

強束縛法とエネルギーバンド(1)

波多腰玄一

1 はじめに

前2章で結晶構造およびその空間周波数である波数空間における逆格子について述べた。またブロッホの定理で、結晶における固有エネルギーは、波数 k の関数として表されることを述べた。今回は半導体結晶のエネルギーバンド構造を計算する手法の一つである強束縛法について紹介する。

2 強束縛近似

半導体結晶における電子の波動関数を求める手法はいくつかあるが、いずれも高度な計算手法が必要とされる。結晶では原子が多数あり、それに伴って電子も多数存在するからである。厳密にはすべての電子の影響を考慮した計算を行わなければならない。近似手法としては、 $k \cdot p$ 摂動法や強束縛 (tight-binding) 法がある。

強束縛近似¹⁻⁵⁾は、電子が1つの原子に強く束縛されていると仮定して、各原子に局在した電子の波動関数を考え、その線形結合として結晶中の電子の波動関数を近似する手法である。以下でその概要を紹介する。

まず原子 m に局在した電子の軌道 α を考え、その波動関数を $\phi_{m\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ とする。 m は単位胞の中の原子の番号で、例えばGaAsの場合、Ga (カチオン) とAs (アニオン) である。また α は軌道の番号で、例えばs軌道、 p_x 軌道などを表す。この波動関数は前章で述べたブロッホの定理を満たしているものとする。すなわち周期ポテンシ

ルを考慮している。ただし、孤立原子に局在した軌道を仮定しているため、結晶全体のハミルトニアン固有関数ではない。単位胞中の原子と軌道を模式的に図1に示す。

ここで留意すべきことは、 $\phi_{m\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ が波数 k の関数にもなっていることである。すなわち波動関数は結晶の逆格子の座標 k にも依存する。これは前章のブロッホの定理でも説明した。したがって結晶全体のハミルトニアンを H_c とし、固有関数を $\Psi_k(\mathbf{r})$ とすると

$$H_c \Psi_k(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) \Psi_k(\mathbf{r}) \quad (1)$$

のように、エネルギー固有値 $E(\mathbf{k})$ も k に依存する。

さて $\Psi_k(\mathbf{r})$ を基底関数 $\phi_{m\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ の線形結合として以下のように表す。

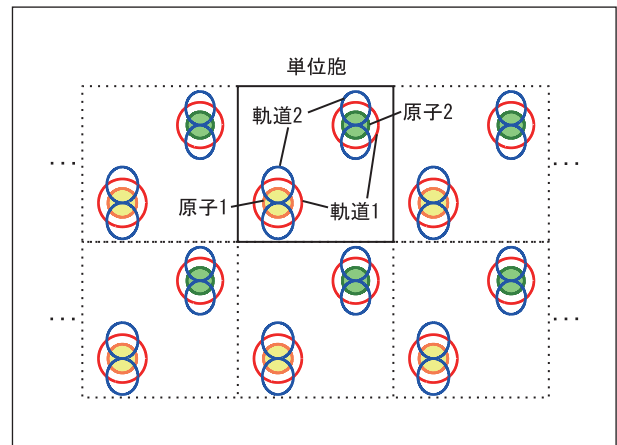


図1 単位胞, 原子, 軌道の模式図