2-1 内部不純物準位による共鳴散乱に基ずく負性抵抗の可能性

金沢大・工　　　清水立生

Subsidiary valley に付随した不純物準位が存在することが，最近，理論的にも実験的にも確められ，応用的見地からも注目されている。[1,2] そのような不純物準位が main valley の連続エネルギーの中にある場合には，main valley のキャリヤがそのような内部不純物準位によって共鳴散乱を受けることが期待される。このような散乱確率はキャリヤのエネルギーが内部不純物準位のエネルギーの近くにある時に非常に大きくなるという大きなエネルギー依存性を持っており，その結果，負性抵抗が生ずる可能性がある。こゝでは，まず，グリーン関数を使って，このような内部不純物準位による共鳴散乱確率を計算し，それを使って負性抵抗が生ずる可能性について議論する。

次のようなモデル・ハミルトニアンを出発点にする。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \tag{1}$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k} \varepsilon(k)\, a_k^+ a_k + \varepsilon_0 b^+ b \tag{2}$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{k} (v\, a_k^+ b + v^* b^+ a_k) \tag{3}$$

こゝで $\varepsilon(k)$ は main valley のエネルギー，ε_0 は内部不純物準位のエネルギー，a_k^+, a_k は main valley のキャリヤの creation 及び anihilation operator, b^+, b は内部不純物準位の電子の creation 及び anihilation operator, v, v^* は内部不純物準位と main valley の状態の間の相互作用定数である。a_k^+, a_k に関するグリーン関数 $G(k,k;E)$ は完全に求めることが出来て，次のようになる。

$$\frac{1}{2\pi} G^{-1}(k,k;E) = E - \varepsilon(k) - \frac{|v|^2}{E - \varepsilon_0 + \frac{|v|^2}{E-\varepsilon(k)} - |v|^2 \sum_{k'} \frac{1}{E-\varepsilon(k')}} \tag{4}$$

(4)式の右辺の虚数部分を求めることにより，散乱確率 $1/\tau(E)$ は次のようになる。

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{2\pi |v|^4 Z(E)\, N}{\hbar\left[(E-\varepsilon_0)^2 + \pi^2 |v|^4 Z^2(E)\right]} \tag{5}$$

こゝではエネルギー・シフトは無視してある。また，これまでは不純物が1個だけある場合を考えて来たが，単位体積中にN個あるとして，それらによる散乱が独立に起るとしてN倍した。$Z(E)$ は main valley の状態密度である。簡単のためにキャリヤの散乱は(5)式によってのみ起るとして，次式によって電気伝導度を計算する。

$$\sigma = -\frac{2e^2}{3m^*} \int_0^\infty \tau(E)\, E \frac{df}{dE} Z(E)\, dE \tag{7}$$

こゝで分布関数 $f(E)$ はボルツマン型を仮定する。但し，電界によってキャリヤが hot になり，電子温度が T_e になっているとする。また，

$$Z(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E} \tag{8}$$

であるとする。(7)式の計算を実行すれば

$$\sigma = \frac{n e^2 h^4 \varepsilon_0^2}{6\pi (2\pi m^*)^{3/2} |v|^4 N \sqrt{k_B T_e}} \times$$

$$\times\left[1-2\left\{2-\frac{|v|^4}{4\pi^2\varepsilon_0}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^3\right\}\left(\frac{k_B T_e}{\varepsilon_0}\right)+6\left(\frac{k_B T_e}{\varepsilon_0}\right)^2\right] \tag{9}$$

となる。こゝで k_B はボルツマン定数，n はキャリヤ濃度である。T_e が電界 F の m 乗に比例するとして，負性抵抗の生ずる条件を求める。

$$J=\sigma F \tag{10}$$

$$\frac{\partial J}{\partial F}=\frac{\partial \sigma}{\partial F}F+\sigma=m\frac{\partial \sigma}{\partial T_e}T_e+\sigma<0 \tag{11}$$

したがって (9) 式より，$|v|^4(2m^*/\hbar^2)^3/4\pi^2\varepsilon_0=\alpha$ ，$x=k_BT_e/\varepsilon_0$ とおいて，

$$(6+9m)x^2-2(2-\alpha)\left(1+\frac{m}{2}\right)x+\left(1-\frac{m}{2}\right)<0 \tag{12}$$

のとき，微分抵抗は負となる。(12)式の左辺が負になり得る条件は

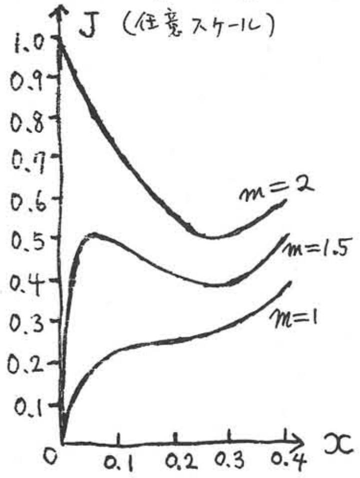
$$\left\{\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)^2+\frac{9}{2}\right\}m^2+\left\{(2-\alpha)^2-6\right\}m+\left\{(2-\alpha)^2-6\right\}>0 \tag{13}$$

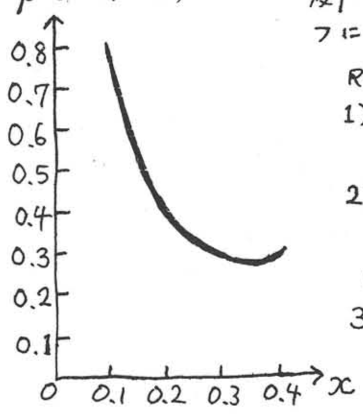
故に $\alpha=0$ の時は $m>0.81$ ，$\alpha=0.27$（後述の数値例）の時は $m>1.1$ が負性抵抗の生ずる条件となる。

次に少し定量的計算を行って見る。Paul は n-CdTe において見られるガン効果の原因がこゝで述べた内部不純物準位による共鳴散乱にあるのではないか，と言っている。[3] そこで，それに対する定量的考察をしよう。定量的計算を行うに際して一番分らない量は相互作用定数 v であるが，次のようにして estimate 出来る。

$$|v|\approx\sqrt{\pi a^{*3}/g}\;\delta \tag{14}$$

g は subsidiary valley の数，a^* は subsidiary valley に付随した不純物準位のボーア半径，δ はその valley orbit splitting の程度の大きさの量である。n-CdTe に対して妥当と思われる値として $N=10^{17}\,cm^{-3}$，$m^*=0.1\,m_0$，$\varepsilon_0=0.25\,eV$，$g=3$，$a^*=10\,Å$，$\delta=0.6\,eV$，$T_e=300°K$ を用いれば，$\alpha=0.27$（上述）となり，(9) 式より $\mu=\sigma/ne\approx10^6\,cm^2/V\cdot sec$ となる。しかるに，n-CdTe では $\mu\approx10^3\,cm^2/V\cdot sec$ であるから，内部不純物準位による共鳴散乱はあまり効いていないのではないかと思われる。しかし，適当な物質で N をもっと大きいものを使えば負性抵抗の得られる可能性があるものと思われる。最後に上述の数値について電流 J 及び易動度 μ の電子温度依存性をグラフに示しておく。





References

1) 清水：固体物理 3 (1968) 545.

2) W. Paul : Proc. Intern. Conf. Semiconductor (Moscow, 1968) p. 16.

3) A.G. Foyt, R.E. Halsted and W. Paul : Phys. Rev. Lett. 16 (1966) 55.