

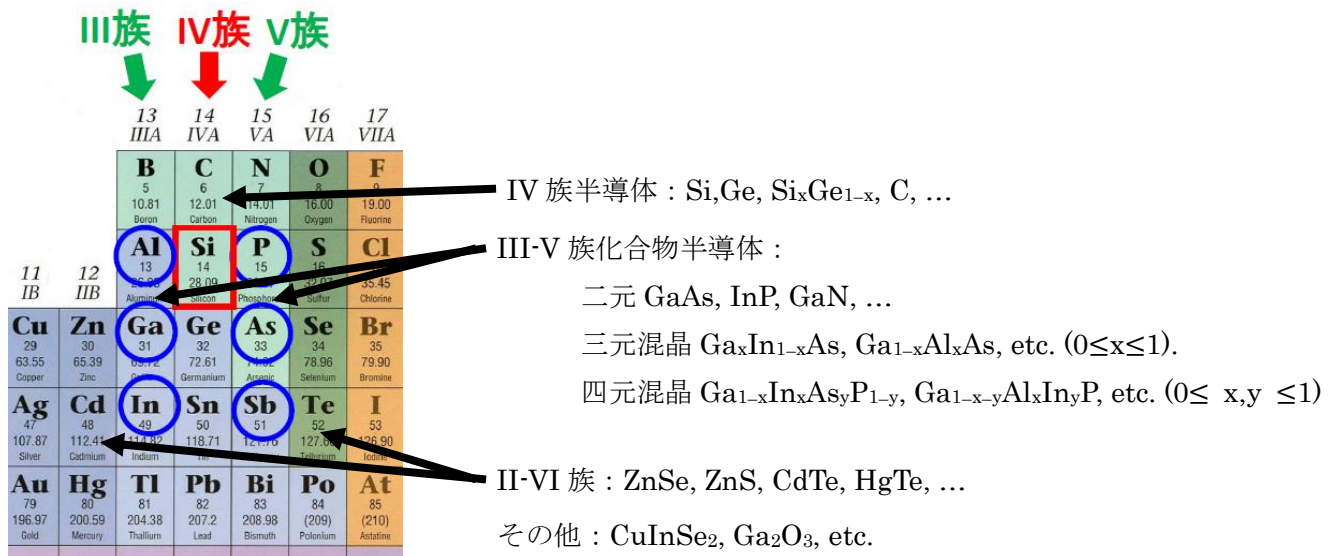
講義ノート 第4回 半導体の光吸収と放出の基礎

- ・半導体のバンド構造
- ・半導体の光吸収・誘導抄出・自然放出
- ・熱放射（プランクの式）
- ・光吸収と放出の関係（アインシュタインの関係式）

[教科書：3.1～3.2.1 節(p.40～46)、2.1 節(p.23～26)、2.4 節(p.34～36)、参考書：第3章]

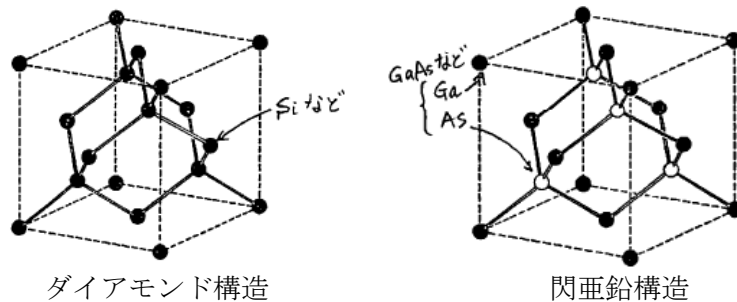
半導体

（すでに半導体物性の講義で説明があった内容と思うが、復習を兼ねて説明）



周期表

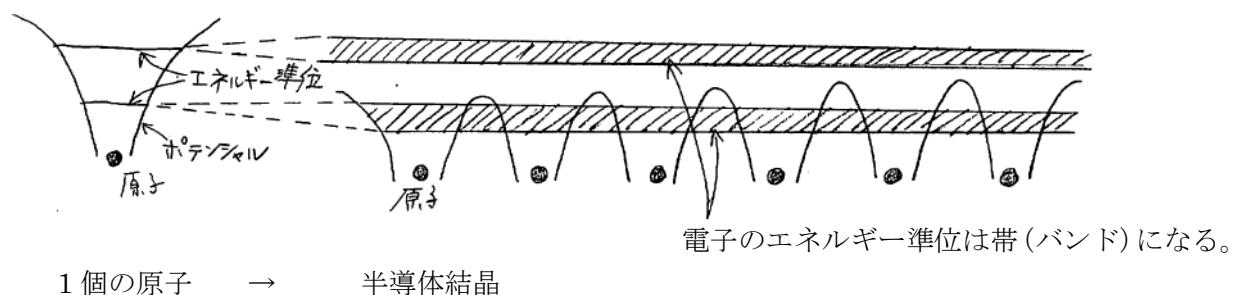
結晶構造の例

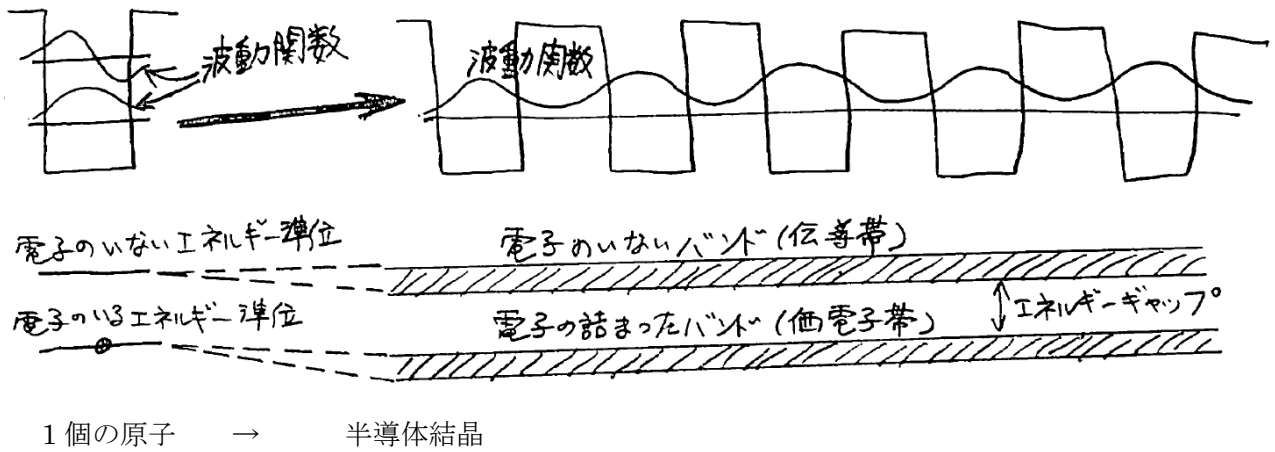


バンド構造

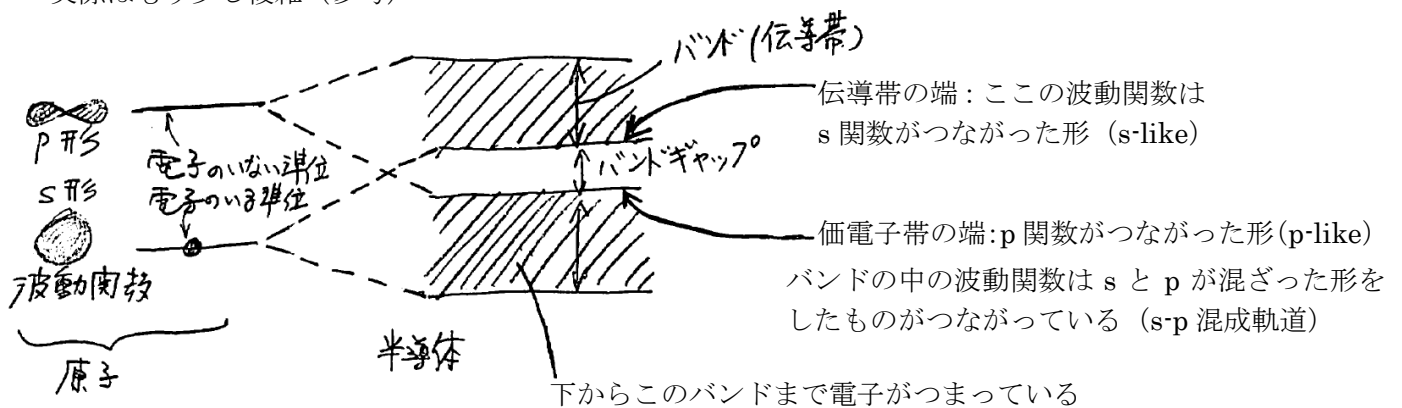
半導体結晶は原子が周期的に並んでいる。

単純な 1 原子の周期構造なら 1 周期に原子 1 個ずつ、化合物や複雑な配列なら 1 周期に原子は複数。ここでは 1 周期（基本セル）を簡単な 1 原子の図で書いている。



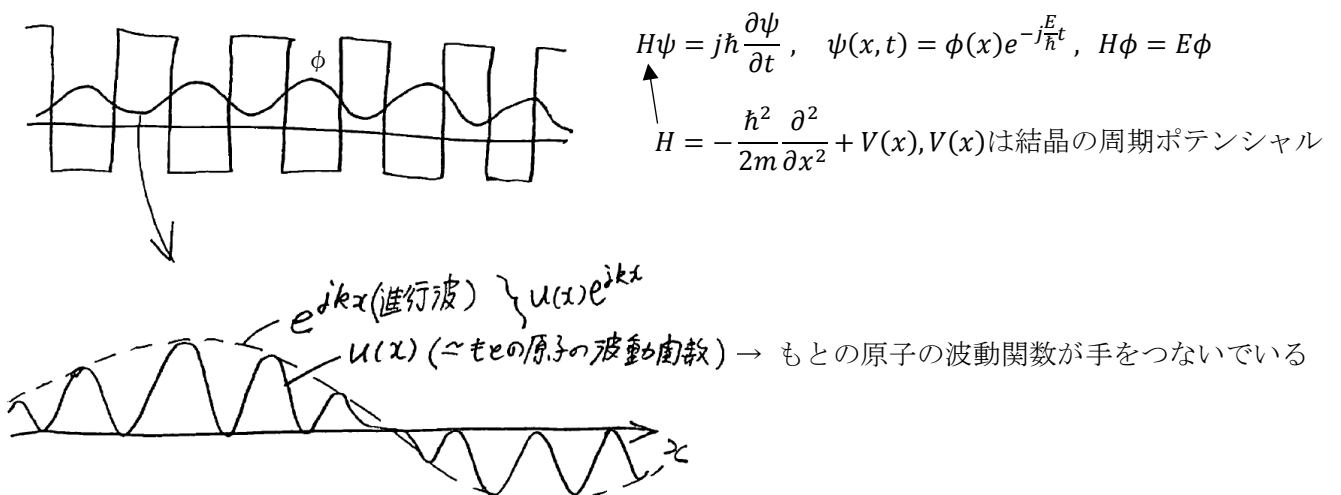


実際はもう少し複雑 (参考)



波動関数

バンドの中のひとつのエネルギー準位の電子の波動関数 ϕ



ブロッホ関数

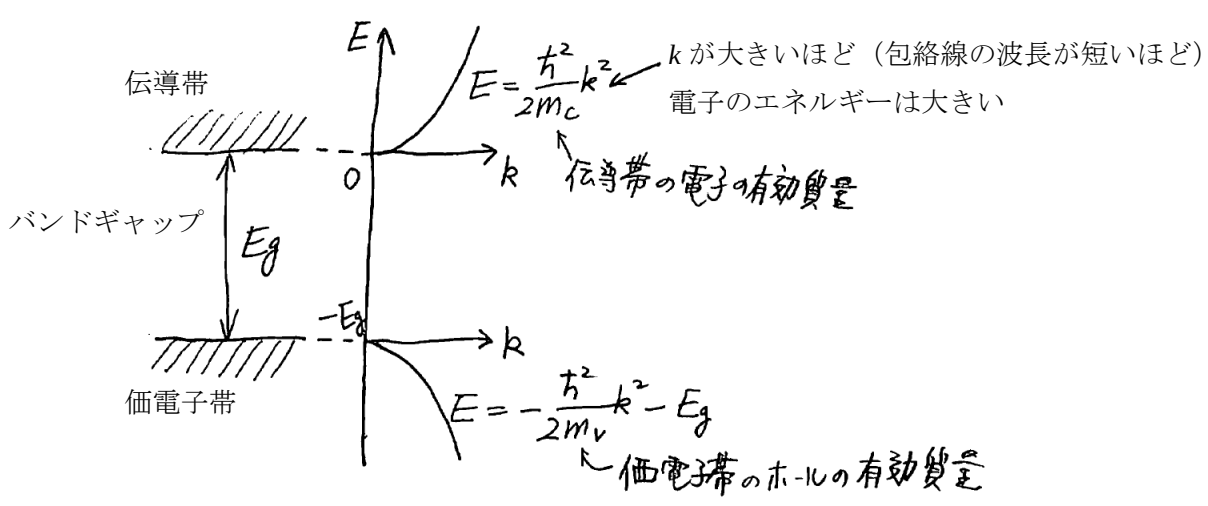
$$\phi(x) = u(x) e^{jkx}$$

もとの原子の波動関数に近い形
原子の間隔で並んでつながっている
(原子間隔の周期関数)

包絡線
進行波になっている

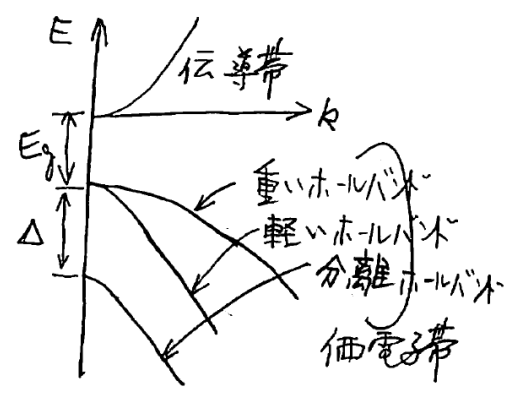
3次元では $u(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$
 $\mathbf{r} = (x, y, z)$
 $\mathbf{k}$ は包絡線 (進行波) の波数ベクトル
 $\mathbf{k}$ の方向に包絡線が進む (電子波が進む)

エネルギーと波数の関係

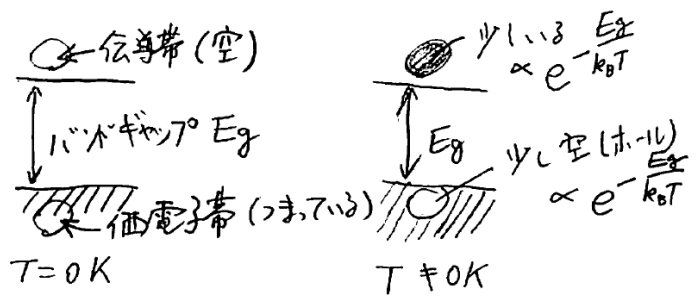


実際のバンド構造 (参考)

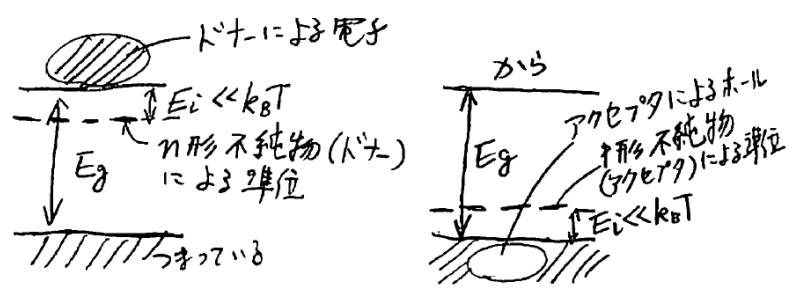
ダイヤモンド構造や閃亜鉛構造の半導体 (Si, Ge, GaAs など) では価電子帯に 3 つのバンドが重なっている。



電子とホール



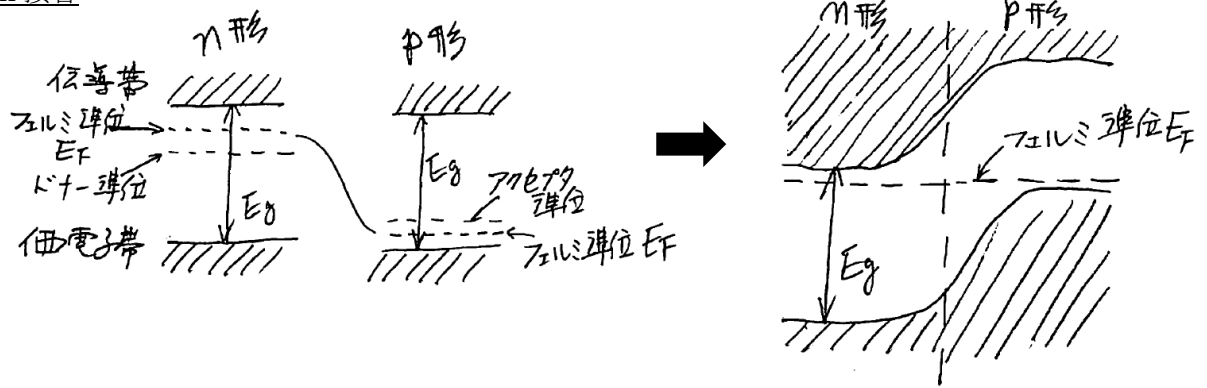
不純物導入



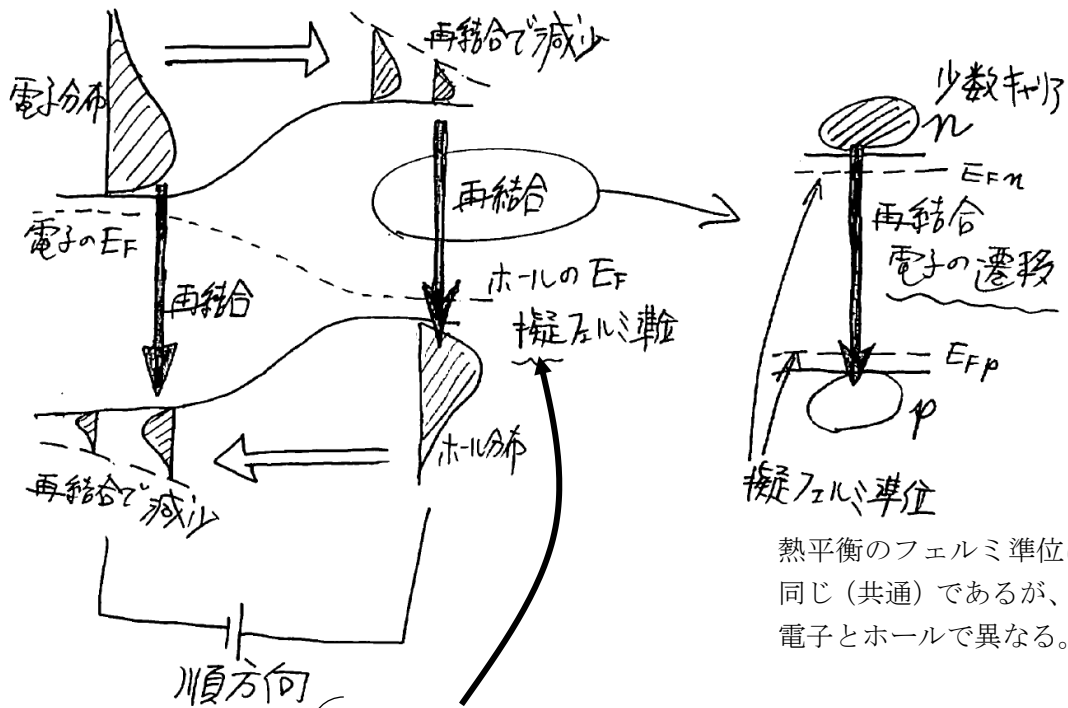
(例)

- ドナー: Si に As, P など, GaAs に Sn, Te など
- アクセプタ: Si に Al, In など, GaAs に Zn など

p-n 接合



光の吸収と放出



熱平衡のフェルミ準位は電子とホールで同じ (共通) であるが、擬フェルミ準位は電子とホールで異なる。

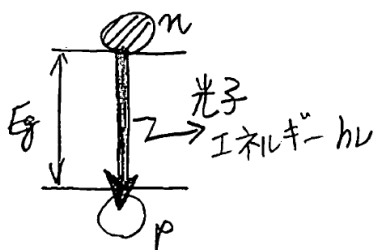
通常のフェルミ準位は熱平衡でしか定義されない。

電子とホールが外部から注入されているときは熱平衡ではないが、フェルミ分布になっている。このときのフェルミ準位 (に相当する準位) を熱平衡と区別して「擬」(quasi-) をつける。

再結合

注入された電子とホールの結合 (少数キャリアが消滅)

放射再結合 (光を出す結合、LED、レーザに利用)



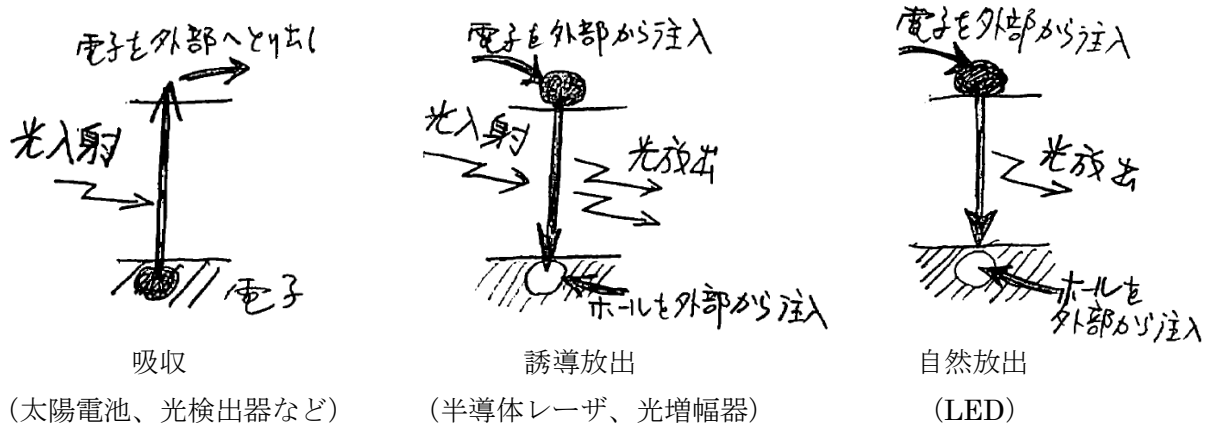
非放射再結合 (光を出さない結合)

(例)



LED や半導体レーザでは、少数キャリアを一ヶ所に溜め込んで放射再結合を積極的に起こさせる。このために単純な pn 接合ではなく、ヘテロ接合が使われる (後述)。

光の吸収・放出



バンドギャップと放出・吸収される光の波長との関係

$$E_g \approx h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

真空中の光速
光の周波数
光の波長
プランク定数
 $6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

バンドギャップは半導体材料によって異なるので、目的にあった材料を使う

LED や半導体レーザなどの発光デバイスでは、この式だけで材料を決めることができず、直接遷移型の半導体でなければならない（後述）。

上記の 3 つの吸収・放出は独立ではなく、互いに関係がある。→ アインシュタインの関係
これを説明する前に、準備として、以下でプランクの熱放射を説明する。

(問) バンドギャップ E_g の単位を[eV] (エレクトロンボルト)、光の波長の単位を[μm] (ミクロン) で表したとき、次の式の に入る数値を求めよ。(1 に近い数値になる。有効数字 3 桁まで求めよ。)

$$E_g [\text{eV}] = \frac{\text{}}{\lambda [\mu\text{m}]}$$

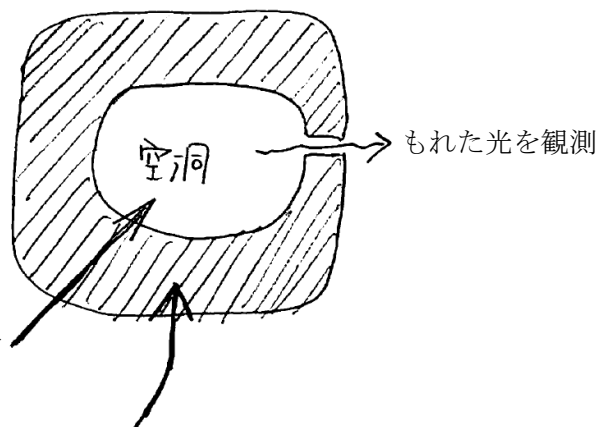
(問) 可視光の波長は $0.4 \sim 0.7 \mu\text{m}$ の範囲にある。次の半導体の中から赤色（波長約 $0.7 \mu\text{m}$ ）と青色（波長約 $0.45 \mu\text{m}$ ）に使える材料を選択せよ。

半導体	(Ga _{0.47} In _{0.53})As	GaAs	(Ga _{0.7} Al _{0.3})As	(Ga _{0.8} In _{0.2})N	GaN
E_g (eV)	0.75	1.4	1.8	2.8	3.4

プランクの熱放射

黒体放射

熱せられた物質から放射された光が、その中に
ある空洞に満ちている状態を考える。



いろいろな波長の光が壁から発生して
この中で定在波が生じる

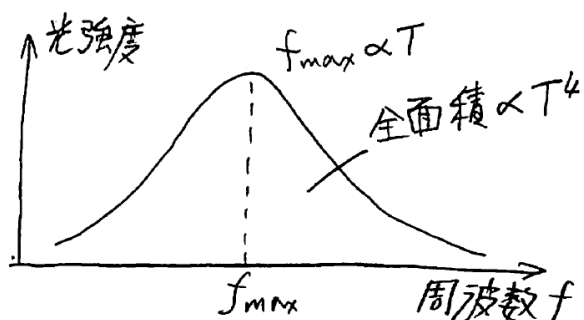
壁は黒体（すべての光を波長によらず完全に吸収する物質）

黒体から発生する光の波長分布は温度 T のみの関数（黒体放射）

このような黒体放射における光の波長分布（周波数分布）はどうなるかについて説明する。

（19 世紀に製鉄所の鉄鉱炉の温度を発光色から知りたいという要求からこの議論が始まった。）

結果を先に示すと下図のようになる。



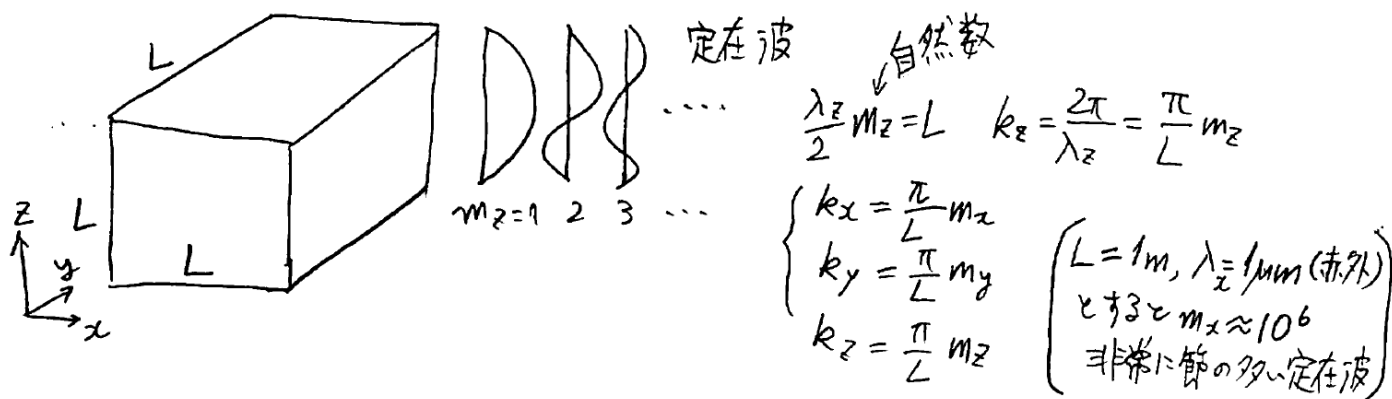
温度上昇とともに f_{max} が上昇。

（たとえば、温度とともに発光色が

赤外 $\rightarrow$ 赤 $\rightarrow$ 黄 $\rightarrow$ 青白）

これを導出する。

まず空洞の中の光の定在波の数（モード数）を計算



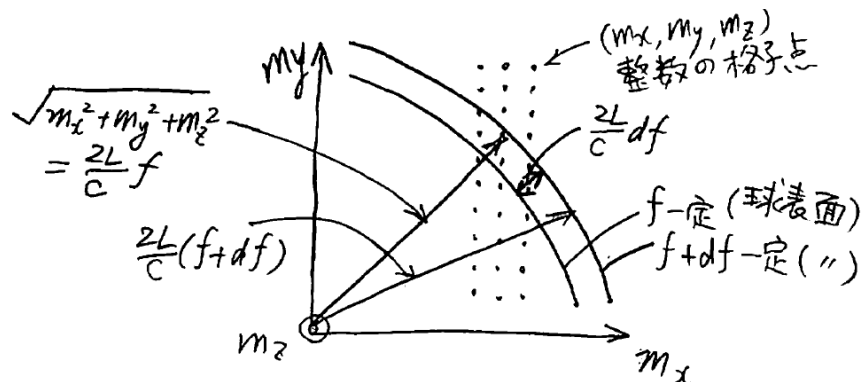
$$\text{許される定在波の波数} \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (m_x^2 + m_y^2 + m_z^2)$$

$$\text{許される定在波の周波数} \quad f = \frac{c}{\lambda} = \frac{ck}{2\pi} = \frac{\pi}{2L} \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2}$$

許される f は整数（自然数） m_x, m_y, m_z で決まるとびとびの（離散的な）値。

m_x, m_y, m_z は小さな値から非常に大きな値 ($\rightarrow \infty$) までとり得る

これに対応して、許される f は、低い周波数ではそれらの間隔は広く、高い周波数では間隔が狭くなり、ほとんど連続になる。



f と $f+df$ の間にある定在波の数

$$Ndf \cong \text{球殻(薄皮)の体積} \cong \underbrace{4\pi \times \left(\frac{2L}{c}f\right)^2}_{\text{表面積}} \times \underbrace{\left(\frac{2L}{c}df\right)}_{\text{厚さ}} \times \underbrace{\frac{1}{8} \times 2}_{\text{定在波 1 つに偏波 2 つ}} = 8\pi \left(\frac{L}{c}\right)^3 f^2 df$$

許される f がほとんど連続だから $m_x, m_y, m_z > 0$ の部分のみ

$$\text{単位体積あたりでは } Ndf \cong \frac{8\pi}{c^3} f^2 df$$

空洞の単位体積あたり、単位周波数あたりの定在波の数（モード密度）

もし、定在波のすべてが同じエネルギー E を持つとすると

$$\text{全エネルギー} = \int_0^\infty E Ndf \rightarrow \infty \text{ (発散)}$$

したがって、すべての定在波が同じエネルギーを持つことはあり得ない

プランクの考え

- { 各モードは nhf のエネルギー (n を整数としてとびとび) を持つことしかできない。
- { 各モードが nhf のエネルギーを持つ確率は $Ae^{-nhf/k_B T}$ (ボルツマン分布、 k_B はボルツマン定数)。

A は定数で確率の総和が 1 となるように定める。

$$\sum_{n=0}^{\infty} Ae^{-nhf/k_B T} = 1 \quad \text{より} \quad A = 1 / \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nhf/k_B T}$$

f と $f+df$ の間にあるエネルギーの平均値

$$dE = \sum nhf \times Ae^{-nhf/k_B T} \times Ndf = \frac{hf}{e^{hf/k_B T} - 1} Ndf \equiv u(f)df \quad (\text{プランクの熱放射の式})$$

$$\text{全エネルギー} \quad \int dE = \int_0^\infty \frac{hf}{e^{hf/k_B T} - 1} df \propto T^4 \quad (\text{発散しない。シュテファン-ボルツマンの法則})$$

(問) 上の dE を計算し、プランクの熱放射の式を導出せよ。

$$\left(\begin{array}{l} x = hf/k_B T \text{ において、} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} / \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} \text{ を計算することになる。} \\ \text{分母は無限等比級数、分子は分母の結果を } x \text{ で微分する。} \\ \text{注：光子は区別できない粒子であり上の計算式にはそれが含まれている。} \\ \text{つまり、光子はボルツマン粒子ではなくボーズ粒子である。} \end{array} \right)$$

(問) 上のように周波数 f と $f + df$ の間にあるエネルギー密度 $u(f) df$ が求められたが、波長 λ と $\lambda + d\lambda$ の間にあるエネルギー密度 $u_\lambda(\lambda) d\lambda$ は

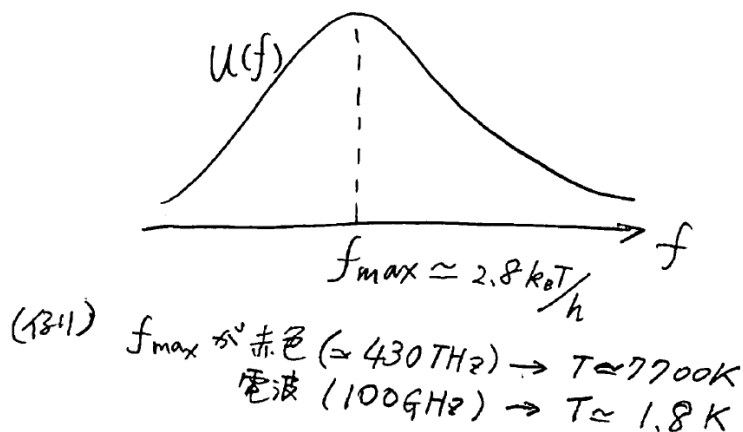
$$dE = u(f) df = u\left(\frac{c}{\lambda}\right) \frac{df}{d\lambda} d\lambda \equiv u_\lambda(\lambda) d\lambda$$

により $u(f) df$ と関係付けられる。 $u_\lambda(\lambda)$ を計算せよ。

以上から、黒体放射の周波数（エネルギー）分布を与えるプランクの式が次のように得られる。

$$dE = u(f) df = \frac{\frac{8\pi h}{c^3} f^3}{e^{hf/k_B T} - 1} df$$

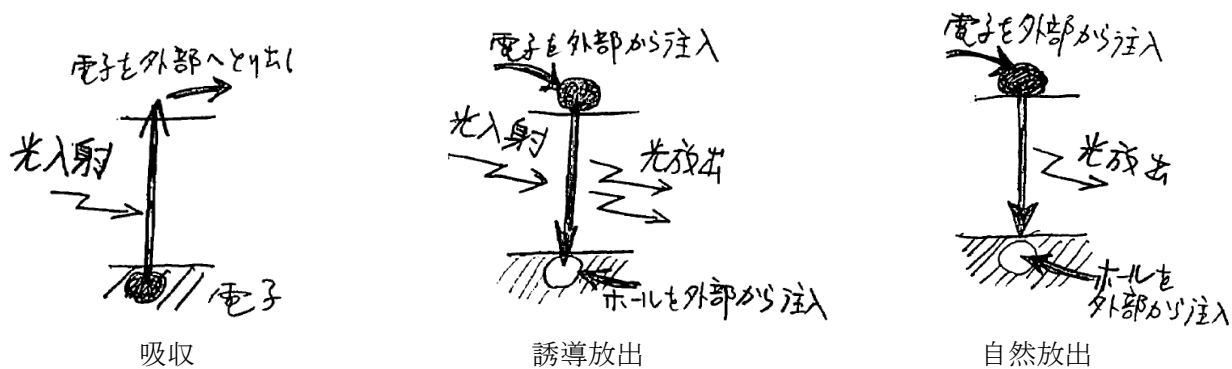
$$\begin{cases} hf \ll k_B T \text{ では } u(f) \propto k_B T \\ hf \gg k_B T \text{ では } u(f) \propto e^{-hf/k_B T} \end{cases}$$



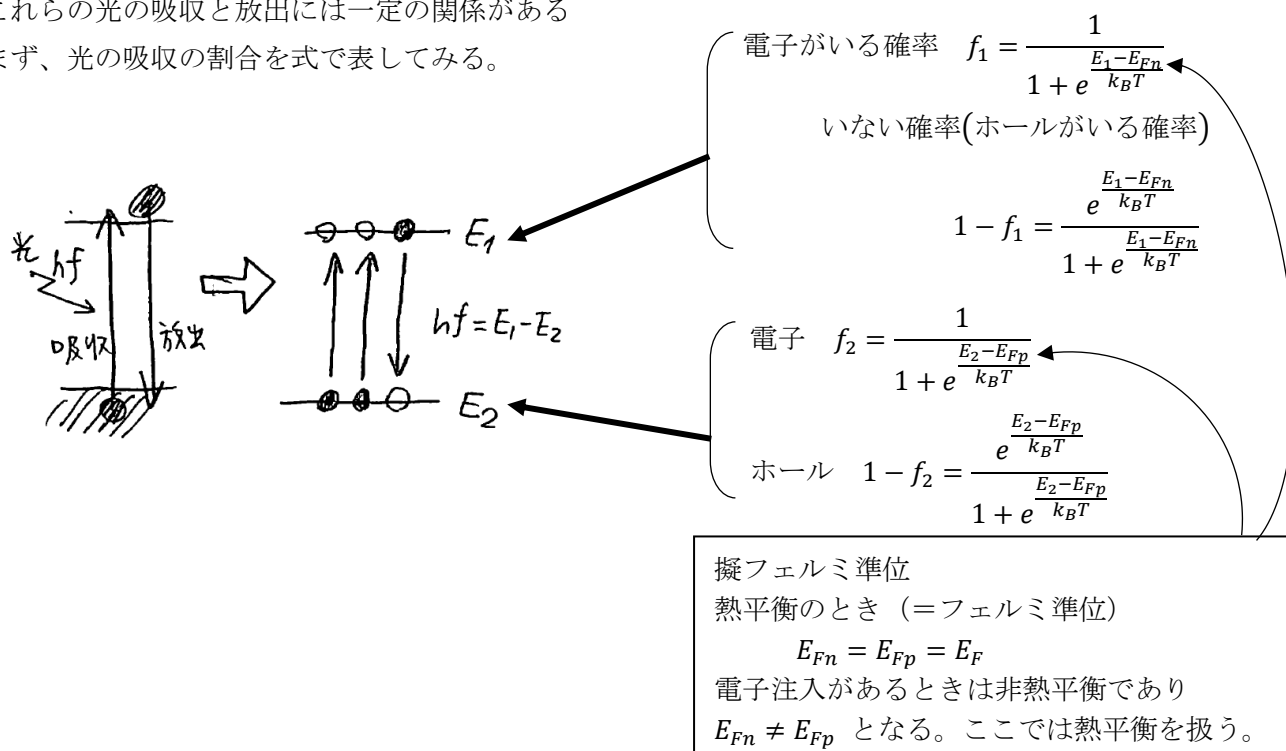
(問) すべての物体からはプランクの熱放射の式にしたがう光が放射されている。(理想的な黒体とは限らないのでやや異なるが、基本的に同じ。)

人体 (約 36°C) から放射されている光のエネルギー密度が最大となっている周波数と波長を求めよ。

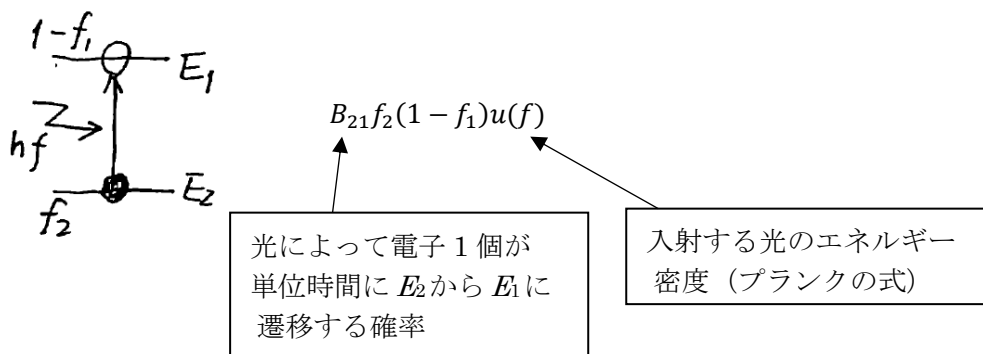
アインシュタインの関係式



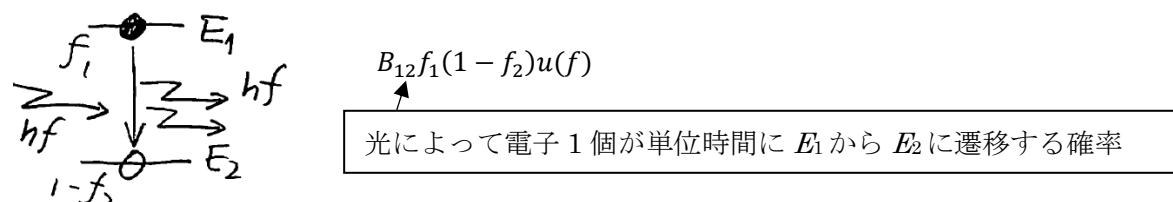
これらの光の吸収と放出には一定の関係がある
まず、光の吸収の割合を式で表してみる。



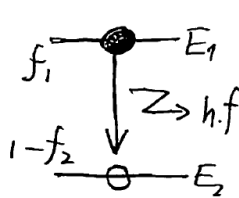
光吸収の割合／単位時間



誘導放出の割合／単位時間



自然放出の割合／単位時間



$$A_{12}f_1(1-f_2)$$

自然に光を放出して電子 1 個が単位時間に E_1 から E_2 に遷移する確率

熱平衡では 光吸収の割合＝光放出の割合

$$B_{21}f_2(1-f_1)u(f) = B_{12}f_1(1-f_2)u(f) + A_{21}f_1(1-f_2)$$

光吸収 誘導放出 自然放出

この関係式を書き直すと $u(f) = \frac{A_{12}/B_{12}}{\frac{B_{21}f_2(1-f_1)}{B_{12}f_1(1-f_2)} - 1}$

この式の f_1 と f_2 にフェルミ関数を代入して $E_1 - E_2 = hf$ を用いると $u(f) = \frac{A_{12}/B_{12}}{\frac{B_{21}}{B_{12}} \frac{e^{hf/k_B T}}{e^{hf/k_B T} - 1} - 1}$

この式はプランクの熱放射に等しいはずであるから、次の関係式が得られる。

$$\begin{cases} A_{12} = \frac{8\pi f^2}{c^3} hf B_{12} \\ B_{12} = B_{21} \end{cases}$$

これらがアインシュタインの関係式。これらから以下のことがわかる。

▶ 吸収が大きいほど放出（誘導放出と自然放出）も大きい

（電子 1 個の吸収確率

＝誘導放出確率

＝1 モードあたりの自然放出確率／1 個の光子エネルギー）

▶ 周波数が高いほど自然放出確率は大きい

熱平衡ではないとき（電子注入があるとき）は、光吸収の割合≠光放出の割合

外部から光が入射したとき

正味の誘導放出の割合＝誘導放出の割合－吸収の割合

$$= B_{12}f_1(1-f_2)u(f) - B_{21}f_2(1-f_1)u(f)$$

$$= B(f_1 - f_2)u(f)$$

アインシュタインの関係式から $B_{21} = B_{12} \equiv B$

$$\begin{cases} f_1 > f_2 \text{ のとき} & \text{誘導放出} > \text{吸収} & \text{したがって正味で誘導放出（光増幅）} \\ f_1 < f_2 \text{ のとき} & \text{誘導放出} < \text{吸収} & \text{したがって正味で吸収} \end{cases}$$

（問）上で得られた正味の誘導放出が起こる条件を擬フェルミ準位を用いて表すと

$$E_{fn} - E_{fp} > hf$$

となることを示せ。