

## 4.2.2 バンド間発光

半導体の発光現象にも非常に多くの種類がある。代表的なものが電子正孔対が結合 (再結合) することによる発光である。上記光吸収を始め、様々な方法で励起された少数キャリアは、多数キャリアと輻射再結合 (radiative recombination) をすることでそのエネルギーを光子として放出する。一方、光子を放出せず他の自由度にエネルギーを散逸する場合、非輻射再結合 (non-radiative recombination) と呼ぶ。輻射再結合による発光をルミネッセンス (luminescence)、その中でも発光寿命が比較的短い通常の発光をフルオレッセンス (蛍光, fluorescence)、極めて長寿命のものをフォスフォレッセンス (燐光, phosphorescence) という。

ルミネッセンスは更に、再結合元となった電子正孔対を生成する起源となる励起によっても分類され、前副節の光吸収励起によるものは、フォトルミネッセンス (photoluminescence)、電場により再結合中心を直接励起したり、後述の pn 接合に流す電流によって少数キャリアを注入したりして電気的刺激によって電子正孔対を生成するものをエレクトロルミネッセンス (electroluminescence) と呼ぶ。また、電子正孔対状態にあっても不純物状態にトラップされるなどの事情により再結合に至っていない状態に対して熱刺激を与えることで再結合を生じて発光することがあり、熱ルミネッセンス (thermoluminescence) と呼ばれている\*1。

前節で見たように、2準位系からの光子の放出過程には、放出確率が系周辺の光子密度に比例する誘導放出 (stimulated emission) と、常に存在する零点振動による自然放出 (spontaneous emission) とが存在する。零点振動を光子の内に含めれば、両者の差はないとも言えるが、現実には前者は比較的限られた条件下で生じ、レーザー発振などの特異な現象を引き起こすため、区別して議論する。このことから、空間中の電磁場の光子数密度は発光 (光子放出) を議論する上で重要な要素である。

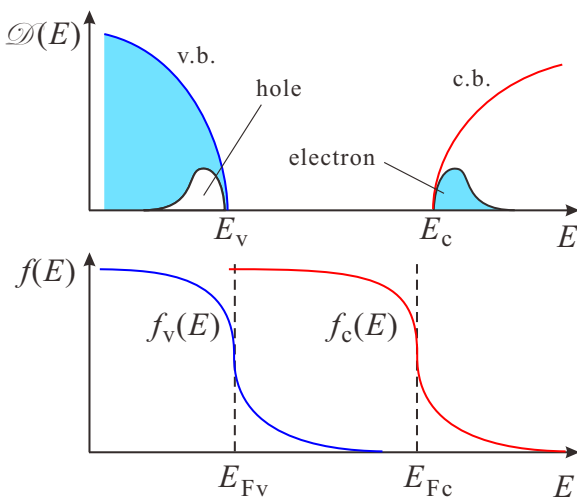


図 4.3 擬フェルミ準位の概念図

すなわち、定常光照射下で定常状態にある伝導帯の電子系、価電子帯の電子系は、それぞれ同じ温度で表される準熱平衡状態にあり、フェルミ分布関数が適用できるが、光励起とゆっくりしたバンド間再結合により、電子系はバンドに

プランクの輻射公式より、屈折率  $\bar{n}$  (吸収は考えないこととし、実数とする) の物質中のエネルギー  $E$  の光子の数密度は、

$$P(E) = \frac{8\pi\bar{n}^3 E^3}{h^3 c^3} \frac{1}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad (4.70)$$

で与えられる。

光照射下で光励起によって少数キャリアが生じていると、キャリアの分布は1つの化学ポテンシャルと温度で表される熱平衡状態から外れる。このような場合でも分布関数は定義できるから、伝導帯での電子の分布関数を  $f_c$ 、価電子帯の電子の分布関数を  $f_v$  とする。一般にキャリア間の相互作用による分布の緩和、及びバンド内でのキャリア-格子間相互作用による緩和は、バンド間のキャリア再結合に比べて遥かに速い過程であるので、次のような近似をする。

\*1 その他、電子線、音、摩擦、化学反応、等々、身近にも非常に多くの励起要因が知られている。

より異なる擬似化学ポテンシャル (準フェルミ準位 (quasi Fermi level)) を持つ。

$$f_c(E) = \left[ \exp\left(\frac{E - E_{Fc}}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad f_v(E) = \left[ \exp\left(\frac{E - E_{Fv}}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (4.71)$$

フォトン  $\hbar\omega$  を吸収して価電子帯のエネルギー  $E_1$  から伝導帯のエネルギー  $E_2$  へ電子が励起される過程 ( $\hbar\omega = E_2 - E_1$ ) を考えると、このような遷移の単位時間当たりの割合は、 $1 \rightarrow 2$  の遷移確率を  $B_{12}$  と書いて、

$$R(1 \rightarrow 2) = B_{12} f_v(1 - f_c) P(\hbar\omega) \quad (4.72)$$

と書かれる。逆に  $E_2$  へ励起された電子が  $E_1$  へ落ちて光子を放出する過程は、自然放出過程においては、光子の数密度は遷移確率に関係せず、

$$R(sp, 2 \rightarrow 1) = A_{21} f_c(E_2)(1 - f_v(E_1)). \quad (4.73)$$

誘導放出過程では、遷移確率が光子数密度に比例し、

$$R(st, 2 \rightarrow 1) = B_{21} f_c(E_2)(1 - f_v(E_1)) P(\hbar\omega). \quad (4.74)$$

である。定常状態では、これらの遷移が釣り合っていないなければならない。

$$R(1 \rightarrow 2) = R(sp, 2 \rightarrow 1) + R(st, 2 \rightarrow 1). \quad (4.75)$$

この詳細釣り合いの式に表式 (4.70)–(4.74) を代入し、温度依存性について辺々比較することで、次のアインシュタインの関係式 (Einstein relations) を得る。

$$\begin{cases} A_{21} = \frac{8\pi n^3 E_{21}^3}{h^3 c^3} B_{21}, \\ B_{12} = B_{21}. \end{cases} \quad (4.76a) \quad (4.76b)$$

これは、第4回の式 (4A.9) と同じものである ((4A.9) は角振動数スペクトルに対するものであったので  $\hbar$  だけ表式が異なる)。

### 4.3 物質中電磁場の現象論

以上、2準位系での議論をもとに、バンド間遷移に伴う光吸収現象によって生じる光応答を考えた。実際の結晶でも重要な効果であるが、他にも様々な現象が光応答となって現れる。これを、背後で生じている現象を直接考えるのではなく、マクロなパラメーターとして一種の整理を行うことも必要である。例えば、本文中でも屈折率を光速を変化させるパラメーターとして使用している。こういった古典的マクロアプローチについて見ておこう。

まずは、Maxwell 方程式

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (4.77a)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (4.77b)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M} \quad (4.77c)$$

からスタートする。誘電体を想定し、磁化  $\mathbf{M} = \vec{0}$ ,  $|\mathbf{j}| \ll |\partial \mathbf{D} / \partial t|$  で  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{j}$  を落とす\*2。これにより次の波動方程式を導くことができる。

$$\Delta \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}. \quad (4.78)$$

\*2 これらが有限な場合は、方程式の段階からこのようなマクロモデルの段階でも様々な興味深い現象が現れることが予想される。ミクロレベルに進むと更に無数のテーマが生じる。これらは、磁気光学効果 (magneto-optical effects) と呼ばれ、多くの実験手法を提供するとともに、重要な研究対象でもある。本講義では踏み込む時間がないが、興味がある方は、[2, 3] などを参照のこと。

電気分極  $\mathbf{P} = \vec{0}$  であれば、真空中の電磁波の波動方程式になる。この誘電体のマクロモデルにおいては、 $\mathbf{P}$  が真空電磁場に対する変化を代表していることがわかる。 $\mathbf{P}$  は、線形近似の範囲では、電気感受率 (electric susceptibility) テンソル  $\chi$  により、

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad (4.79)$$

と書くことができる。(4.77c) より、 $\mathbf{D} = \epsilon_0(1 + \chi_r)\mathbf{E}$  であるから、**比誘電関数** (relative dielectric function, or relative permittivity)  $\epsilon_r$  を次のように定義できる\*3。

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}, \quad \epsilon_r = 1 + \chi. \quad (4.80)$$

以下では簡単のため等方的な物質を考えると、テンソル  $\epsilon_r$  をスカラー  $\epsilon_r$  とする。(4.79), (4.80) より (4.78) は

$$\Delta \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \epsilon_0 \mu_0 (\epsilon_r - 1) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$$

となるので、次が得られる。

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{\epsilon_r}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (4.81)$$

これは、以上の最も単純化した近似では、物質中の電磁波の伝播について光速  $c$  を  $c' = c/\sqrt{\epsilon_r}$  とすれば、分極を取り入れることができることがわかる。そこで、真空中の分散関係  $\omega = ck$  を変更して分極効果を取り入れた式

$$c^2 \mathbf{k}^2 = \omega^2 \epsilon_r(\omega, \mathbf{k}) \quad (4.82)$$

が得られる。 $\epsilon_r$  は物質の特性を反映して、 $\omega_r$ ,  $\mathbf{k}$  に依存するとした。

物質中の電磁波が分極の波を伴うために光速が変化する効果は、上記の通り比誘電関数  $\epsilon_r(\omega, \mathbf{k})$ , あるいは屈折率  $\tilde{n} = \sqrt{\epsilon_r}$  を考えることで現象論的に取り入れることができる。更に、4.2.1 節で見たような吸収の効果についても、現象論的には屈折率に虚部を考えることで取り入れることができる。そこで、**複素屈折率** を

$$\tilde{n}(\omega, \mathbf{k}) = n(\omega, \mathbf{k}) + i\kappa(\omega, \mathbf{k}) \quad (4.83)$$

と定義すると、式 (4.59) あるいは、 $I(z) = I_0 \exp(-\alpha z)$  という定義から、吸収係数  $\alpha$  を

$$\alpha = \frac{2\omega}{c} \kappa(\omega, \mathbf{k}) \quad (4.84)$$

と表すことができる。

現象論をもう少し進めて、物質も電磁媒質として調和振動子の集合として考える (ローレンツモデル)。ただし、質量、電荷、ばね定数は共通で  $(m, e, \xi)$  とし、電磁波が電荷を通して振動子系と相互作用するとする。電磁波の振動数は  $\omega$  で、波長は振動子間距離に比べて十分長いとし、電磁波を振動電場で近似する。電場による強制振動項を  $eE_0 e^{-i\omega t}$  と書くと、各振動子の運動方程式を

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \Gamma m \frac{dx}{dt} + \xi x = eE_0 \exp(-i\omega t) \quad (4.85)$$

と書くことができる。 $\Gamma m$  は、摩擦のようなエネルギー散逸を表す係数である。各振動子の固有振動数を  $\omega_h = \sqrt{\xi/m}$  とする。(4.85) の長時間準定常解は、 $x(t) = x_p \exp(-i\omega t)$  として代入することで、

$$x_p(\omega) = \frac{eE_0}{m} \frac{1}{\omega_h^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (4.86)$$

\*3 誘電関数, 比誘電関数, 絶対誘電関数, 誘電率, 等々と和英問わず用語はテキストによりまちまちである。真空誘電率  $\epsilon_0$  を単位に取るかどうか, というだけなのでさほど混乱はないはずだが, ここでは一々「比」などを付ける。電磁気関係では, 単位などで混乱が生じることが多い。気になる方, また興味のある方は, [5, 6, 7] などを参照のこと。

が得られる。振動子の空間密度を  $N$  とすると、

$$P = N(\epsilon x_p(\omega)) = \frac{Ne^2}{m} \frac{1}{\omega_h^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} E_0 \quad (4.87)$$

が得られる。右辺  $E_0$  の係数が、(4.79) の  $\chi$  に相当するから、(4.80) の定義から比誘電関数が

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_h^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \quad (4.88)$$

と求まる。上では、1種類のモードのみ考えたが、各サイトに様々なモードがあり、指数  $j$  で指定されるモードの割合が  $f_j$  だとすると、(4.88) は

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_h^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j} \quad (4.89)$$

となる。この  $f_j$  はこれまでも見てきた振動子強度に相当するものである。

## 4.4 励起子の光応答

前章最後で導入した励起子は、一般にバンドギャップよりも小さなエネルギー位置に共鳴があり、光吸収/発光共に顕著なピーク構造となって現れることが多い。バルク半導体においては、主に低温のスペクトルに現れるが、後述する量子構造中では事情が変わる。また、本講義では触れる時間がないが、分子内に生じる Frenkel 型励起子は、有機エレクトロルミネッセンスまずは、バルクの基本的な部分を見ておこう。

### 4.4.1 励起子光吸収/発光

3.3.2 節で見たように、励起子の自由度を、電子正孔の相対運動（運動を指定する空間座標  $\mathbf{r}$ ）、並進運動 ( $\mathbf{R}$ ) とし、有効質量近似で

$$\Phi_{n\mathbf{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) \phi_n(\mathbf{r}) \quad (4.90)$$

と書くことができる。これを Fourier 変換すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} F_{n\mathbf{K}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h) &= \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r}_e d^3\mathbf{r}_h e^{-i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}_e} e^{-i\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}_h} \Phi_{n\mathbf{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{R} e^{-i\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h - \mathbf{K})} \phi_n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}^* \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}^* \cdot \mathbf{r}} \phi_n(\mathbf{r}) \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h}, \quad \mathbf{k}^* \equiv \frac{m_h \mathbf{k}_e - m_e \mathbf{k}_h}{m_e + m_h}. \end{aligned} \quad (4.91)$$

これより、励起子の全波数ベクトル  $\mathbf{K}$  は

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_h \quad (4.92)$$

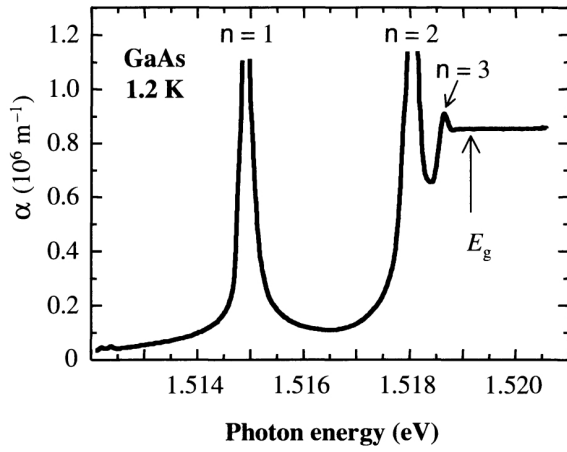
であることがわかる。

光吸収を考えるため、電子正孔対励起前の状態を、基底状態  $\Phi_0 = \phi_{c\mathbf{k}_e} \phi_{v\mathbf{k}_e}$  とし、式 (4.90) の状態への遷移確率  $w_{if}$  を、 $\mathbf{k}_p = \vec{0}$ 、 $\mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_h$  とし、2準位系に倣って計算すると、

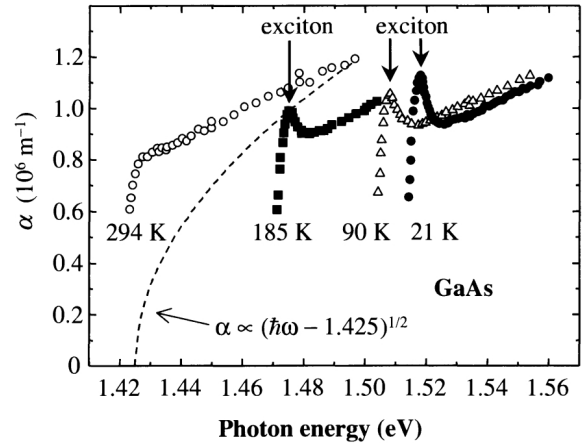
$$\begin{aligned} w_{if} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2} |A_0|^2 \frac{1}{V} \sum_{\lambda} |\langle \Phi_{\lambda\mathbf{K}} | \exp(i\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \Phi_0 \rangle|^2 \delta(E_g + E_{\lambda} - \hbar\omega) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2} |A_0|^2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_e \lambda} |F_{\lambda\mathbf{K}}(\mathbf{k}_e, -\mathbf{k}_e) \langle \phi_{c\mathbf{k}_e} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \phi_{v\mathbf{k}_e} \rangle|^2 \delta(E_g + E_{\lambda} - \hbar\omega). \end{aligned} \quad (4.93)$$

$\mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_h$  より

$$F_{n\mathbf{K}}(\mathbf{k}_e, -\mathbf{k}_h) = \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r}_e d^3\mathbf{r}_h \exp[-i\mathbf{k}_e \cdot (\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h)] \Phi_{\lambda\mathbf{K}}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (4.94)$$



(a)



(b)

図 4.4 (a) GaAs の基礎吸収端より低エネルギー側に現れた励起子吸収ピーク [9]. (b) GaAs の基礎吸収端付近の励起子による異常 [10].

である. (4.93) では,  $\mathbf{k}_e$  について和を取るようになるので,  $\mathbf{r}_e = \mathbf{r}_h$  である.  $F_{n\mathbf{K}}$  が大きな値を取るのは,  $\mathbf{k}_e \approx \vec{0}$  である  $\mathbf{k}_e$  の狭い範囲であり, 逆にこの範囲では  $\langle \phi_{c\mathbf{k}_e} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \phi_{v\mathbf{k}_e} \rangle$  はほぼ一定とできる. これは, (4.62) の  $M$  である. 以上から,

$$w_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m^2} |A_0|^2 \sum_{\lambda} |M|^2 |\phi_{\lambda}(0)|^2 \delta(E_g + E_{\lambda} - \hbar\omega) \quad (4.95)$$

が得られる.

再び簡単のため等方的有効質量系を考える.  $\phi_{\lambda}(0) \neq 0$  となるのは  $s$  状態のみであり,

$$|\phi_n(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_{ex}^3 n^3}, \quad E_n = -\frac{E_{ex}}{n^2} \quad (4.96)$$

であるから, 比誘電率の虚部  $\epsilon_{r2}(\omega) = 2in(\omega)\kappa(\omega)$  は

$$\epsilon_{r2}(\omega) = \frac{\pi e^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} |M|^2 \frac{1}{\pi a_{ex}^3} \sum_n \frac{1}{n^3} \delta\left(E_g - \frac{E_{ex}}{n^2} - \hbar\omega\right) \quad (4.97)$$

となる. 以上はスピン自由度 2 をカウントしていなかったため, これも考慮して 2 倍する必要がある.

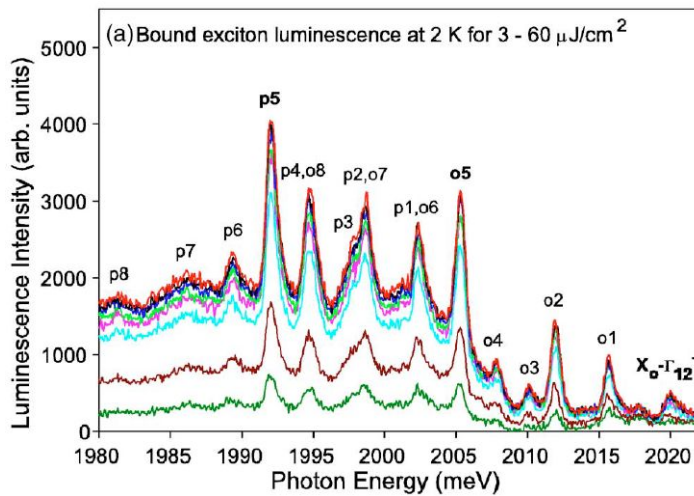


図 4.5  $\text{Cu}_2\text{O}$  の束縛励起子発光スペクトル [11].

詳細な計算は略すが ([8] などを見よ), (4.68) は, 励起子が連続状態に変わる  $\hbar\omega = E_g$  で (4.97) (の 2 倍) から得られる吸収係数と一致する. これより, 直接吸収端の吸収スペクトルと励起子離散状態のスペクトル比較によって以上の近似について実験的に確かめることができる.

式 (4.97) は  $\delta$ -関数の部分は共通しているので, それ以外をまとめて定数  $C$  とすると,

$$\epsilon_{r2} = C \delta\left(E_g - \frac{E_{ex}}{n^2} - \hbar\omega\right) \quad (4.98)$$

である. 数学公式

$$\lim_{\Gamma \rightarrow +0} \frac{1}{x_0 - x - i\Gamma} = \mathcal{P} \frac{1}{x_0 - x} + i\pi\delta(x_0 - x) \quad (4.99)$$

と比較して、 $\Gamma \rightarrow +0$  を  $\delta$  と書いて

$$\epsilon_{r2} = \text{Im} \left\{ \frac{C/\pi}{E_g - \frac{E_{\text{ex}}}{n^2} - (\hbar\omega + i\delta)} \right\} \quad (4.100)$$

である。Kramers-Kronig 関係式 (4B.2) を使い、

$$\epsilon_r = \frac{C/\pi}{E_g - \frac{E_{\text{ex}}}{n^2} - (\hbar\omega + i\Gamma)} \quad (4.101)$$

と書けることがわかる。図 4.4(b) などと合わせることができる。

発光は、これまで見てきたように、吸収の逆過程であり、吸収と同様に、基礎発光端から低いエネルギー位置に発光ピークを生じる。図 4.5 に  $\text{Cu}_2\text{O}$  のフォトルミネッセンスの例を示す。

#### 4.4.2 励起子ポラリトン

ポラリトンとしては、光学フォノンと光子が結合したものが良く知られている。ここでは、励起子-光の結合によるものを考える。励起子ポラリトン (exciton-polariton) の概念図を図 4.6 に示した。この図のように、また前節で見た通り、励起子による吸収発光は逆過程にあたり、これが、連続して生じる。このサイクルの周期は、数フェムト秒と短く、励起子と光の双方がコヒーレンスを保ち、全体としてコヒーレントな状態として結晶を伝播する。

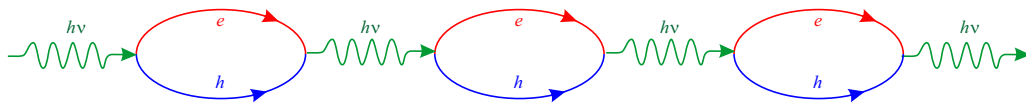


図 4.6 励起子ポラリトンの概念図。光子が励起子を生成し、電子正孔の再結合により光子を生成、これがシリーズで生じる。

(4.101) で  $n = 1$  の基底状態のみ考え、 $E_g - E_{\text{ex}} \equiv \hbar\omega_0$  と置き、励起子以外の寄与による誘電関数を  $\epsilon_s$  と置くと、 $\gamma = \Gamma/\hbar$  として、

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_s \left( 1 + \frac{\Delta_{\text{ex}}}{\omega_0 - \omega - i\gamma} \right) \quad (4.102)$$

と書ける。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$ 、角振動数  $\omega_t = \omega_0$  の横波に対しては、(4.82) のポラリトン方程式が成立する。一方、縦波解に対しては、 $\epsilon_r(\omega) = 0$  であるから、その角振動数  $\omega_l$  は

$$\omega_l = \omega_0 + \Delta_{\text{ex}} = \omega_t + \Delta_{\text{ex}} \quad (4.103)$$

で与えられる。 $\Delta_{\text{ex}}$  を縦波-横波分裂 (longitudinal-transverse splitting) と呼ぶ。

今、波数  $k = k_1 + ik_2$  とすると、(4.82)、(4.102) より、

$$\left\{ \frac{\omega^2 \epsilon_s}{c^2} \left( 1 + \frac{\Delta_{\text{ex}}}{\omega_0 - \omega} \right) = k_1^2 - k_2^2, \quad (4.104a) \right.$$

$$\left. \pi \delta(\omega - \omega_0) \frac{\omega_0^2 \epsilon_s}{c^2} = 2k_1 k_2 \quad (4.104b) \right.$$

である。(4.104b) は  $\omega = \omega_0$  での共鳴を表し、それ以外では、(4.104a) で  $k_2$  を無視し、

$$\omega \sqrt{\frac{\omega - \omega_0 - \Delta_{\text{ex}}}{\omega - \omega_0}} = \frac{ek_1}{\sqrt{\epsilon_s}} \quad (4.105)$$

より、励起子ポラリトンの分散関係を得ることができる。

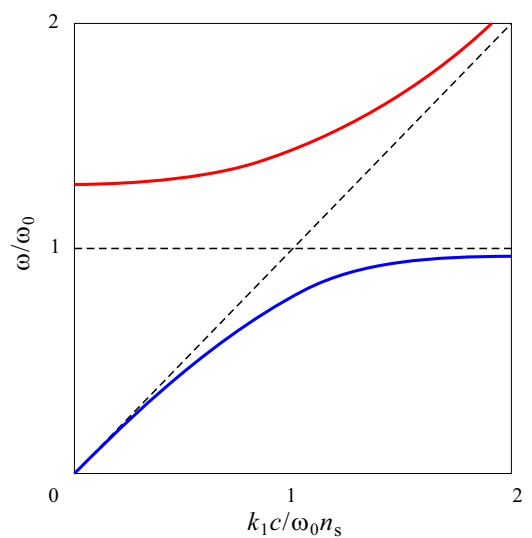


図 4.7 励起子ポラリトンの分散関係の模式図

## 付録 4B : Kramers-Kronig の関係式

良く知られていると思うが、Kramers-Kronig の関係式についても簡単に述べる。複素数  $\omega$  に対する複素関数

$$\chi(\omega) = \chi_1(\omega) + i\chi_2(\omega), \quad \chi_1, \chi_2 \in \mathbb{R} \quad (4B.1)$$

を考える。  $\chi(\omega)$  は、  $\omega$  平面の上半分で解析的で、遠方で  $1/|\omega|$  より速く減衰するとする。この時  $\chi_1, \chi_2$  の間には、  $\mathcal{P}$  を主値積分として、

$$\chi_1(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad \chi_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_1(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (4B.2)$$

が成り立つ。これが Kramers-Kronig の関係式である。

## 付録 4C : 半導体の格子振動

格子振動 (lattice vibration) は、原子が時間平均位置としては平衡位置に局在しながら、運動エネルギーを持ってその周りで振動する現象である。格子振動は、半導体物理の中でも大変大きなテーマであり、本来は最低でも導入だけでも一章まるまる使って議論すべきであるが、講義時間の関係で無理であるので、付録においてぎりぎり最低限の導入を行っておく。

### 4C.1 1次元の格子振動

電子系の場合と同様、1次元系を使い、基本概念を導入する。

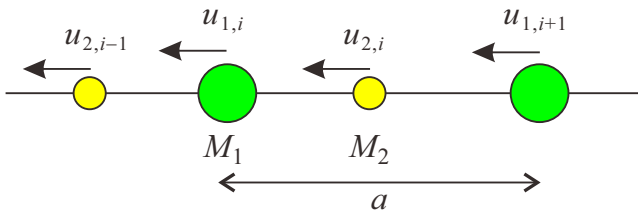


図 4C.1 1次元格子振動の模式図

図 4C.1 に示すように、長さ  $a$  の単位胞を持ち、  $M_1, M_2$  種類の質量の原子を持つ 1次元結晶を考える。格子振動による原子位置の平衡位置からのずれを、図のように  $u_{1j}, u_{2j}$  ( $j$  は整数) のように表す。各原子に働く力を、平衡位置にある時の隣接原子間距離  $a/2$  に対するシフトに比例する調和振動子のな力であるとすると、力に対する係数を  $\alpha$  として、運動方程式

$$M_1 \frac{d^2 u_{1,j}}{dt^2} = -\alpha(u_{1,j} - u_{2,j-1}) + \alpha(u_{2,j} + u_{2,j-1}) = \alpha[-2u_{1,j} + (u_{2,j} - u_{2,j-1})], \quad (4C.1a)$$

$$M_2 \frac{d^2 u_{2,j}}{dt^2} = \alpha[-2u_{2,j} + (u_{1,j} - u_{1,j-1})] \quad (4C.1b)$$

が得られる。

方程式 (4C.1) は、並進移動操作  $j \rightarrow j + n$  ( $n$  は整数) に対して不変であるから、解は Bloch 関数で書くことができる。1次元方向に  $x$  座標を取り、波数  $q$  に対して

$$\begin{cases} u_{1,j}(x_j) = e^{iqx_j} u_{1,q}, \\ u_{2,j}(x_j + a/2) = e^{iq(x_j + a/2)} u_{2,q} \end{cases} \quad (4C.2)$$

と書くことができる。これを (4C.1) へ入れることで、

$$\begin{cases} M_1 \frac{d^2 u_{1,q}}{dt^2} = 2\alpha(-u_{1,q} + \cos \frac{ja}{2} u_{2,q}), \\ M_2 \frac{d^2 u_{2,q}}{dt^2} = 2\alpha(-u_{2,q} + \cos \frac{ja}{2} u_{1,q}) \end{cases} \quad (4C.3)$$

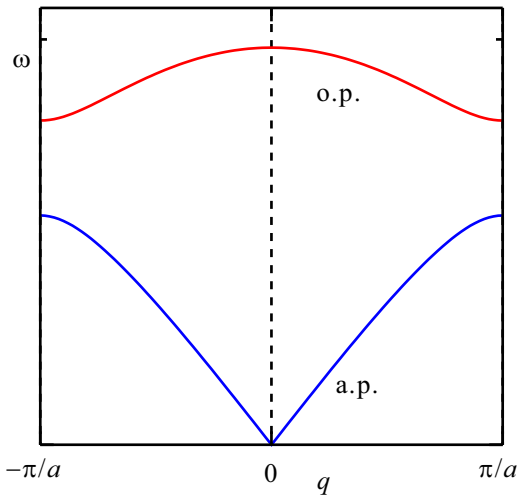


図 4C.2 式 (4C.5) の 1 次元格子の格子振動分散関係  $\omega(q)$  を,  $M_1 = 2M_2$  の場合についてプロットしたもの.

となる. 解を求めるため,  $u_{(1,2),q} \propto \exp(i\omega t)$  と置くと,

$$\begin{pmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos \frac{qa}{2} \\ -2\alpha \cos \frac{qa}{2} & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,q} \\ u_{2,q} \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A} \begin{pmatrix} u_{1,q} \\ u_{2,q} \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (4C.4)$$

となり,  $\{u_{i,q}\}$  が  $\vec{0}$  以外の解を持つためには,  $|\mathbf{A}| = 0$  であるから,

$$\frac{\omega_{\pm}^2}{\alpha} = \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - 4 \frac{\sin^2(qa/2)}{M_1 M_2}} \quad (4C.5)$$

が得られる.

$\omega$  として負でない値を考えると, (4C.5) は 2 つのモードを持ち, 分散関係  $\omega(q)$  は, 図 4C.2 のようになる.

以下は, 次元に関係ない名称の話である.  $q \approx 0$  付近で直線的になるモードを, **音響モード** (acoustic mode),  $q = 0$  でも  $\omega$  が有限で  $d\omega/dq = 0$  となるモードを**光学モード** (optical mode) と呼ぶ. 音響モードは,  $q \approx 0$  の分散関係が, 空気中の音波や真空中電磁波のように直線的で群速度が一定であることからこのように呼ばれ, 光学モードは, 波数が小さくエネルギーの大きなフォトンとの相互作用が生じ得ることから, このように呼ばれている. これらを量子化したものを音響フォノン (acoustic phonon), 光学フォノン (optical phonon) と呼ぶ.

## 4C.2 閃亜鉛鉱型結晶の格子振動

単位胞内に 2 種類の原子がいる 3 次元的な結晶の例として閃亜鉛鉱型 (ZB) 結晶を取り上げ, 格子振動を考える. ブラベー格子は fcc であるが, ZB 結晶構造は, fcc の「格子点」に 1 個の原子を置いた「fcc 結晶」を考える.

(以下, 次回に続く.)

## 参考文献

- [1] 櫛田孝司「光物性物理学」(朝倉書店, 2009).
- [2] 佐藤勝昭「光と磁気」(朝倉書店, 1988).
- [3] S. Sugano ed., "Magneto-optics" (Springer, 1999).
- [4] A. K. Zvezdin and V. A. Kotov, "Modern Magneto-optics and Magneto-optical Materials" (IOPP, 1997).
- [5] 青野 修「電磁気学の単位系」(丸善, 1990).



- [6] 高梨弘毅「磁気工学入門」(共立出版, 2008)
- [7] 2018年のSI単位改定については, 沢山解説が出ているが, 改定自身というより単位系全般の話を非常に易しく解説したものとして, 和田純夫, 大上雅史, 根本和昭「単位がわかると物理がわかる」(ベレ出版, 2002).
- [8] 浜口智尋「半導体物理」(朝倉書店, 2001). 英語版は C. Hamaguchi, “Basic Semiconductor Physics” (Springer, 2017).
- [9] G.W. Fehrenbach, W. Schafer, and R. G. Ulbrich, *J. Luminescence*, **30**, 154 (1985).
- [10] M. D. Sturge, *Phys. Rev.* **127**, 768 (1962).
- [11] J. I. Jang, Y. Sun, B. Watkins, and J. B. Ketterson, *Phys. Rev. B* **74**, 235204 (2006).