において問題無く成立している。

式(13.10)、(13.11)を、次のように書き直す。

$$\frac{\partial}{\partial t} E(t, x) = -\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial x} H(t, x) - J(t, x), \quad (13.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H(t, x) = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} E(t, x), \quad (13.24)$$

ただし、 $J(t, x)$ は太陽電池デバイス内の、時刻座標 t 、位置座標 x における電流と解釈する。よって、

$$J(t, x) = en(t, x)v(t, x) - J_e(V_{const.} = 0) \quad (13.25)$$

を代入する。

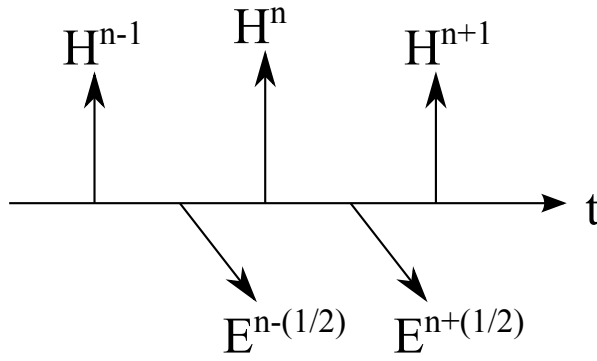


Figure 20: 時間軸 t 方向に離散化された電磁場の様子

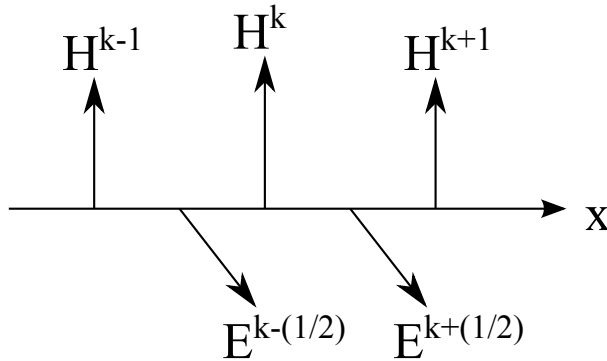


Figure 21: 空間軸 x 方向に離散化された電磁場の様子

さらに、電磁波が、半導体を透過する過程において、その強度が失われる様子を記述しなくてはならない。それには、式 (13.23)、(13.24) を、次のように変更すれば良い。

$$\frac{\partial}{\partial t} E(t, x) = -\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial x} H(t, x) - J(t, x) - \frac{\alpha}{\sqrt{\epsilon\mu}} E(t, x), \quad (13.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H(t, x) = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial x} E(t, x) - \frac{\alpha}{\sqrt{\epsilon\mu}} H(t, x), \quad (13.27)$$

なお、 $x = 0$ で、角振動数 ω 、強度 I の光を放射させ続けるとする。これは、次の境界条件を設定することに相当する。位置座標 $x = 0$ における半導体の誘電率、透磁率を ϵ 、 μ とする。このとき、半導体内での光速は $c' = 1/\sqrt{\epsilon\mu}$ で与えられ、境界条件は以下の通りとなる。

$$H(t, x = 0) = H_0 \cos(\omega t), \quad E(t, x = 0) = E_0 \cos(\omega t), \quad (13.28)$$

$$H_0 = \frac{E_0}{\mu c'}, \quad I_0 = \epsilon E_0^2 + \frac{1}{\mu} H_0^2. \quad (13.29)$$

式 (13.26)、(13.27) を差分化する。まず、次の点に注意する。時間空間座標 (t, x) は、

$$0, \frac{1}{2}\Delta t, \Delta t, \frac{3}{2}\Delta t, 2\Delta t, \dots, (n - \frac{1}{2})\Delta t, n\Delta t, (n + \frac{1}{2})\Delta t, \dots \quad (13.30)$$

および、

$$0, \frac{1}{2}\Delta x, \Delta x, \frac{3}{2}\Delta x, 2\Delta x, \dots, (n - \frac{1}{2})\Delta x, n\Delta x, (n + \frac{1}{2})\Delta x, \dots \quad (13.31)$$

というように、 $(1/2)\Delta t$ 、 $(1/2)\Delta x$ を単位として離散化を行う。さらに、図 20、21 のように、離散化された $E(t, x)$ 、 $H(t, x)$ は、 t 軸方向にも x 軸方向にも、互い違いに定義されるものとする。

式 (13.26)、(13.27) を、以下のように差分化する。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t}[E_{k+(1/2)}^{n+(1/2)} - E_{k+(1/2)}^{n-(1/2)}] &= -\frac{1}{\epsilon} \frac{1}{\Delta x}[H_{k+1}^n - H_k^n] \\ &\quad - \frac{\alpha}{2\sqrt{\epsilon\mu}}[E_{k+(1/2)}^{n+(1/2)} + E_{k+(1/2)}^{n-(1/2)}], \end{aligned} \quad (13.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t}[H_k^n - H_k^{n-1}] &= -\frac{1}{\mu} \frac{1}{\Delta x}[E_{k+(1/2)}^{n-(1/2)} - E_{k-(1/2)}^{n-(1/2)}] \\ &\quad - \frac{\alpha}{2\sqrt{\epsilon\mu}}[H_k^n + E_k^{n-1}], \end{aligned} \quad (13.33)$$

さらに、式 (13.32)、(13.33) を次のように変形する。

$$E_{k+(1/2)}^{n+(1/2)} = \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\alpha}{2\sqrt{\epsilon\mu}}\right)^{-1} \left[\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\alpha}{2\sqrt{\epsilon\mu}}\right) E_{k+(1/2)}^{n-(1/2)} - \frac{1}{\epsilon\Delta x} [H_{k+1}^n - H_k^n] \right], \quad (13.34)$$

$$\begin{aligned} H_k^n &= \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{\alpha}{2\sqrt{\epsilon\mu}}\right)^{-1} \left[\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{\alpha}{2\sqrt{\epsilon\mu}}\right) H_k^{n-1} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\mu\Delta x} [E_{k+(1/2)}^{n-(1/2)} - E_{k-(1/2)}^{n-(1/2)}] \right] \end{aligned} \quad (13.35)$$

上記の連立差分方程式を使えば、 $E_{k+(1/2)}^{n+(1/2)}$ 、 H_k^n が、逐次的に計算可能となる。