屈折率(2)

波多腰玄一

1 はじめに

前回は，誘電体および金属の屈折率のモデルを紹介した。一方，半導体における光吸収はバンド間遷移に起因しており，バンド構造を反映した複雑な挙動を示す。今回は半導体における誘電率，屈折率のモデルについて紹介する。

2 半導体のバンド構造と屈折率

⑴誘電率と屈折率

前章でも述べたように，複素屈折率をn_cと比誘電率ε_rとの関係は

$$\varepsilon_r = n_c^{\ 2} \tag{1}$$

で与えられる。本連載では，電界の時間依存性を$\exp(i\omega t)$としているので，n_cの実数部n_rおよび消衰係数κとの関係は以下のようになる。

$$n_c = n_r - i\kappa \tag{2}$$

ε_rの虚数部の符号も式⑵で決まるが，屈折率を議論している多くの論文では，これと逆の符号を採用している。そこで混乱を避けるため，この章では誘電率虚数部の符号を文献での表記に合わせることにする。したがってこの章で述べるε_rは以下で定義されるε_rである。

$$\varepsilon_r = n_c^{*2} \tag{3}$$

$$n_c^{*} = n_r + i\kappa \tag{4}$$

ε_rの実数部ε_1と虚数部ε_2，およびn_r，κとの関係は前章の式㉙，㉚と変わらない。再掲すると

$$n_r = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^{\ 2} + \varepsilon_2^{\ 2}} + \varepsilon_1}{2}} \tag{5}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_1^{\ 2} + \varepsilon_2^{\ 2}} - \varepsilon_1}{2}} \tag{6}$$

ε_1とε_2とは，よく知られているクラマース-クローニヒの関係式（Kramers-Kronig relations）で結ばれている。すなわち，

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \tag{7a}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega') - \varepsilon_\infty}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \tag{7b}$$

あるいは光子エネルギーEで表すと，

$$\varepsilon_1(E) = \varepsilon_\infty + \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{E' \varepsilon_2(E')}{E'^2 - E^2} dE' \tag{8a}$$

$$\varepsilon_2(E) = -\frac{2E}{\pi}\int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(E') - \varepsilon_\infty}{E'^2 - E^2} dE' \tag{8b}$$

これから例えば$\varepsilon_2(E)$が全領域でわかっていれば，$\varepsilon_1(E)$は式（8a）を用いて計算することができる。式⑺あるいは式⑻による変換はクラマース-クローニヒ変換（K-K変換）と呼ばれている。