

講義資料

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/>

統計力学・半導体

解析力学 課題 (2020/4/27)

極座標 (r, φ, θ) におけるラグランジ方程式の具体的な式を導出せよ。
 r, φ, θ は互いに依存しないこととする。

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

1. 極座標における運動エネルギーは次の式であらわされる。右辺の各項目について説明せよ。

$$T = \frac{1}{2} m \left[\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + (r \sin \theta)^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right]$$

2. ポテンシャル $V(r, \varphi, \theta)$ におけるラグランジアン L を (r, φ, θ) を用いて表せ
3. 一般化運動量を導出せよ
4. ラグランジ方程式から一般化座標 (r, φ, θ) に対応する運動方程式を導け

PowerPoint 等のプレゼンテーションファイルにして提出

期限：今日の17:00までに
できたところまで可

解析力学: ラグランジ方程式

一般化座標 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$

ラグランジアン $L = T - V$

(Lagrangian)

T : 運動エネルギー V : ポテンシャルエネルギー

一般化(正準)運動量 $p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}$

オイラー・ラグランジの方程式

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0$$

デカルト座標の $L = \frac{1}{2} m \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 - V(r)$ で確かめる

$$q_r = x_r, \dot{q}_r = \frac{dx_r}{dt} = v_r \quad (r = x, y, z)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} = \frac{\partial L}{\partial v_r} = m \frac{dr}{dt}, \quad \frac{\partial L}{\partial q_r} = \frac{\partial L}{\partial x_r} = \frac{\partial V}{\partial x_r}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - \frac{\partial L}{\partial q_r} = m \frac{d^2 x_r}{dt^2} - \frac{\partial V}{\partial x_r} = 0$$

Newtonの運動方程式

極座標での速度

$$x = r \cos \theta \cos \phi$$

$$y = r \cos \theta \sin \phi$$

$$z = r \sin \theta$$

$$\dot{x}^2 = \left(\dot{r} \cos \theta \cos \phi + r \dot{\theta} \sin \theta \cos \phi + r \dot{\phi} \cos \theta \sin \phi \right)^2$$

$$\dot{y}^2 = \left(\dot{r} \cos \theta \sin \phi + r \dot{\theta} \sin \theta \sin \phi - r \dot{\phi} \cos \theta \cos \phi \right)^2$$

$$\dot{z}^2 = \left(\dot{r} \sin \theta - r \dot{\theta} \cos \theta \right)^2$$

$$\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 = \dot{r}^2 + \left(r \cos \theta \cdot \dot{\phi} \right)^2 + \left(r \dot{\theta} \right)^2$$

Electronic conduction in amorphous

**アモルファス半導体における
電子伝導**

アモルファス半導体研究の初期の疑問

Blochの定理

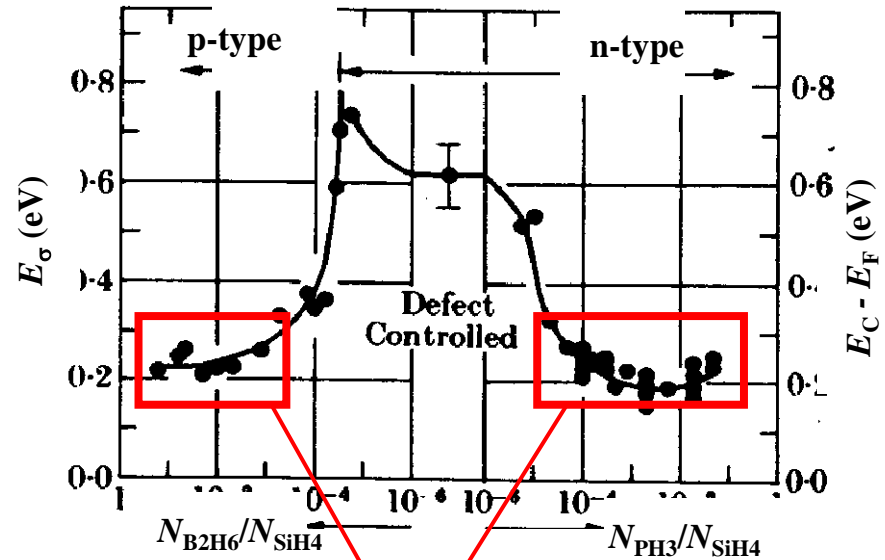
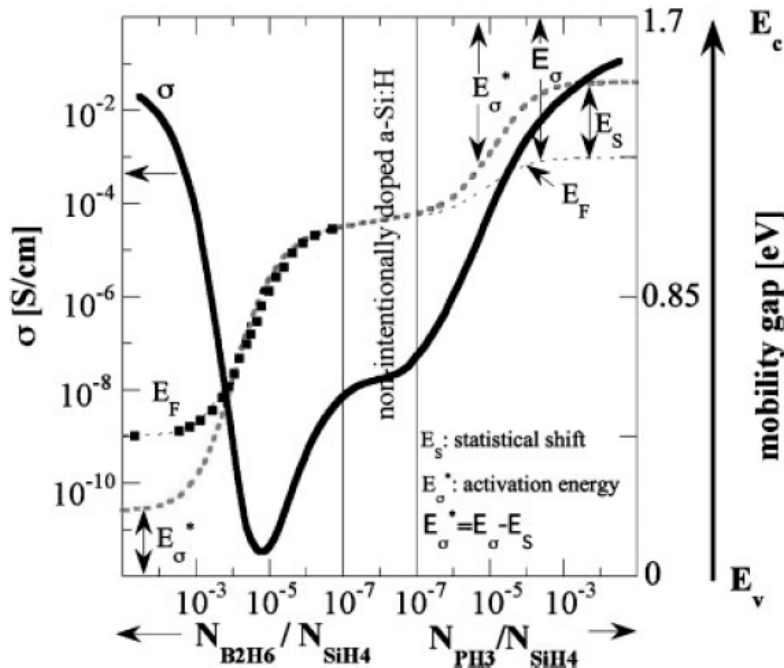
- ・電子が散乱されずに移動できるのは、完全周期系に限られる

金属電子論

- ・バンドギャップはBZ端において進行波と反射波が定在波を作るために生じる

- ・なぜアモルファス物質でバンドギャップが生じるか？
- ・なぜアモルファス半導体で電子伝導が起こるか？
- ・アモルファス半導体では有効質量の概念はナンセンスか？
- ・高移動度のアモルファス半導体は存在するか？

a-Si:Hの電気伝導度とキャリア輸送



measured value of dark conductivity σ , measured value of activation energy E_a , and Fermi level E_F for a-Si:H layers, produced by PECVD on glass, in p -type layers ($N_{B_2H_6}/N_{SiH_4}$) and n -type layers (N_{PH_3}/N_{SiH_4}). Values of σ and E_a are plotted against the carrier concentration N for p -type and n -type layers according to,⁴ assuming thereby a constant bandgap E_g and a band correction E_s has been assumed. The equivalent bandgap of a-Si:H is taken to be 1.7 eV, while drawing the graph; this corresponds

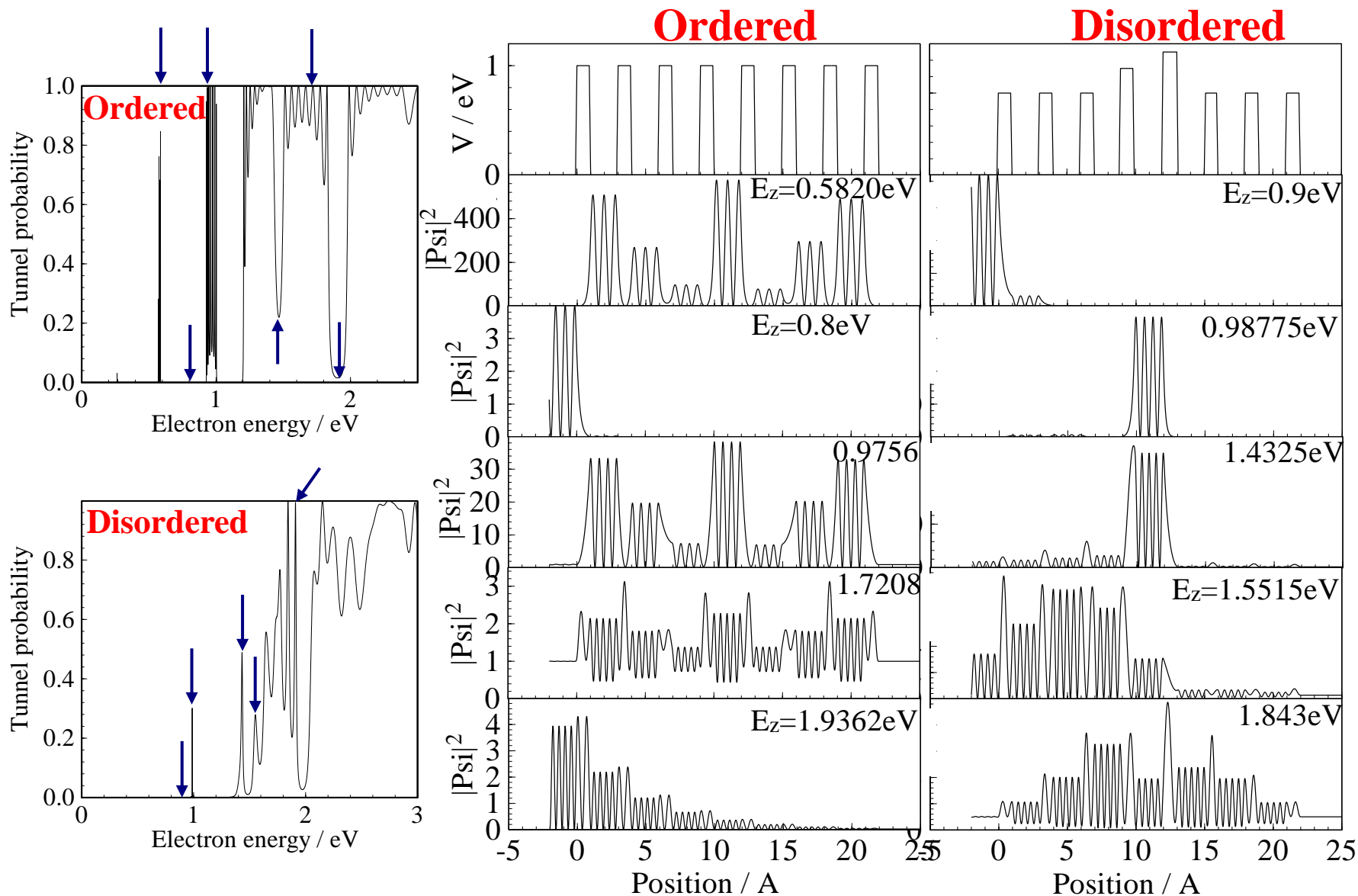
**活性化エネルギーが ~0.2 eV で飽和:
縮退伝導に入らない**

局在すそ状態密度が大きい
ドナー準位がNegative-U

移動度 < ~1 cm²/Vs

- ・縮退伝導はしない
- ・移動度 < ~1 cm²/Vs

欠陥のある多重量子井戸における電子の透過



ポテンシャルゆらぎと局在

田中一宣他著、アモルファスシリコン、オーム社

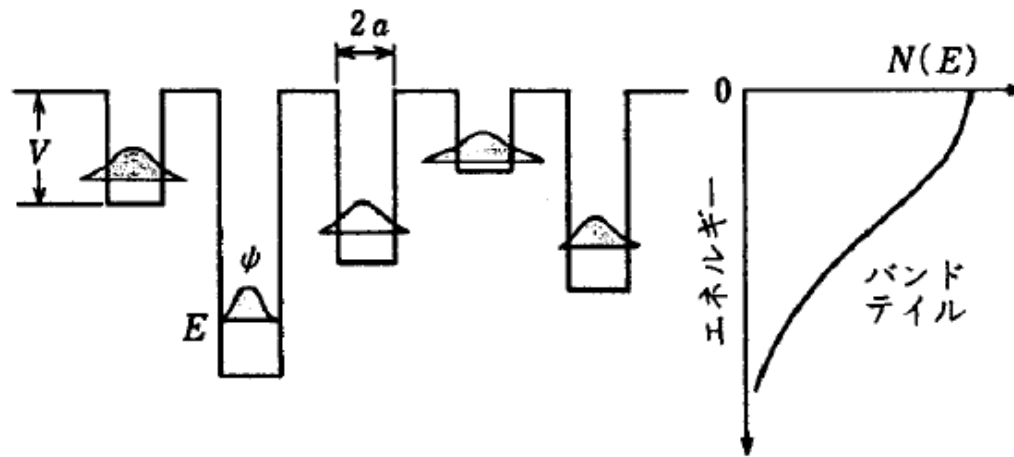
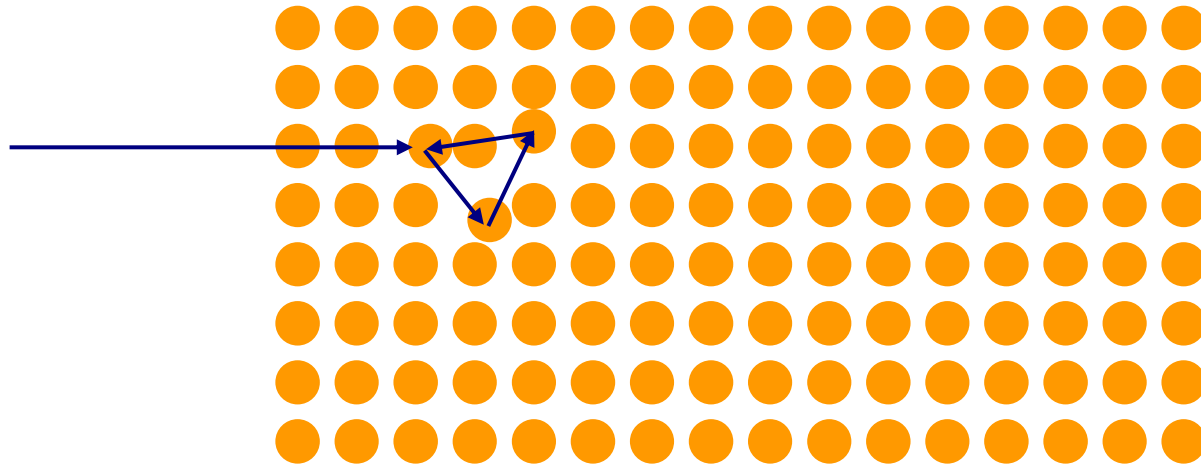


図 4・4 バンド端でのポテンシャルゆらぎの単純化モデルとバンドテイル状態

乱れのある結晶における電子の透過



- ・背景の結晶部分は電子の透過だけに寄与するので差分だけ考える



- ・乱れた構造による散乱と干渉の結果、定在波をつくる
アンダーソン局在

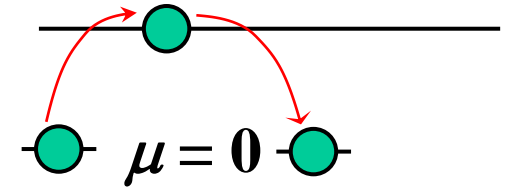
2種類のホッピング伝導

最近接ホッピング

キャリアが局在状態に捕獲され、熱的に移動度端以上に励起されて伝導に寄与する

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{T} \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)$$

捕獲キャリアの熱励起はフォノンによって行われるため、キャリアの移動は常に格子変形を伴う



Small polaron と同義

⇔ **Large polaron:**

キャリアは格子変形を伴って移動する。

ただし局在化しておらず、平均自由行程が結晶周期より長い

※ 元素単体半導体以外での電子伝導は多かれ少なかれ、
すべてlarge polaron

可変長ホッピング (広範囲ホッピング)

(Variable-range hopping: VRH)

キャリアが局在状態に捕獲され、別の局在状態へトンネル伝導する

局在状態のエネルギーに分布があることを考慮するため、ホッピングと呼ばれる

Small polaron

$$S = \pm \frac{k}{e} \ln \left(2 \frac{N-n}{n} \right)$$

N: 電子が占められる全サイト数
n: 電子が占めているサイト数
熱起電力は温度依存性が小さい

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{T} \exp \left(- \frac{E_H}{k_B T} \right)$$

c: n/N

a: ホッピング長

v: ホッピングに寄与する
光学フォノン周波数

$$\sigma_0 = \frac{gNc(1-c)e^2 a^2 v}{k_B}$$

J. Han, M. Shen and W. Cao, Appl. Phys. Lett., 82 (2003) 67

B.J. Ingram, T.O. Mason, R. Asahi, K. T. Park, A.J. Freeman, Phys. Rev. B 64 (2001) 155114

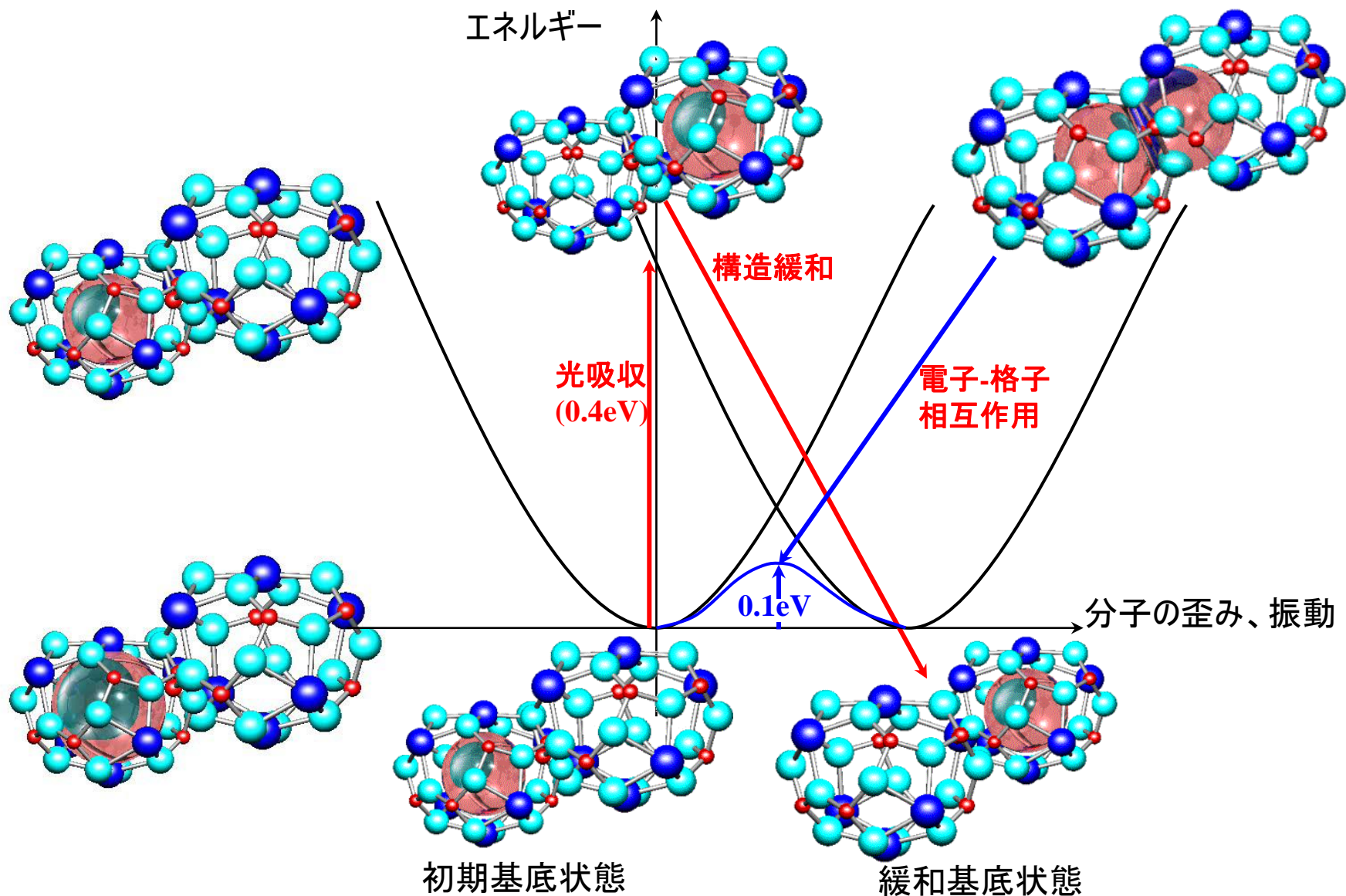
H. L. Tuller and A. S. Nowick, J. Phys. Chem. Solids **38**, 859 (1977)

J. Nell, B. J. Wood, S. E. Dorris, and T. O. Mason, J. Solid State Chem. **82**, 247 (1989)

H. Böttger and V. V. Bryksin, Hopping Conduction in Solids (VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, Germany, 1985).

A. R. Long, in Hopping Transport in Solids, edited by M. Pollak and B. I. Shklovskii (North-Holland, Amsterdam, 1991).

C12A7:e⁻のポーラロン伝導



Mott's variable-range hopping (VRH)

- ・トンネルによって移動できるほど欠陥準位密度が高い
=>トンネル伝導では温度依存性がでない
- ・欠陥準位にエネルギー分布がある
小さい温度依存性がでる
ホッピング距離が温度によって変わる

$$\sigma = \sigma_0 \left(\frac{1}{T} \right)^{1/2} \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^r \right]$$

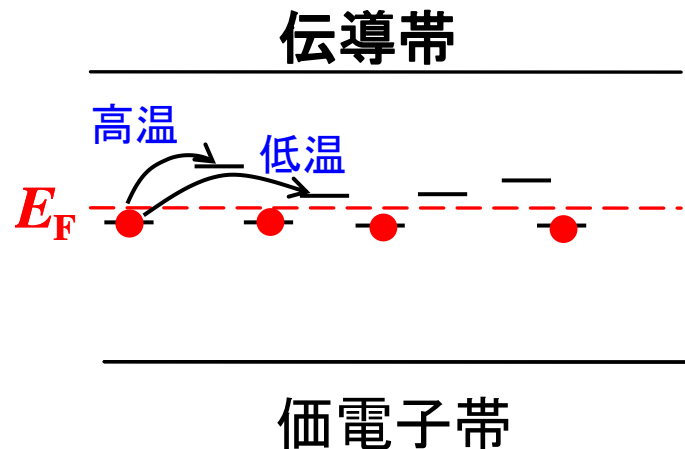
$$\sigma_0 = e^2 v_0 \left(\frac{N(E_F)}{32\pi\alpha} \right)^{1/2}$$

$$T_0 = \frac{18\alpha^3}{k_B N(E_F)}$$

$$r = 1 / (d + 1)$$

d: 伝導領域の次元

三次元VRHでは $r = 1/4$



S.R. Elliott, Physics of amorphous materials, Longman, New York, (1983).

嶋川晃一、林浩司、森垣和夫、広範囲ホッピング伝導—その大いなる問題点—、固体物理 29 (1994) 11

Mott's variable-range hopping (VRH)

- ・トンネルによって移動できるほど欠陥準位密度が高い
=>トンネル伝導では温度依存性がでない
- ・欠陥準位にエネルギー分布がある
小さい温度依存性がでる
ホッピング距離が温度によって変わる

$$\sigma = \sigma_0 \left(\frac{1}{T} \right)^{1/2} \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^r \right]$$

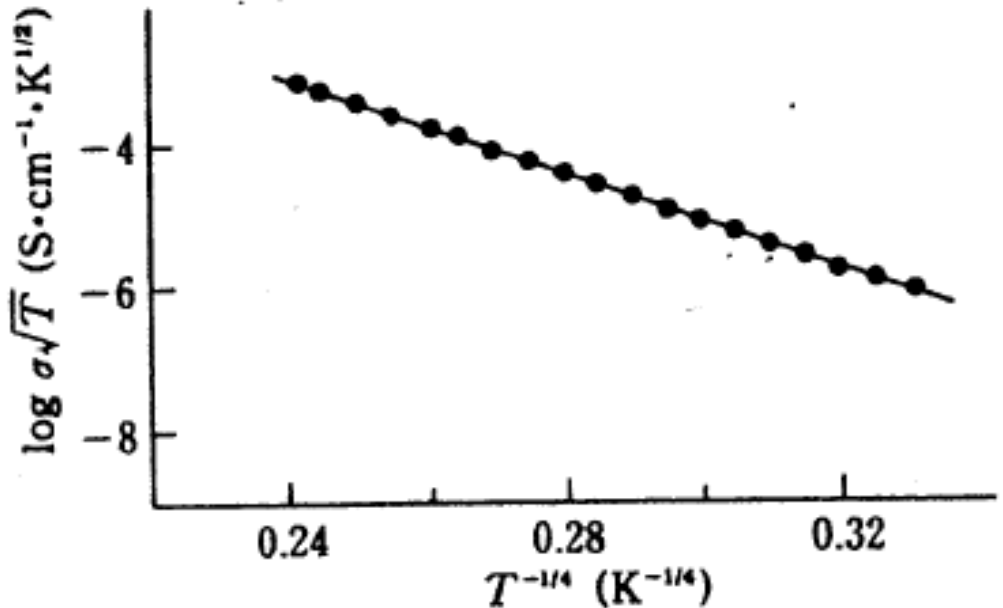
$$\sigma_0 = e^2 v_0 \left(\frac{N(E_F)}{32\pi\alpha} \right)^{1/2}$$

$$T_0 = \frac{18\alpha^3}{k_B N(E_F)}$$

$$r = 1 / (d + 1)$$

d: 伝導領域の次元

三次元VRHでは $r = 1/4$



S.R. Elliott, Physics of amorphous materials, Longman, New York, (1983).

嶋川晃一、林浩司、森垣和夫、広範囲ホッピング伝導—その大いなる問題点—、固体物理 29 (1994) 11

Hall, Seebeck符号異常

アモルファス(乱雑系)半導体

- ・Hall電圧, Seebeck係数符号がキャリア極性と逆転する
 - p型で R_H が負 : pn sign anomaly (pn符号異常)
 - n型で R_H が正、p型で R_H が負: pn sign double anomaly (二重符号異常)

pn型の判定方法

- ・デバイス (TFT, FET) 応用を考慮すると・・・
 - 容量測定
 - 問題点: 結構良い半導体・デバイスでないと測定できない
- ・光電子分光法によるフェルミ準位測定
 - 問題点: 表面バンドベンディング
 - 分解能(普通のUPSで ~ 0.1 eV)

Weak-localization (弱局在)

P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. 57, 287 (1985) through X.D. Liu, E.Y. Jiang, and Z. QW. Li, Low temperature electrical transport properties of B-doped ZnO films, J. Appl. Phys. 102, 073708 (2007)
Kaveh, M., and Mott, N.F. J. Phys. C: Solid State Phys. 14, L177 (1983)

$$\sigma(T) = \sigma_0 + \eta T^{p/2} + \lambda T^{1/2}$$

a phonon scattering model ($p = 1$)

P.A. Lee and T.V.V Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. 57 (1985) 287
W. Noun, B. Berini, Y. Dumont, P.R. Dahoo, N. Kelle, JAP 102 (2007) 063709

3D limit

$T^{p/2}$: Weak localization (WL), $p = 2$ electron-electron, $p = 3$ electron-phonon interaction

$T^{1/2}$: renormalization of effective electron-electron interaction (REEI)

bT^2 : low-T e-e Boltzmann term

$$\rho(T) = \frac{1}{\sigma_0 + \eta T^{p/2} + \lambda T^{1/2}} + bT^2$$

2D limit

$\ln T$ for WL and REEI

$$\rho(T) = \frac{1}{\sigma_0 + a \ln T} + bT^2$$

Condition required $\Lambda \sim \lambda_F$

Fermi wavelength

$$\lambda_F = 2\pi / (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Electron mean free path

$$\Lambda = h / (\rho n e^2 \lambda_F)$$