

## 吸収スペクトルから励起子とバンド端を分離することができるか

この説明には、論文 J. Camassel, et al., Phys. Rev., 17, 4718 (1978)中の、Fig.2 と、Fig.5 を使います。是非、準備して下さい。尚、著作権の関係でここには掲載しません。

Fig.2 には InSe という化合物半導体単結晶の光吸収スペクトルを 1.6K で測定した結果が示されている。励起子吸収が綺麗に出ているが、極めて質の良い単結晶で且つ極低温でないとなかなかこの様なスペクトルを得ることは困難である。

- (1) この半導体は直接遷移型半導体か、または間接遷移型半導体だろうかと言うことを考える。  
直接遷移半導体で励起子が生成される時、吸収係数はデルタ関数の形状を持つ。そこで Fig.2 を見ると、①スペクトル形状は先鋭なデルタ関数になっている、②吸収係数が  $10^3 \text{cm}^{-1}$  と大きい事がわかる。従って直接遷移であると考えて良い。ただし GaAs ではバンド端での吸収係数は  $10^4 \text{cm}^{-1}$  程度となり、この InSe の場合は一般の III-V 化合物よりは小さい。

- (2) 励起子吸収のピーク位置にのみ着目して励起子の結合エネルギーを求めよう。但し、誤差（図のデータからの読みとり誤差）についても考慮し、更に電子と正孔の質量に異方性がないもの（三次元電子帯構造）として考える。

励起子の結合エネルギーは  $E_n = E_g - R/n^2$  で表せる。また吸収強度は  $1/n^3$  に比例する。ここで  $R$  が励起子の結合エネルギーである。図には  $n = 1, 2, 3$  が明確に現れている。これらのエネルギー値を読むと、それぞれ、1.338、1.349、1.352eV となっている。読みとり誤差は概ね 1meV 程度と考えて良い。なお、ここで挿入図は吸収係数ではなく透過率になっているため、dip が  $n=2, 3$  になる事に注意する必要がある。そこで、結合エネルギーやバンドギャップの値を求めるには次の方程式を解けば良い。

$$1.338 = E_g - R, \quad 1.349 = E_g - R/4, \quad 1.352 = E_g - R/9$$

未知数が二つであるから前の二つの方程式を解くことで解は求められ、 $R=14.6\text{meV}$ 、 $E_g=1.353\text{eV}$  となる。これから更に  $n=3$  を求めると 1.351eV となり、誤差を考慮すると実験値(1.352eV)とも良い一致を示している。従って結合エネルギーは 15meV、バンドギャップは 1.353eV となる。

- (3) Fig. 5 から判るように、温度の上昇と共に励起子吸収の幅が広がりバンド端との分離が難しくなる。何故、温度が上昇すると共に励起子吸収の幅が広がるのだろうか。

励起子の結合エネルギー  $R$  は温度依存性を持たないので、 $n=1$  の吸収ピークはバンドギャップの温度依存性に平行な温度特性を持つ。しかし温度の上昇と共に励起子吸収のバンド幅が広がり、励起子吸収強度が温度依存性を持たないにも関わらずピーク強度も減少する。これは図を見ると明らかである。これは、デルタ関数をガウス分布、もしくはローレンツ分布で“たたみ込み積分”を行えば理解できる（数学の教科書、ラプラス変換の所を参照すること）。では何故、温度が上がると幅が広がるかであるが、温度の上昇に伴い励起子は電子と正孔に分解され易くなる。結合エネルギーは今 15meV で室温のエネルギー  $kT$  程度である。これは励起子の寿命が温度の上昇と共に短くなることを示しており、寿命が短くなればエネルギーの不確定性は増すことになる（Heisenberg の不確定性原理を参照）。つまり測定されるバンドのエネルギー幅が広がる事を意味している。

- (4) さて、InSe は層状半導体であることが知られている。そこで、二次元励起子が形成されたと仮定して、励起子の結合エネルギーを求めてみよう。励起子が二次元になると、一方向に閉じこめられる事でその結合エネルギーは次のようになる

$$E_n = E_g - \frac{R_{2D}}{(n-1/2)^2} \quad (\text{詳しくは教科書を})$$

従って、方程式  $1.338 = E_g - 4R_{2D}$ ,  $1.349 = E_g - 4R_{2D}/9$ ,  $1.352 = E_g - 4R_{2D}/25$  を解くことになる。前二つの式から計算すると  $R_{2D}=3.1\text{meV}$ ,  $E_g=1.350\text{eV}$  となり、 $n=3$  のピークは合わない。もちろんこの辺りの計算は誤差の中に埋もれてくるから明確に二次元で説明できないとは言えないが、三次元として扱った方がよいものと考えられる。詳しく幾つかの論文を読んでいくと、この InSe では有効質量などに違法性は現れても二次元性は見られない様である。



なお、励起子がきちんと分離できて、その形状が計算できれば、その成分を実験データから差し引く事でバンド端の吸収スペクトルが計算できる。しかし、これはかなり難しいので、詳しくは参考文献をみる事。

参考論文：

J. Camassel, et al., Phys. Rev., 17, 4718 (1978).