

強束縛法とエネルギーバンド(2)

波多腰玄一

1 はじめに

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として強束縛法の基礎を述べた。強束縛近似^{1,2)}は、電子が原子核の近くに強く束縛されて局在していると仮定し、各原子に局在した波動関数の線形結合として結晶の波動関数を与える方法である。前回、ハミルトニアン H の各成分がどのように導出されるかを述べたが、実際にはこれらのパラメーターは理論計算で決めているわけではなく、厳密計算の結果と合うようにフィッティングさせている。これは強束縛法が“近似”であることの一つの限界である。すなわち強束縛法は第一原理計算ではなく、“半経験的”手法である。

今回は、閃亜鉛鉱構造およびウルツ鉱構造について、具体的にハミルトニアンがどのように表されるかを述べ、化合物半導体における強束縛法パラメーターの報告例についても紹介する。なお、ここでは取り上げないが、第26章で紹介した元素の結晶構造について、そのバンド構造がバンドパラメーターと共に文献3)にまとめられている。

2 閃亜鉛鉱構造におけるハミルトニアン

sp^3s^* 強束縛法モデルでは、閃亜鉛鉱構造に対してハミルトニアン H は次式で与えられる^{1,2,4~6)}。

$$H = \begin{pmatrix} H_0 + H_{SO}^{(1)} & H_{SO}^{(2)} \\ H_{SO}^{(2)\dagger} & H_0 - H_{SO}^{(1)} \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$H_0 = \begin{pmatrix} H_a & H_{ac} \\ H_{ac}^\dagger & H_c \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$H_{SO}^{(1)} = \begin{pmatrix} H_{SO}^{(1a)} & 0 \\ 0 & H_{SO}^{(1c)} \end{pmatrix} \quad (3a)$$

$$H_{SO}^{(2)} = \begin{pmatrix} H_{SO}^{(2a)} & 0 \\ 0 & H_{SO}^{(2c)} \end{pmatrix} \quad (3b)$$

式(1)で $H_{SO}^{(2)\dagger}$ は $H_{SO}^{(2)}$ のエルミート共役行列、式(2)で H_{ac}^\dagger は H_{ac} のエルミート共役行列である。 H_a 、 H_c 、 H_{ac} 、 $H_{SO}^{(1a)}$ 、 $H_{SO}^{(1c)}$ 、 $H_{SO}^{(2a)}$ 、 $H_{SO}^{(2c)}$ は以下の式(4)~(10)で与えられる。なお式(4)~(10)では、便宜的に基底関数を行列の左と上に示してあるが、これは式(1)の行列の上半分に対するものであり、下半分に対しては上向きスピンと下向きスピンをを入れ替えて読むこととする。またこれらの式におけるパラメーターの添字a、cはそれぞれアニオンおよびカチオンを示し、s、pはそれぞれs軌道、p軌道に対応している。

$$H_a = \begin{pmatrix} |s_a\rangle \\ |X_a\rangle \\ |Y_a\rangle \\ |Z_a\rangle \\ |s_a^*\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{sa} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{pa} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{pa} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{pa} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{s^*a} \end{pmatrix} \quad (4)$$