

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE ENERGY GAP IN SEMICONDUCTORS

Y. P. Varshni

Department of Physics, University of Ottawa, Ottawa, Canada

Physica 34 (1967) 1967-154

内容

この論文では、Varshni が、半導体のバンドギャップの温度依存に関する、新しいフィッティング手法について提案している。またこれまでの実験結果を持ち出しそれぞれの材料で比較を行い、この式がどの程度信憑性が高いかを検証している。

Varshni はこれまでの様々な実験結果よりほとんどの半導体のバンドギャップは以下に示す挙動によって表されるため、式(1)を提唱した。

$$E(T) = E(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1)$$

ここで、 $E(0)$ は 0 K におけるエネルギーギャップ、 $E(T)$ はある温度 T °C におけるエネルギーギャップ、 α, β はそれぞれ定数である。

ー バンドギャップの温度に依存した挙動

- 格子長が温度に依存して膨張することから起こる伝導帯と価電帯のシフトに起因するもの、つまりバンドギャップは、高温領域において温度と比例して変化する。この変化が見られるのは大体 1/4 程度のちょっとしただけである。
- 低温領域では、温度による拡張率は比例ではない。事実ダイヤモンド構造の固体はある温度区画で反比例する。
- バンドギャップのシフトは温度に依存した電子の格子間相互作用によって伝導帯と価電帯の相対的な位置がずれることに大きく起因している。理論的には、Debye 温度(θ)を境とした温度領域においてそれぞれ異なる挙動を示すように見える。

$$T \ll \theta \quad \Delta E(T) \propto T^2$$

$$T \gg \theta \quad \Delta E(T) \propto T$$

以上を考慮すると式(1)で記載することが出来る。

まとめ

この式を用いて ZnO 薄膜をフィッティングすると α, β はそれぞれ 8.0×10^{-4} eV/K, 775 ± 10 K となり、かなり高精度で一致した。(図 2)

TABLE I
Values of the parameters in equation (1)

Substance	Type of gap	E_g (eV)	α ($\times 10^{-4}$)	β	Source of E_g data	Debye θ (°K)
Diamond	E_{g1}	5.4125	-1.979	-1437	ref. 10	2220 ¹⁶⁾
Si	E_{g1}	1.1557	7.021	1108	ref. 11	645 ¹⁷⁾
Ge	E_{g1}	0.7412	4.561	210	ref. 11	374 ¹⁷⁾
Ge	E_{g2}	0.8893	6.842	398	ref. 11	
6H SiC	E_{g1}	3.024	-0.3058	-311	ref. 12	~ 1150 *)
GaAs	E_{g2}	1.5216	8.971	572	ref. 13	344*)
InP	E_{g2}	1.4206	4.906	327	ref. 14	301*)
InAs	E_{g2}	0.426	3.188	93	ref. 15	248*)

*) estimated from $\hbar\nu_0/k$, where ν_0 is the infrared resonance frequency taken from ref. 18.

*) calculated from elastic constants.

*) calculated from estimated values of elastic constants.

表 1 各種半導体のフィッティングパラメータ

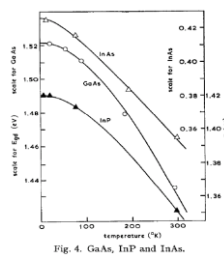


Fig. 4. GaAs, InP and InAs.

図 1 GaAs, InP, InAs vs 式 (1)

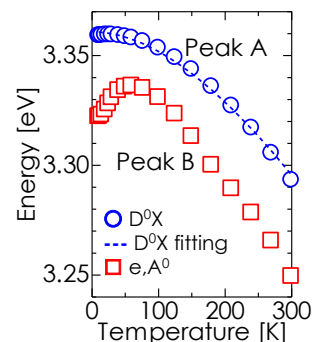


図 2 ZnO TF vs 式(1)