

半導体バンドギャップの温度依存性

Temperature dependence of band gap in semiconductors

是常 隆

Takashi Koretsune

東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, Ookayama, Tokyo 152-8551

近年、第一原理的に計算した電子格子相互作用を用いてバンドギャップの温度依存性が定量的に再現できることが、ダイヤモンドなどの例で確認されつつある。これは、電子格子相互作用そのものが定量的に正しく評価できていることを示唆する重要な結果であるとともに、第一原理的に得られる「バンドギャップ」というものについて再考する必要があることを示すものであった。そこで、我々は、この電子格子相互作用からくるバンドギャップの補正を計算するプログラムの高速化を行い、様々な物質に対して適用したのでその結果を紹介したい。

まず、KCl や MgO などのバンドギャップの大きな系について議論する。このときは、物質により絶対零度における補正に差はあるものの、概して $d(E_g)/dT = 1\text{meV/K}$ 程度の非常に大きな温度依存性があることが分かった。これらの系は、ダイヤモンドと比較してフォノンの振動数が小さいため、比較的低い温度で線形な振る舞いをすることになり、大きな温度依存性を与えることになっているといえる。一方、Si などのバンドギャップの比較的小さい系では、絶対零度における補正も温度依存性も小さくなることが分かった。発表では、各物質での結果とともに、様々なパラメータに対する収束性などについても議論したい。