

問題 5

I. 電子のふるまいを記述する1次元のシュレディンガー方程式は、次式で表される。

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

ここで、 $\psi(x,t)$ は電子の波動関数で位置 x と時間 t の関数、 $V(x)$ はポテンシャルで位置 x の関数、 m は電子の質量、 \hbar はプランク定数 h を 2π で割ったもの、 i は虚数単位である。以下の問に答えよ。

(1) エネルギー固有状態の波動関数は、

$$\psi(x,t) = \Phi(x)e^{-i\omega t}$$

と表すことができる。 $\Phi(x)$ は x の関数、 ω は角振動数である。これを用いて時間に依存しないシュレディンガー方程式を導出せよ。

(2) 図1に示すポテンシャル $V(x)$ で閉じ込められた電子のエネルギー固有状態を考える。ここで、 $0 \leq x \leq L$ のとき $V(x) = 0$ 、 $x < 0$ および $L < x$ のとき $V(x) = V_0$ である。ポテンシャルの高さ V_0 が無限大のとき、 $0 \leq x \leq L$ の範囲に存在する $\Phi(x)$ の解は

$$\Phi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$$

で与えられる。ただし、 k は波数で正の実数、 C_1, C_2 は定数である。なお、 $x < 0$ 、 $L < x$ で $\Phi(x) = 0$ とする。

(2-i) 電子のエネルギー固有値 E を k を用いた式で表せ。

(2-ii) k の値を求め、エネルギー固有値 E を求めよ。

(2-iii) 上記で求めた各エネルギー固有値に対応する電子の固有関数を求めよ。

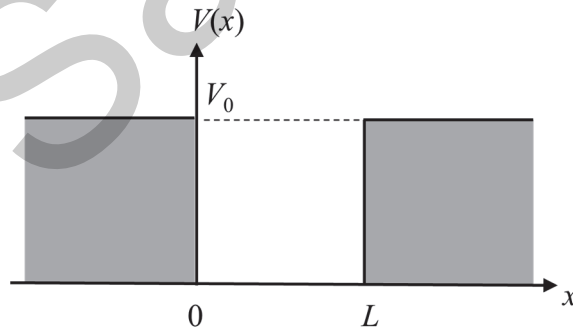


図 1

- (3) 図1でポテンシャルの高さ V_0 が有限の場合を考える。ここで、 $V_0 > E$ のとき、ポテンシャル障壁に閉じ込められた電子の波動関数 $\Phi(x)$ の解は、

$$\Phi(x) = \begin{cases} B_1 e^{k'x} & x < 0 \\ C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} & 0 \leq x \leq L \\ B_2 e^{-k'x} & L < x \end{cases}$$

で与えられる。ただし、 k' は正の実数であり、 $k' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ である。 B_1, B_2, C_1, C_2 は定数である。

- (3-i) ポテンシャル障壁への波動関数のしみ出し（侵入長）はどうなるか、 k' を用いて記述せよ。
- (3-ii) V_0 が無限大のときには、ポテンシャル障壁への波動関数のしみ出しがない。その物理的理由を述べよ。
- (3-iii) V_0 が無限大のときと有限のときでは電子の基底状態のエネルギー固有値にどのような違いが生じるか。また、励起状態ではその違い（ V_0 が無限大のときと有限のときのエネルギー固有値の差）が基底状態と比べてどうなるかを述べよ。ここで、 V_0 が有限のときの電子の波動関数やエネルギー固有値を厳密に求める必要はない。
- (3-iv) 図1に示すポテンシャル $V(x)$ に閉じ込められた電子系で、基底状態のみに電子が存在するとき、光を照射すると基底状態から励起状態への遷移が起こり得る（半導体の量子井戸構造ではこれをサブバンド間遷移と呼ぶ）。 V_0 を無限大から有限の高さに変えたとき、サブバンド間遷移の光エネルギーと波長がどう変わるかを述べよ。ここで、 V_0 が有限のときの電子の波動関数やエネルギー固有値を厳密に求める必要はない。

II. 3次元半導体結晶である真性半導体の伝導帯と価電子帯を考える。伝導帯下端のエネルギーを E_C 、価電子帯上端のエネルギーを E_V 、フェルミ準位を E_F 、電子の有効質量を m_e 、正孔の有効質量を m_h 、禁制帯幅（バンドギャップ）を E_g 、絶対温度を T 、ボルツマン定数を k_B 、プランク定数を h 、 h を 2π で割ったものを \hbar とする。この半導体では、禁制帯幅は1eV程度であり、電子、正孔ともにそれぞれ一種類のバンドのみを考え、キャリアは Γ 点（波数ベクトル $\mathbf{k}=\mathbf{0}$ ）付近のみに存在し、有効質量近似が成り立つものとする。以下の問に答えよ。

(1) 伝導帯の電子の運動エネルギー E を波数ベクトル \mathbf{k} の関数として表せ。

(2) 伝導帯の電子の状態密度 $g(E)$ は次式で表される。これを導出せよ。

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_C)^{\frac{1}{2}}$$

(3) 室温付近で熱平衡状態の半導体の伝導帯に存在する電子密度 n_0 を、 E_C 、 E_F 、 m_e 、 T 、 k_B 、 h を用いて表せ。ただし、フェルミ・ディラック分布はボルツマン分布で近似できるとする。導出に際して、以下の公式を利用してもよい。

$$\int_0^{\infty} \sqrt{x} \exp\left(\frac{-x}{k_B T}\right) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} (k_B T)^{\frac{3}{2}}$$

(4) 室温付近のフェルミ準位 E_F を求めよ。

(5) この半導体がSi（シリコン）である場合、N型あるいはP型にするにはそれぞれどのような不純物を添加すればよいか、元素名を1つずつ挙げ、その元素を選んだ理由を述べよ。また、真性半導体からN型あるいはP型にした場合に、フェルミ準位 E_F はそれぞれどのように変化するか。以上を5行程度で説明せよ。必要に応じて図を用いてもよい。