

# 半導体 第1回

勝本信吾

東京大学物性研究所 (理学系研究科物理学専攻)

2021年4月12日

本年度(2021年度)前期,「半導体」の講義を行うことになった。前回,1セメスター通しで講義してからは大分時間が経ち(8年間),新しく取り入れたいテーマも増えてしまった。講師は,早口で休む暇なく進める講義は苦手であり,少ない内容をのんびり進めたいと思っている。それで満足していただければ良いのだが,多くを学びたいと思っている意欲満点の聴講生には物足りなく,講師としても申し訳なく感ずるところである。そこで,講義ノートは,講義をフォローするだけでなく,進んだ内容についてもカバーし,勉強範囲を広げたい方のための参考文献の紹介なども行っていききたいと考えている。

## 第1章 結晶構造・結晶成長

### 1.1 半導体を特徴づけるもの

半導体 (semiconductors) は,通常は電気伝導によって分類される固体の一形態を指す。すなわち,フェルミ準位の周囲に大きな状態密度を持ち(すなわち,フェルミ面が存在し),良導体である金属,フェルミ準位が幅の広いエネルギーギャップの中であって電流を遮断する絶縁体の中間的存在で,温度が高い状態では電気伝導度が存在するが,低温では絶縁体になる,比較的狭いバンドギャップを持つ物質群を半導体と呼ぶ。

しかし,この定義は曖昧でもあるし,特に近年無意味化しつつある。例えば,ダイヤモンドのような,室温で5.5 eVもの大きなバンドギャップを持つ立派な絶縁体も,半導体と呼ばれ,デバイスが作られるようになっているし,グラフェンのように,バンドギャップゼロの物質も半導体とは余り呼ばれないが,半導体分野の重要な研究・応用の対象である。それよりも,「構造敏感性」(structure sensitive)という特徴の方が,近年の半導体分類に良くフィットするように講師には思われる。これは古くから使われてきた表現で,半導体デバイスと言えば接合型トランジスタかダイオードだった頃,純粋な半導体に極微量の不純物を加えることで,不純物の種類によりその性質が大きく変化することを指していた。しかし,その後,ヘテロ接合, MOS 構造,超格子,ナノ構造などが現れ,文字通り空間的な構造変化(物理的な問題の扱い方で言えば境界条件の変化)を加えることで,物性,それも特に輸送特性に大きな変化を生じること,構造敏感と呼んで良いと講師は考えている。

この「輸送特性」で,輸送対象は電荷であることがほとんどであるが,スピンにより磁気モーメントが輸送されるスピン流も重要な研究対象となってきた。デバイスの研究も盛んであり,いずれ実用になるものも出てくる可能性がある。このスピン偏極の流れであるスピン流にとっては,系の時間反転対称性によって,スピンの互いに打ち消された状態になっている非磁性の金属は,ちょうど電流にとって,原子核と電子の電荷相殺によって無電荷の空間である半導体と類似の系であると見ることができる。実際,金属内部は通常の実験条件ではほとんど等電位であるが,スピンホールスピン流は現れる。スピントロニクスではこういった系も「構造敏感」であり,半導体屋である講師から見れば半導体の仲間である。ただし,これは,本講師の独特な見方であり,通常は電荷について構造敏感なものを半導体と定義する。

## 1.2 結晶構造

固体物理の一般的基礎事項は、半導体の物理を理解するうえでいずれも欠かすことができない。出発点として、最小限これらを押さえながら半導体物理へ入っていこう。

### 1.2.1 格子

結晶固体は、原子のある構造体 (単位構造) の空間並進的繰り返し構造を持つ。これを原子が格子を組んでいる、と言う。「空間並進的繰り返し構造」とは、結晶中の任意の空間点  $\mathbf{r}$  を取った時、これと周辺の原子配置が全く等価な空間点  $\mathbf{r}'$  が結晶中に無数に存在し、これらの間に (3次元結晶の場合)3つの定ベクトル  $\mathbf{a}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) と3つの整数の組  $l_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) を使って

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \sum_{i=1,2,3} l_i \mathbf{a}_i = \mathbf{r} + \mathbf{R} \quad (1.1)$$

と表せることを言う。すると、単位構造とは、この  $\mathbf{r}$  を取った時の周辺の配置の決まった原子団、ということになる。単位構造中の1点を決め、その存在点を格子点と呼ぶ。

単位構造は、結晶の周期配列の単位であり、構造中に含む原子数が最も少なくなるように取る。式 (1.1) の  $\mathbf{a}_i$  を基本 (並進) ベクトル、 $\mathbf{R}$  を格子ベクトルと呼ぶ。3つの  $\mathbf{a}_i$  を各辺とする平行6面体は、単位構造を1個分 (適当な平行移動でちょうど1個含むようにできる) 含み、隣接する等価な構造で空間を隙間なく埋めることができる。このような立体を基本胞 (primitive cell) と呼ぶ。基本ベクトルは、取り方に任意性があることが多いが、一般には格子の空間対称性が高くなるように取る。基本胞は、上記平行6面体以外にも無数に選び方がある。基本胞を組み合わせたものを繰り返しの単位に取ることで更に対称性が高くなる場合、むしろこちらを結晶の構成単位に取った方が便利になることがある。そこで、単位胞 (unit cell) と呼ぶ立体を考え、これは、単数ないし複数の基本胞からなる、とする。

以上のように、結晶構造は単位構造と格子構造から構成される。IV族単元素半導体に良く見られるダイヤモンド構造の例を図 1.1 に示す。(a) は原子位置をやや大きな球で表しており、サイトの違いを色の濃さで表している (白黒と呼ぶ)。単位構造は白黒各1サイトの組み合わせで2原子を含む。単位構造中の適当な点 (わかりやすいのは例えば黒サイト原子位置) を格子点にとると、(b) のように、格子構造は面心立方格子 (face centered cubic, fcc) と呼ばれる形であることがわかる。図のように直交座標の単位ベクトルを  $\mathbf{e}_{x,y,z}$  として基本並進ベクトルを

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a_0}{2}(\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x) \quad (1.2)$$

と取れる。(1.2) で張られる平行6面体の基本胞を図 1.1(a) 中に実線で示した。一方、単位胞としては図に示した立方体を取ることが多い。単位胞形状 (正確には回転操作特性) により、結晶は7つの晶系に分かれ、更に単純 (「心」(center) 格子点がない)、面心、体心、底心などの格子点位置により次節で見るとように14種のブラベー (Bravais) 格子に分かれる。

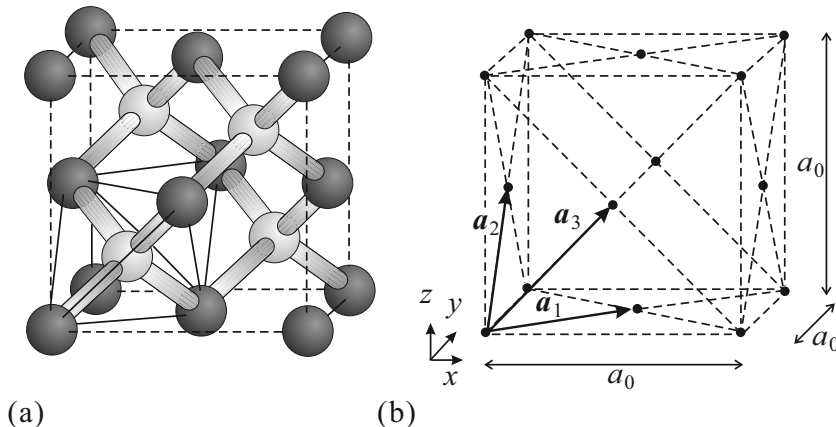


図 1.1 ダイヤモンド構造。丸は原子位置で円筒が共有結合を表す。原子種は同じだが2種類のサイト (反転位置) に対して濃さを変えて描いた。基本胞の例を実線で示す。(b)(a) の格子である面心立方格子。  $\mathbf{a}_{1-3}$  は基本ベクトル。

## 1.2.2 ブラベー格子

結晶構造は高分子などを単位構造とするものなどを考えると無数に存在するが、一方単位胞の並び方である格子の対称性に着目して分類すると、可能な格子形の数はいくつか、3次元の場合図 1.2 に示した 14 種類しかない。これら 14 種類を 3次元のブラベー格子と呼ぶ。

ブラベー格子の分類法の説明には本来、空間的対称性 についての定義が必要である。ある図形の空間対称性は、これに対して回転、鏡映、平行移動などの対称操作と呼ばれる操作を施し、この図形が不変かどうかで定義される。しかし、詳細な議論は紙幅を取りすぎるためこれを主題とする教科書 [7] など見ていただくこととし、ここではやや天下一になることをお許しいただきたい。3次元系の分類は、次のような基準による。まず、基本並進ベクトルの長さ  $a_1, a_2, a_3$  および互いのなす角  $\theta_{12}, \theta_{23}, \theta_{31}$  として (図 1.2 の右下の図を見よ)、これらの値と相互関係により分類する。1つの基本並進ベクトル周りの回転対称性を考えると、角度  $\pi/2$  が特別な値であることがわかるので、 $\pi/2$  であるかどうかも分類基準となる。このようにして、表 1.1 に示したような分類ができ、この分類は晶系と呼ばれる。物理的に可能な 3次元の晶系は、表 1.1 の通り図 1.2 の最上段に示した 7 種類である。

晶系の分類は、隣接する格子点の配置の対称性に関するものである。格子の取り方により、次の格子点まで入れた対称性を考えなければならない場合がある。例えば、立方晶の立方体格子を 2つ用意し、一方の格子点が他方の立方体の中心点になるように配置することができる。最近接のみ考えると、立方晶の対称性が失われたかのように見えるが、次の格子点との間は立方晶になっている。これは、立方体格子の中心に格子点を含む形であり、体心立方格子と呼ばれている。このように、ブラベー格子は晶系以外に、体心、面心、底心、の 3種類の「心」位置に単位構造が存在するかどうかで分類され、結局図 1.2 に示す 14 種類が存在する。名称としては心格子点の種類 (心格子点がないものは「単純」をつけて区別する場合はある)-晶系名に「格子」を付ける。

「格子」の取り方に任意性があるためブラベー格子にも任意性があり、例えば面心立方格子は面心格子点を持つ立方体全体を単位胞にとると単純立方格子と見ることもし得る。また、六方格子ではブラベー格子分類が変化するわけではないが、表 1.1 の分類法では菱形柱の繰り返し構造 (三方格子) をしているが、図 1.2 に示したように、 $120^\circ$  ず

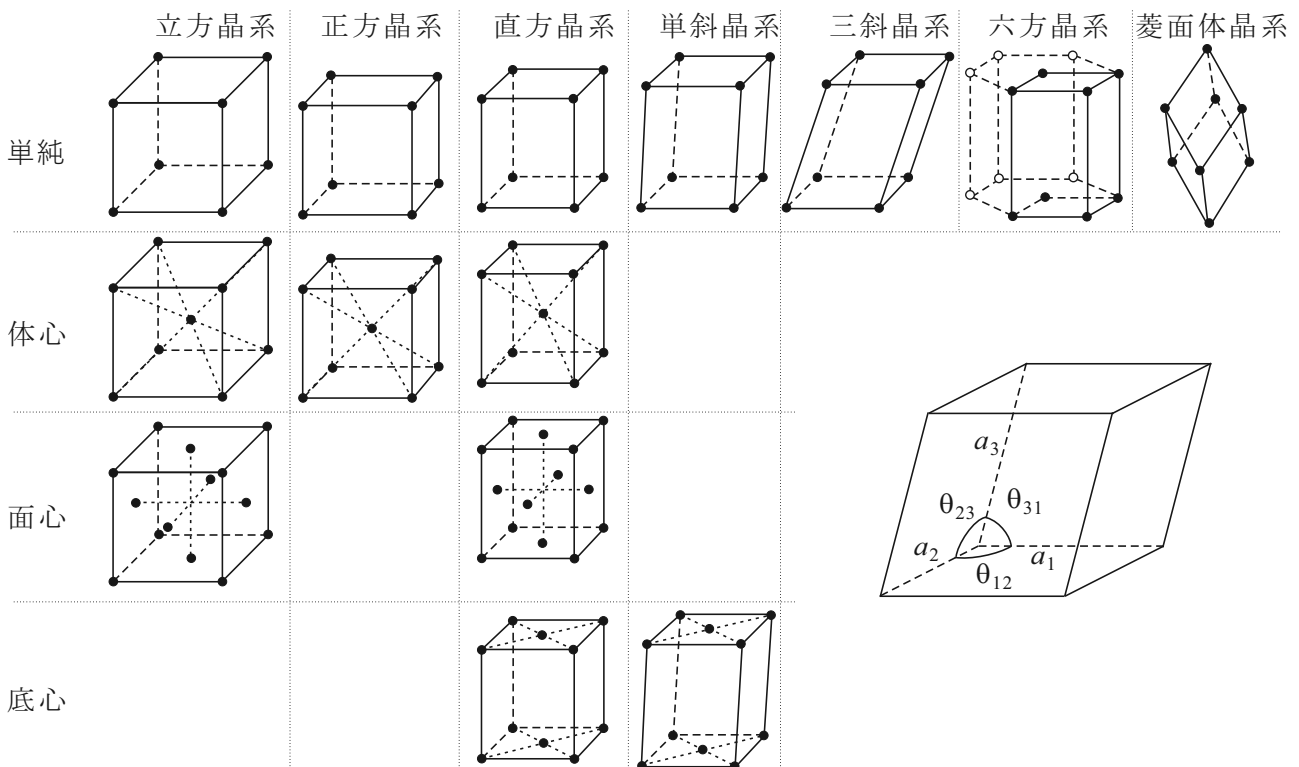


図 1.2 3次元のブラベー格子。右下の余白に示したのは、晶系の分類のためのパラメーター。

		$\theta_{12}$	$\theta_{23}$	$\theta_{31}$	$a_1, a_2, a_3$
立方晶系	cubic	$\pi/2$	$\pi/2$	$\pi/2$	$a_1 = a_2 = a_3$
正方晶系	tetragonal	$\pi/2$	$\pi/2$		$a_1 = a_2 \neq a_3$
直方晶系	orthorhombic	$\pi/2$			$a_1 \neq a_2 \neq a_3$
単斜晶系	monoclinic	$\pi/2$	$\pi/2$		
三斜晶系	triclinic	$\pi/2$			
六方晶系	hexagonal	$\pi/2$	$2\pi/3$		$a_1 = a_2$
菱面体 (三方) 晶系	rhombohedral(trigonal)	$\theta_0$	$\theta_0$	$\theta_0 \neq \pi/2$	$a_1 = a_2 = a_3$

表 1.1 3次元格子の晶系分類基準. パラメーターの定義は, 図 1.2 の右下の図の通り. なお「直方晶系」は少し前までは「斜方晶系」と呼ばれていた.

つ回転して合成した正六角柱の繰り返し構造と見ることもでき, 六方格子と呼ばれる所以である.

ブラベー格子の中でも, 体心立方格子は bcc (body-centered cubic)(格子), 面心立方格子は fcc (face-centered cubic)(格子) という略称で呼ばれる. なお, bcc, fcc に関しては, 金属結晶に良く現れ単位構造が原子 1 個で格子と結晶構造が同じであることも多く, 結晶構造についても同じ略語が使用されることがある. 金属結晶に (近似的に) 良く現れる結晶構造には, 図 1.3(c) に示した六方最密充填構造もあり, hcp (hexagonal close-packed)(構造) という略称が使用される. 結晶構造の略称としては bcc, fcc, hcp は同列であるが, ここで定義した意味での hcp 「格子」は存在しない. すなわち図 1.3 で構造中ほどの 3 つの原子位置は周辺の原子位置とは同等ではなく, 原子 1 個を単位構造に取ることができない\*1. 基本構造は図 1.3(b) の上下面内の 1 つの原子位置と中ほどの 1 つの原子位置を合わせたものにとることができ, ブラベー格子は六方格子である.

ブラベー格子は格子の対称性に着目した分類であり, 対称性の議論上重要であるが, 格子の対称性と結晶の対称性が同じではないことは, 格子では単位胞を格子「点」として捨象したことから明らかである. 例として再びダイヤモンド構造 (図 1.1) を考え, 基本胞である正四面体に左下頂点位置をその基本胞位置とし, その空間配置を考えると, 図 1.2 の fcc になっている. グレーにした平行 6 面体が基本胞 (の 1 つ) で, 2 個の原子 (単位構造) を含むことがわかる. 図 1.1 ではこれら 2 個の原子位置の違いがわかるように濃淡色をつけてあるが, もしこれらが GaAs のように異種の原子で占められているとすると, 閃亜鉛鉱構造となる (図 1.3(d)). すなわち, 閃亜鉛鉱構造もブラベー格子は fcc である. 一方, 単位胞中の 2 個の原子はダイヤモンド構造では同種, 閃亜鉛鉱構造では異種であり, これらをつなぐ線方向の反転操作に対して前者は対称, 後者は非対称となる.

もう一例, 図 1.3(e) は, (BEDT-TTF)<sub>2</sub>TCNQ と呼ばれる有機物の分子性結晶で, 原子配置は複雑であるが単位構造は分子 1 個であり, 三斜晶格子を組んでいる. 分子の持つ原子配置構造によって各基本胞には向きが生じ, 格子の対称性と結晶の対称性が異なることが理解されるであろう. 結晶構造についてはこの他, 様々な対称操作に対する対称性により空間群として, 230 個に分類されている.

### 1.2.3 逆格子とブリュアンゾーン

結晶格子は格子ベクトルによる離散的並進対称性を有しているので, 結晶格子によるポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  ( $\mathbf{r}$  は空間座標) はフーリエ級数を使って

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (1.3)$$

と展開できる. 式 (1.1) の周期性より  $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$  であるから,  $\mathbf{G}$  の条件は,

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n \quad (n: \text{整数}), \quad \therefore e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1 \quad (1.4)$$

\*1 web では, 「六方最密充填格子」が沢山検索されるが, これらの解説ではここでの「結晶構造」に対して「格子構造」という用語を使用したためこの組み合わせが生じたものである. また, 「最密充填」は, 数学的には球を最も密に詰め込むことを意味し, 現実の原子では異方性のため数学的に完全な hcp 構造を取る結晶は知られていない.

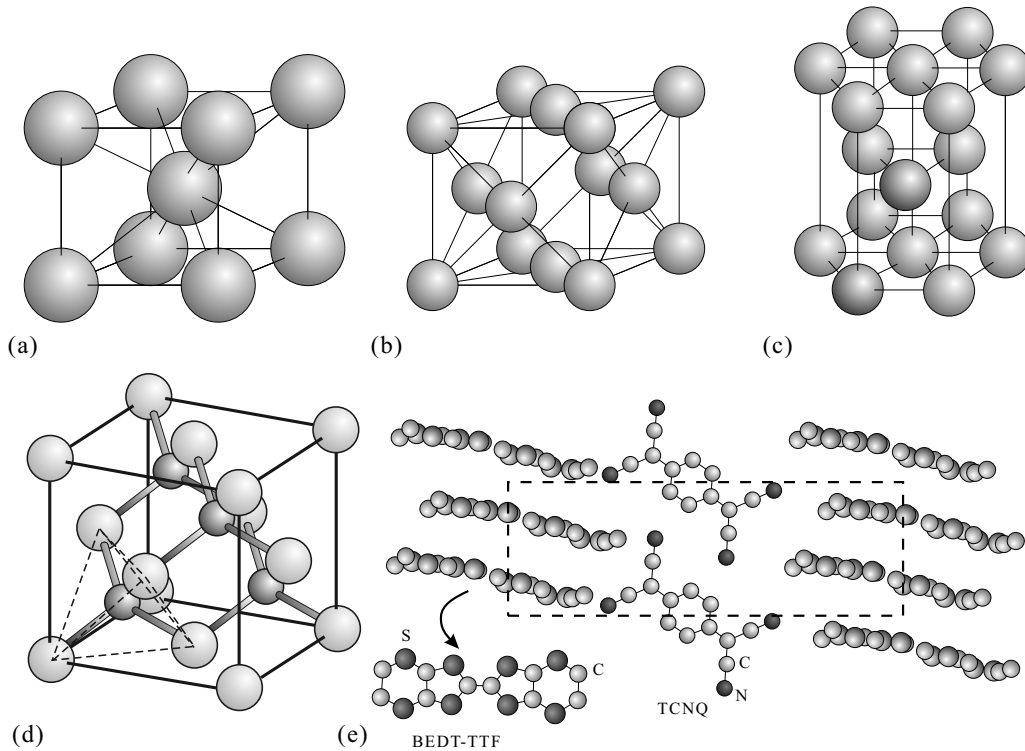


図 1.3 結晶構造の例. 球の中心が原子位置を表す. (a) bcc 構造 (Li, Na, Ba 等), (b) fcc 構造 (Al, Ni, Ag, Au 等), (c) hcp 構造 (Mg, Co, Cd 等) これら 3つは金属結晶によく見られる結晶構造である. (a), (b) については, 図 1.2 の体心立方格子, 面心立方格子の格子点位置に原子を置けば, この構造になる. (c) は, やや色を濃くした 2つの球位置を含む立体を単位胞として単純六方格子に分類される. (d) は III-V 族化合物半導体などによく見られる閃亜鉛鉱構造. (e) は有機結晶の 1つ, BEDT-TTF-TCNQ の構造. 図の方向では BEDT-TTF 分子の原子配置がわかりにくい, 分子平面を垂直方向から眺めると, 左下の図のようになる.

である. これを満たす  $\mathbf{G}$  を, 逆格子ベクトルと呼ぶ. 基本逆格子ベクトル  $\mathbf{b}_i$  を

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1.5)$$

で定義すると,  $|A| \equiv \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$  として

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{|A|}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{|A|}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|A|} \quad (1.6)$$

と書け, 逆格子ベクトルを  $\mathbf{G} = \sum_{i=1,2,3} h_i \mathbf{b}_i$  ( $h_i$ : 整数) と表せる.  $U$  同様, 空間格子の周期性を持つ関数は, 逆格子によりフーリエ展開できる. 「逆格子」とは格子のフーリエ変換だと言って差し支えない\*2.

格子で基本胞を考えたように, 逆格子でも周期的繰り返しの単位を考えることができる. それが, ブリュアンゾーン (Brillouin zone) である. ブリュアンゾーンを得るための一般的な方法を, 図 1.4(b) に示した. 逆格子空間の原点周りのブリュアンゾーンを得ることを考える. 原点を始点とする逆格子ベクトル  $\mathbf{G}$  の  $1/2$  のベクトル  $\mathbf{G}/2$  の終端点を通り,  $\mathbf{G}$  に垂直な面で逆格子空間をカットする. このような面に囲まれた, 原点周りの最小の空間 (多面体) が第一ブリュアンゾーンである. この「 $1/2$  のところで切る」ことにはバンド構造上意味があるが, それについては次章で述べる.

図 1.4 には fcc 格子の例が示されている. まず, (1.6) により基本逆格子ベクトルを得て逆格子を作ると, 図 1.4(a) のように fcc 格子に対する逆格子は bcc となる. (b) の方法で原点の最近接逆格子点を指す基本逆格子ベクトル  $\pm\mathbf{b}_1$ ,  $\pm\mathbf{b}_2$ ,  $\pm\mathbf{b}_3$  を中央でカットする面は同等なものがある 8 つあるので, これらで囲まれた多面体は, 正八面体となる. とこ

\*2 「解析的」に考えたい方は, 周期的に配列したデルタ関数の和で表される関数のフーリエ変換が, やはりデルタ関数の周期的配列 (ただし, 並び方は色々) となり, 元の配列が格子, 変換後が逆格子と考えれば良い. 光周波数コム (1 次元の例) など, 広汎な物理に良く現れる原理である.

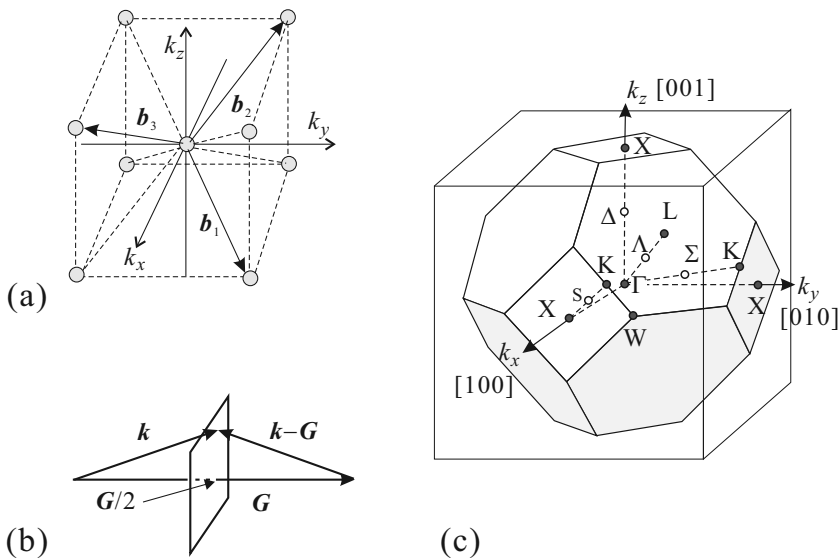


図 1.4 (a) fcc 格子の逆格子. bcc 構造を取る. (b) ブリュアンゾーンを得るための逆格子空間のカットの仕方. 逆格子ベクトル  $\mathbf{G}$  の  $1/2$  のベクトル  $\mathbf{G}/2$  の終端点を通り,  $\mathbf{G}$  に垂直な面で逆格子空間をカットする. (c) (b) の方法で得た fcc の第一ブリュアンゾーン.  $\Gamma$ , X, L などと書かれた点は, 対称性が高い点である.

ろが, 第 2 近接逆格子点を指すベクトルをやはり中央で切る平面は, この正八面体の頂点近くをカットしてしまう. 結果として出来上がった第一ブリュアンゾーンを図 1.4(c) に示している.  $\Gamma$ , X, L などは, 特に対称性の高い点を示しており, これもバンド構造表示に良く使用される.

## 1.2.4 良く半導体として使用される結晶

冒頭で述べたように, 最近では半導体に分類される物質は何々, と言い難くなってきた. しかし, 本講義では時間の制約もあり, 典型的な半導体を中心に話を進める. ここでは, 特に空間周期構造の単純で明確な「結晶」, しかも, 半導体工業において半導体として良く使用されるものに限ってざっと見てみよう. 具体的には, 周期律表で II 族から VI 族までの元素を比較的少数の構成元素とするものを具体例として取り上げる.

右に示したのが, その問題となる周期律表の部分と各元素の電子配置である. これから, III 族から V 族までの元素から構成される半導体が類似構造を取ることが自然であることがわかる. ここでは主に結晶形等を紹介しておく.

II	III	IV	V	VI
4Be $2s^2$	5B $2s^2 2p$	6C $2s^2 2p^2$	7N $2s^2 2p^3$	8O $2s^2 2p^4$
12Mg $3s^2$	13Al $3s^2 3p$	14Si $3s^2 3p^2$	15P $3s^2 3p^3$	16S $3s^2 3p^4$
30Zn $3d^{10}$ $4s^2$	31Ga $3d^{10}$ $4s^2 4p$	32Ge $3d^{10}$ $4s^2 4p^2$	33As $3d^{10}$ $4s^2 4p^3$	34Se $3d^{10}$ $4s^2 4p^4$
48Cd $4d^{10}$ $5s^2$	49In $4d^{10}$ $5s^2 5p$	50Sn $4d^{10}$ $5s^2 5p^2$	51Sb $4d^{10}$ $5s^2 5p^3$	52Te $4d^{10}$ $5s^2 5p^4$

### 1.2.4.1 IV 族元素半導体

C, Si, Ge を構成元素とする半導体で, 結晶構造はダイヤモンド構造 (ブラベー格子は fcc) を取る. このような結晶は, ほぼ  $sp^3$  ハイブリッド軌道による共有結合で理解することができる. Si は無論, 半導体工業で最も良く使用される半導体である. 多くの相で金属の Sn も  $\alpha$  型 (灰色スズ) は半導体である.

低次元の電子系を用意できることが半導体物理学の大きな興味であるが, 半導体工業においてもこれは同様に重要である. Si では, 金属-酸化物-半導体 (metal-oxide-semiconductor, MOS) 構造を使用して 2 次元電子系を構成することが長く行われてきた. 酸化物層は一般にアモルファス構造となるため 2 次元電子の界面散乱確率が高く, 高い移動度の電子系を得ることは難しい. これに対して, Si-Ge の混晶を用いて結晶構造に近いヘテロ接合 (heterojunction) を形成する方法で高移動度の 2 次元電子系が実現している.

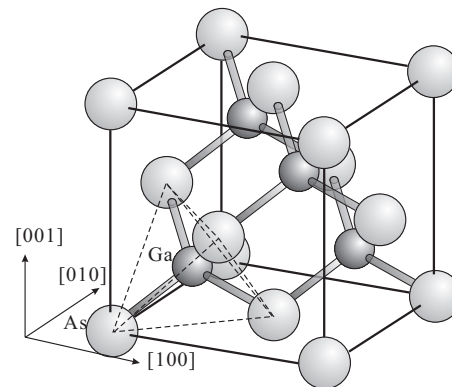
これらに対し, SiC (炭化ケイ素 (シリコンカーバイド), カーボランダム) などは, IV 族元素同士の化合物半導体である. SiC は, 立方, 六方, 菱面体など多くの結晶系を取る. 特に 4H-SiC と呼ばれる六方晶の半導体は, 絶縁破壊電場強度が高く, 一方 ON 状態の電気抵抗を極めて低くできるため, 電力素子として広く使用されている. 現在 EV

や電車で欠かせないデバイスと言ってよい。

半導体	格子定数 Å	ギャップ (RT eV)	電子質量 $m_0$	正孔質量
C	3.56683	5.47	0.25	0.2
Ge	5.64613	0.66	1.64, 0.082	0.04, 0.28
Si	5.43102	1.12	0.98, 0.19	0.16, 0.49

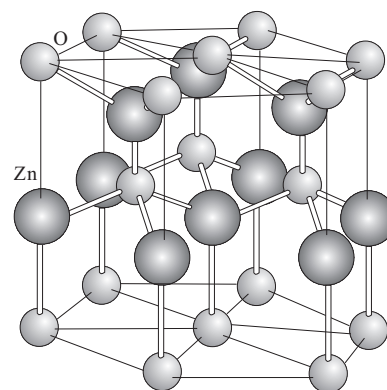
#### 1.2.4.2 III-V 族化合物半導体

文字通り，III 族元素と V 族元素を 1 対 1 に化合物させてできた半導体で，多くの結晶形は，ダイヤモンド構造の格子点を III 族原子と IV 族原子が交互に占める，閃亜鉛鉱型 (Zinc blende) である。III 族としては，Al, Ga, In, V 族としては As, P, Sb などが良く使用される。これらの組み合わせによって多種類の化合物半導体が形成されるが，更に異種の元素を混ぜて混晶 (mixed crystal) を構成することで，更に多種の半導体を合成できる。これらは厳密に言えば空間繰り返し構造を失っているため結晶ではなくなっているが，結晶内の概念のほとんどが格子乱れによる多少の鈍化を考慮することで成立する。



現実にはこれらの化合物半導体，混晶半導体はエピタキシャル成長 (epitaxial growth) で合成されることが多く，このためには接合する異種半導体間で結晶形と格子定数がそろっていることが多くの場合重要である。これについてはまた章を改めて述べる。

逆格子空間の原点， $\Gamma$  点に直接遷移ギャップを持つものが多く，従って光学素子材料として良く使用される。また，エピタキシャル成長により高品質のヘテロ接合が形成できる組み合わせが多数存在し，高速動作を要求される素子に頻用される。



#### 1.2.4.3 III-N 化合物半導体

青色発光ダイオードで一気にその応用が広がった窒化物半導体は，GaN, InN, AlN が現在の主な研究・応用対象である。これらは六方晶系のウルツ鉱型 (Wurtzite) 結晶形をしている。通常エピタキシャル成長を用いて成長し，高温でアニールすることで高品質化する。

右図がウルツ鉱型結晶の結晶形である (ただし，原子の例として書いたのは ZnO の場合である。 )。

#### 1.2.4.4 II-VI 族化合物半導体

II-VI 族の半導体は，閃亜鉛鉱型，ウルツ鉱型，カルコパイライト型など比較的様々な結晶形を取る。ZnO, CdTe など様々な化合物が存在し，GaN が青色素子の主役となる前は，II-VI 系が主に候補として研究されていた。ZnO は現在でも，その材料の入手が容易であることなどから，素子特性，製造方法が改善すれば GaN 系を脅かす材料となると考えられている。ZnO 系は，ナノチューブ等の小さな構造になりやすく，薄膜素子への形成が難しい一方，ナノ構造素子としての応用にも注目されている。また，Hg 系は「負のバンドギャップ」を持つと言われ，トポロジカル物質を構成するのに使用されて良く知られるようになった。

#### 1.2.5 有機半導体材料

半導体としての有機薄膜は，軽量，フレキシブル，安価，ということで，注目されている。有機固体の多くは，ファンデルワールス力によって分子間結合を生じた分子性固体である。半導体物理学で形成されてきた様々な概念は，ほぼ適用できるところまで質が高められてきた。ただし，分子性固体であることを反映し，分子内の電子状態と，その

集合体としての固体の状態とを一旦分けて考えた方が現実的であることが多い。特に高分子の場合は、分子内でのプロホ電子、バンドなどが考えられる一方、固体全体の電気伝導は 1970-80 年代にアモルファス半導体を対象に考えられたランダム系のモデルが適用されている。

## 1.3 半導体結晶成長法

半導体の構造敏感性を機能として利用し、様々な物性物理学を調べ、更には量子効果・多体効果の実験場としたり、素子として工業的に利用するにはまずは極めて不純物や格子欠陥の少ない結晶を得る必要がある。試薬などの他の純粋物質に比べても何桁も高い純度の物質が必要となるばかりでなく、特に工業応用においては、これを安価で、大量に、短時間の内に、低エネルギー消費でしかも低環境負荷で製造する必要がある、半導体工学の中でも大きな部分を占める研究分野である。本講義の「物理」には直接関係はないが、駆け足で紹介することにしたい。

無機半導体の結晶成長は、3次元的な「塊」としての結晶を成長するバルク結晶成長と、これらから切り出したウェハーを基板としてその上に2次元的な薄膜成長を行うエピタキシャル成長に大別される。

### 1.3.1 バルク結晶の成長

成長前の材料の採掘、精製も重要な過程であり、最終的な用途を睨んで最適な材料・精製法の選択も必要となる。例えば、結晶シリコンの場合、MOS-LSIの基板とするためには11N (99.99999999%)という超弩級の純度が必要とされ<sup>\*3</sup>、「半導体級」(semiconductor grade)と呼ばれている。これに対して、太陽電池などに大量に必要な基板は、1素子の面積が10桁以上違い、漏れ電流に対する面積当り許容度もやはり10桁程度異なるため、6N~7N程度、それも、無輻射再結合中心となったり、pn接合特性を劣化させる深い準位を形成したりする不純物を特に抑えれば十分であることが知られており、「太陽電池級」(solar grade)と呼ばれる。

後者は特に原料も「金属級」(metal grade)と呼ばれる低純度のSiでも安価なものを使用する。低電力消費の精製法が模索され、改良されてきたが、現在は従来法でしか安価に製造する企業の供給ウェハーが市場を支配しているのが2013年の現状である。このような事情は当然国際経済情勢その他で大きく左右される。基礎研究と言えども、残念ながらこのような外部情勢に影響されるのが現実でもある。

無機半導体のバルク結晶は、一般に高温の熔融液から緩やかな冷却固化によって成長する。SiやGeのような単元素半導体に比べて、化合物半導体は2種類以上の元素の混合熔融液を用意する必要があり、融点・蒸気圧の違い、相互溶解度の問題もあって、このような成長には色々と困難が伴う。

#### 1.3.1.1 チョクラルスキー法

チョクラルスキー法(Czochralski process, CZ法)は、図1.5のように、熔融液の上から細い種結晶を下ろして太い円柱状結晶を引き上げる方法である。引き上げの際に種結晶を回転させるため、円柱状結晶となる。Siの無転移単結晶を得るための代表的な方法であり、LSIウェハーの円盤状の形状はこれをスライスするために生じる。

化合物半導体の場合は、単元素半導体に比べると熔融液の元素による蒸気圧の違いによってCZ法が大変難しい場合が多い。III-V族のGaAs, InP, GaPなどはCZ法で作られている場合も多いが、III族とV族の等分量比熔融液を用意しても、V族の蒸気圧が高くて短時間の内に抜けてしまうため、そのままではCZ法が適用できない。そこで、B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の熔融液などで混合熔融液を封止して蒸発を抑える、液体封止チョクラルスキー法(Liquid Encapsulated Czochralski process, LEC法)が使用される。

<sup>\*3</sup> ここで、「純度」の定義はやや問題である。NMRやSQUID帯磁率計でこのようなSiインゴットを測定してみると相当量のHやOが含まれていて、11Nというのはこれらは無視した値である。Oは論理LSIには余り問題がないが、電力素子などへの応用では問題を生じる。



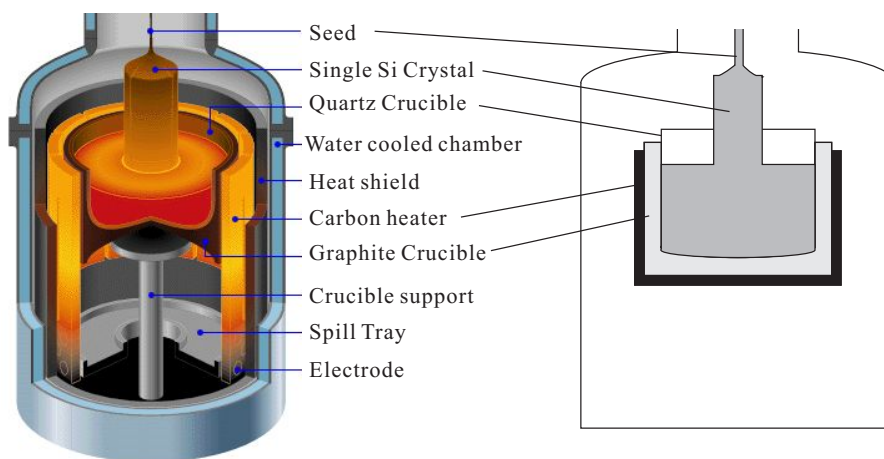


図 1.5 チョクラスキー法の模式図. 左は立体イラストレーションで右は断面図.

<http://people.seas.harvard.edu/~jones/es154/lectures/lecture.2/materials/materials.html> より.

### 1.3.1.2 ボート成長法

化合物半導体のバルク結晶成長に使用されるもう 1 つの有力な方法がボート成長法 (boat method) と呼ばれるものである. これには, 2 つの温度状態を発生される炉をボートに沿って移動させ, 一方の端から溶液の凝固によって単結晶を得る水平ブリッジマン法 (horizontal Bridgeman method, HB 法) と, 温度傾斜凝固法 (temperature gradient freeze method) がある.

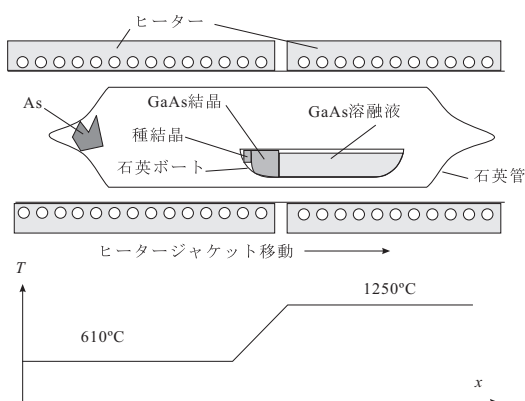


図 1.6 ボート成長法 (水平ブリッジマン法) の概念図.

HB 法の概念図を, GaAs の場合について図 1.6 に示した. 石英管の片方に As を入れて, 管内にある石英ボートには最初 Ga と種結晶を入れておく. As 側を 610 °C 程度, 反対側を 1250 °C 程度に加熱すると, As は 600 °C にもなると激しく昇華し, Ga の熔融液に入り込んで GaAs 熔融液を形成する. 1250 °C では GaAs は熔融状態であるが, 610 °C では固化するので, 加熱ジャケットをゆっくりと図で右方向へ動かすと, 種結晶の近くから GaAs 単結晶が固化して生成する.

### 1.3.1.3 帯溶融法

1-8 頁の脚注でも述べたように, 高純度のはずの Si に実は相当の O が含まれていることが多いが, これは, 主に熔融液とるつぼとの接触によってるつぼから混入したものである. これが問題となるような用途 (電力素子など) では, 縦型帯溶融法 (floating zone method, FZ 法) によって形成した単結晶が使用される.

これは, 高純度の多結晶を棒状に用意して頂上に種結晶を用意し, 赤外線共焦点法, あるいは高周波加熱によって非接触で帯状に多結晶を溶かし, 溶解した部分が単結晶化する. るつぼ等の異物質に接触することがないため多結晶の高純度が保たれる一方, CZ 法のような大口径は難しい.

## 1.3.2 エピタキシャル薄膜成長

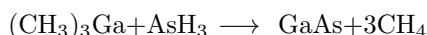
結晶基板上に薄膜結晶を堆積するエピタキシャル成長 (epitaxial growth) は, 液相成長 (liquid phase epitaxy, LPE), 気相成長 (vapour phase epitaxy, VPE), そして, 真空中あるいは希薄気体中での成長に大別される. これ

もバルク成長法同様非常に多種類存在し、とても網羅的に紹介できない。ここでは、有機金属気相成長法 (metal organic vapour phase epitaxy, MOVPE), 分子線エピタキシー (molecular beam epitaxy, MBE) についてごく簡単に紹介する。

### 1.3.2.1 有機金属気相成長法

Metal organic chemical vapour deposition (MOCVD) という呼称も良く使用される。化合物半導体一般に広く使用されている。本副節では GaAs の場合について見てみる。

エピタキシャル成長においては、何らかの方法で堆積する原子を基板上に運搬し、基板表面の原子と格子を形成させることで単結晶を堆積する。従って、基板の表面状態、堆積原子の搬送、堆積原子の状態などが成長のキーとなる。MOVPE では原料の搬送は水素と窒素をキャリアとする。Ga はトリメチル Ga ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Ga, TMG), As はアルシン (AsH<sub>3</sub>) の形で気体とし、基板表面で加熱により分解する。その際に基板表面の原子と結合することで GaAs が生成する。中途の反応をすべて省略して、結果の反応のみ記すと



である。

TMG も、アルシンも蒸気圧は低く、図 1.7 のように水素でバブリングすることで高濃度化して基板上に運搬する。水素が半導体表面にとって還元雰囲気であるため、化学反応の詳細はもちろん、上のように簡単なものではないが、平坦で高品質の製膜が可能である。ドーピングや混晶作製も有機金属を元素に応じて用意することで可能である。有機金属ガス、V 族系のアルシンやフォスフィンはいずれも爆発性で神経系の毒ガスでもあって極めて危険であり、取り扱いには細心の注意と万全の安全装置が必要である。

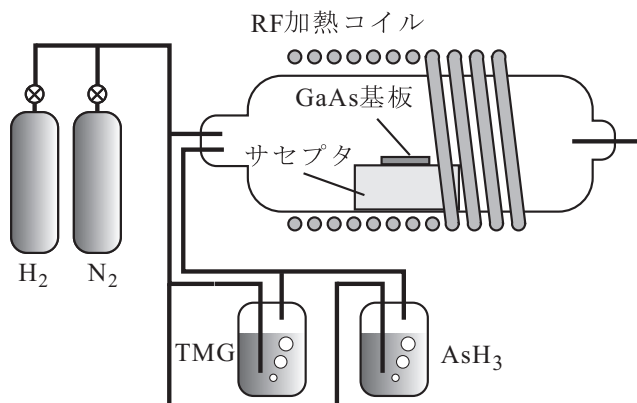


図 1.7 GaAs の MOVPE (MOCVD) の簡易化した模式図。「サセプタ」は RF を吸収して発熱する。

### 1.3.2.2 分子線エピタキシー法

代表的半導体超薄膜製造法である分子線エピタキシー (molecular beam epitaxy, MBE) の基本は真空蒸着で、(1) 超高真空を使用する、(2) 蒸着基板に結晶を用い、表面を清浄化して蒸着する、(3) 成長中の基板温度を高くして表面に付着した原子の運動を促進する、(4) 蒸着原子の組成比に注意する、などが特徴である。

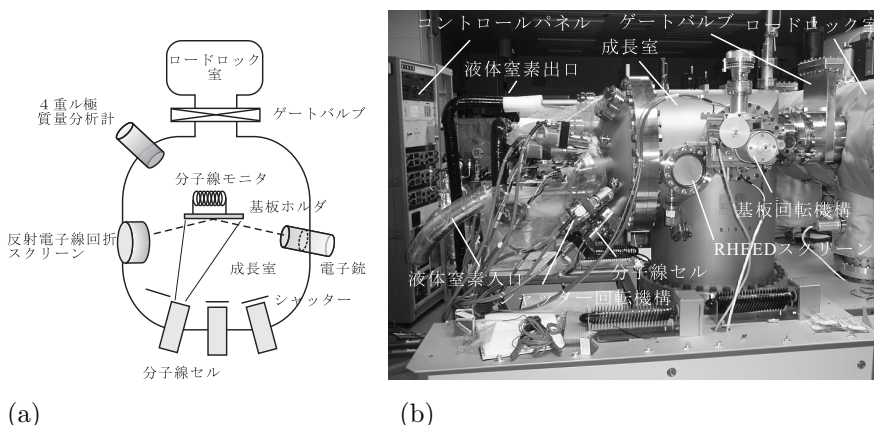


図 1.8 (a) MBE 装置の概念図。(b) 実際の装置の例。

図 1.8(a) に装置の概念図、(b) に装置例を示した。超高真空を保つために試料の出し入れ時は専用の排気室を使い、成長室は大気にはさらさない。蒸着源である分子線セルは残留ガス等の付着を避けるため、待機時でもある程度加熱する。薄膜成長時には加熱する基板周り、分子線セル周りなどに配置した容器に液体窒素を流して脱ガスをできる限り吸着す

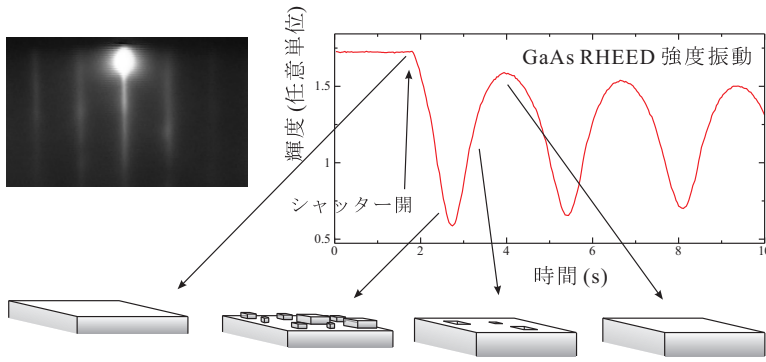


図 1.9 左上：2 次元的 MBE 成長をしている時の RHEED 像。中央上部の輝点が鏡映点。右は、鏡映点の輝度が成長と共に振動する様子。各点での表面の状態を模式的に示した。

る。蒸着時には分子線によって真空度そのものは下がってしまうことも多いので、ガス種の分圧がわかる質量分析型の真空計でのモニターが必要になる。結晶基板は、化学エッチなどの手法で表面清浄化した後、均一な酸化膜などで表面を保護して成長室に導入する。成長前に表面の保護膜を物理的に飛ばすことで清浄化する。最も簡単には基板を加熱して蒸発させる。基板表面、また成長表面の状態確認のため何らかのモニターが必要である。

このために最も手軽で良く使用されるのが反射高速電子線回折 (refractive high energy electron diffraction, RHEED) である。RHEED は図 1.8(a) に示したように、成長中に成長面すれすれに 15~30keV 程度の電子線を打ち込み、回折像を蛍光スクリーンで観察し、表面の原子状態を調べるものである。回折像は逆格子パターンとなるが、表面すれすれに電子線を入れているため、平坦な成長面では 2 次元格子的な回折が生じ、逆格子は垂直な柱が多数立った状態 (逆格子ロッド) になる。スクリーン上の像はこれをロッドに平行に近い角度で切ったものになる。電子線の幅などのために回折像ロッドも幅を持つため、2 次元的成長の場合、図 1.9 左上のような線状の像が生じる。

図 1.9 の像で中央上部に強い回折スポットが見えるが、これは、鏡映反射によるもの (鏡映点, mirror spot) で、表面の平坦性が高い場合に強度が強くなる。分子線セルのシャッターを開いて分子線が基板表面に届くと成長が開始する。分子・原子は、表面上をしばらく熱運動した後、格子点に入って基板結晶と強く結合することで安定化するため、結晶が成長する。成長が層状 (layer-by-layer) モードで生じている時は、成長の初期段階では 1 原子層の成長が生じる度に、図中に模式的に示したように平坦面 → やや荒れた面 → 平坦面のサイクルを繰り返すため、鏡映点の輝度が振動する。これによって成長の様子を 1 原子層ずつモニターすることができる。成長が進むに連れて平坦面への復帰が不十分となり振動は減衰するが、適当な時間に成長を中断すると、2 次元的成長をしている場合は表面の凹凸によるエネルギーを下げる方向に表面の平坦化が進み、平坦面が回復する。このため、鏡映反射強度をモニターしながらシャッターの開閉をコントロールして平坦性を保ちながら成長する手法もある。

一般に、成長基板温度を上昇させていくと、層状成長に代わり、表面の原子層ステップの端に表面を運動する原子が結合してステップが広がり、ステップ端が表面を流れていくように成長するステップフローモードに移行する。この状態では鏡映反射の強度振動は生じない。

## 第2章 バンド構造, 有効質量近似

固体物理において, 「バンド構造」(band structure) という言葉は, 前章で導入した逆格子空間において, 結晶ポテンシャル固有状態を持つエネルギー分散関係を指す. これをどう捉え, 理論的にはどのように計算するか, が本章のテーマである. また, バンド電子を扱う上で欠かせないのが有効質量近似であり, その導入を行う.

### 2.1 バンド電子

自由空間では, 電子の運動エネルギーはゼロから切れ目のない連続値を取る. これに対して, 原子核の局在ポテンシャル中の束縛状態では運動エネルギーは離散値となる. 周期ポテンシャル中のエネルギー固有状態については, 2つの極限からの見方があり, ひとつは, 自由空間中状態への摂動で, 固有エネルギーが存在しない区間(エネルギーギャップ)が生じ, エネルギー固有値が帯状に(バンド)残る, というもの. もうひとつは, 局在ポテンシャルによる離散準位が, 隣接サイトとの間のトンネルによって帯状に(バンド)広がる, というものである. 前者がほとんど自由な電子の近似(nealy free electron approximation, NFEA), 後者が強束縛近似(tight-binding approximation)と呼ばれるものである.

#### 2.1.1 ブロツホの定理

固体物理の基礎中の基礎, ブロツホの定理については, ここで証明する必要はないであろう. 参照のため, 結論を記すと, 周期ポテンシャル中の固有状態は, 座標( $\mathbf{r}$ )表示で

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.1)$$

と書ける. ここで,  $n$  は, バンドの指数,  $u_{n\mathbf{k}}$  は格子周期を持つ周期関数, すなわち,

$$\forall \mathbf{R} \in \{(\text{格子ベクトル})\}, u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.2)$$

$\mathbf{k}$  は波数ベクトルである.

#### 2.1.2 ほとんど自由な電子の近似

周期ポテンシャル固有方程式を,

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

と書く.

$V(\mathbf{r})$ ,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の周期性より, 逆格子ベクトルを  $\mathbf{G}$  と書き

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.4)$$

とフーリエ級数展開できる. (2.1), (2.4) をシュレディンガー方程式(2.3)へ代入することで次が得られる.

$$\sum_{\mathbf{G}} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E \right\} C_{\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}'} V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} C_{\mathbf{G}'} \right] e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} = 0.$$

$\mathbf{G}$  の和の各項が0でなければならないから

$$\sum_{\mathbf{G}'} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E \right\} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \right] C_{\mathbf{G}'} = 0 \quad (2.5)$$

という  $\{C_{\mathbf{G}}\}$  の連立方程式が得られ, 自明でない解を持つための条件は

$$\left| \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E \right\} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \right]_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \right| = 0 \quad (2.6)$$

である。

NFE では自由電子 ( $V(\mathbf{r}) = 0$ )

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad C_0 = 1, \quad C_{\mathbf{G}} = 0 \quad (\mathbf{G} \neq 0), \quad E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \quad (2.7)$$

への摂動  $\delta V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}$  で  $\delta C_{\mathbf{G}}$  が生じたとする。(2.5) で  $\delta V \delta C$ ,  $\delta E \delta C$  の項は高次として無視すると,

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \mathbf{k}^2] \delta C_{\mathbf{G}} + V_{\mathbf{G}} = 0 \quad \therefore \delta C_{\mathbf{G}} = \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{-V_{\mathbf{G}}}{(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \mathbf{k}^2}$$

であるが,

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \mathbf{k}^2 = 0 \quad (2.8)$$

で近似が破綻する。そこで, (2.8) 付近で  $C_0$  と  $C_{\mathbf{G}}$  のみが有限として (2.6) を書き下すと

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_0} \mathbf{k}^2 - E & V_{-\mathbf{G}} \\ V_{\mathbf{G}} & \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

であり, これより  $E^{(0)}(\mathbf{k}) \equiv \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_0$  という表記を使って

$$E = \frac{1}{2} [E^{(0)}(\mathbf{k}) + E^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{G})] \pm \frac{1}{2} \sqrt{[E^{(0)}(\mathbf{k}) - E^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{G})]^2 + 4|V_{\mathbf{G}}|^2} \quad (2.10)$$

が得られる。これは,  $\pm V_{\mathbf{G}}$  のエネルギー分離 (バンドギャップあるいは, 禁制帯) が生じている事を意味する。条件 (2.8) は, 格子定数  $a$  の系について  $2a \cos \theta = n\lambda$  ( $n$  は整数,  $\lambda$  は電子波の波長) となり, 波の回折のブラッグ条件である。すなわち, 電子波が格子よりブラッグ反射を受け干渉によって定在波が生じてバンドギャップが開いたと解釈できる。

### 2.1.3 還元ゾーン表示

逆格子ベクトル  $\mathbf{G}$  に対し, プロッホ関数を次のように書く。

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}.$$

$v(\mathbf{r}) \equiv u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$  も格子ベクトル  $\mathbf{R}$  に対して  $v(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  を満たす周期関数であるから,  $\psi_{n\mathbf{k}}$  は別のプロッホ関数  $\xi_{n\mathbf{k}}$  を使って

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \xi_{n'\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \quad (2.11)$$

と書け, 表示形式 (2.1) には逆格子ベクトルだけの不定性がある。すなわち波動関数に格子周期の空間変調がある場合, これを格子周期関数  $u(\mathbf{r})$  に負わせるか, 平面波  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  の波数に付けるかは書式の問題である。

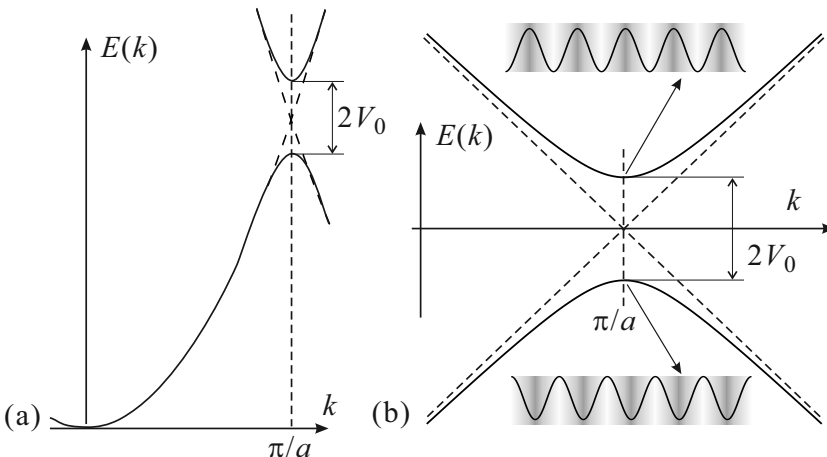


図 2.1 (a) 1次元系でのほとんど自由な電子の近似で  $k = G/2$  でバンドギャップ (2.10) が生じる様子. (b) (a) のバンドギャップ付近の拡大図と, バンドギャップが生じる理由を模式的に示したもの.

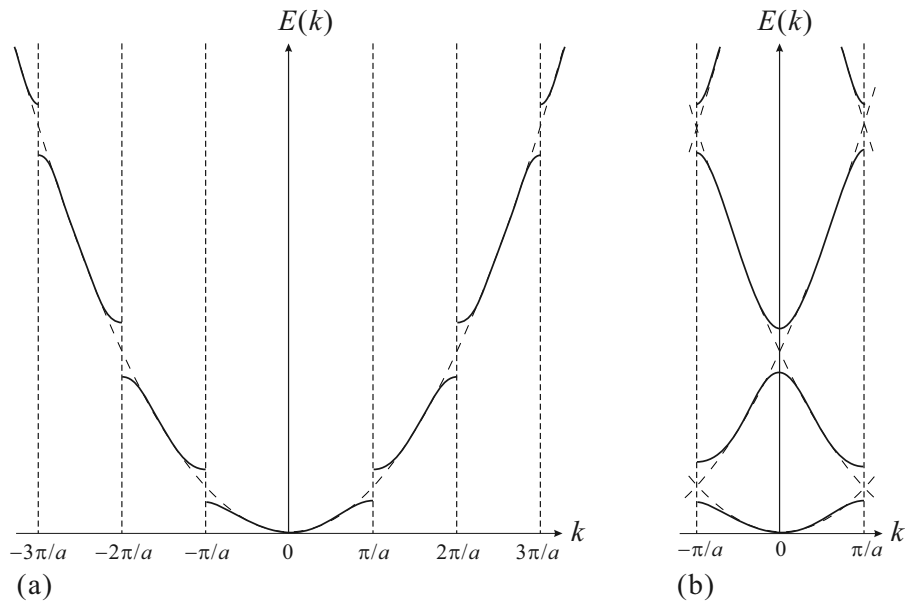


図 2.2 1次元 NFEA のバンド表記法. (a) 拡張ゾーン方式. (b) 還元ゾーン方式.

一方、シュレディンガー方程式 (2.3) で表される系は、時間反転に対して対称で、 $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$  である。 $E(\mathbf{k})$  に関する以上の 2 つの関係式より  $E(\mathbf{G} + \mathbf{k}) = E(\mathbf{G} - \mathbf{k})$ 、すなわち  $E(\mathbf{k})$  がゾーン端に対して対称であることが言える。

(2.11) の不定性から、 $E(\mathbf{k})$  の表示の仕方にも任意性があることがわかる。図 2.2(a) のように  $E(\mathbf{k})$  を  $\mathbf{k}$  に対して一価であるように表示するものを拡張ゾーン形式、図 2.2(b) のように第 1 ブリュアンゾーンにすべて折り返して表示するものを還元ゾーン形式と呼ぶ。

図 2.2(b) の還元ゾーン形式表示を見ると、例えば下から 2 番目、3 番目のバンドは、原点の隣の 2 つの逆格子点  $k = \pm 2\pi/a$  を中心とした拡張ゾーン形式表示を考え、それを第一ブリュアンゾーン  $[-\pi/2, \pi/2]$  で切り出したものであることがわかる。これは、還元ゾーン形式が (2.11) のように逆格子ベクトルだけの不確定性によるものであることから当然である。

### 2.1.4 空格子近似

NFEA で  $V_0 \rightarrow 0$  とした極限を考えると、自由空間でありギャップは消滅して分散は放物線 (パラボラ) になる。しかし、自由空間は格子の空間周期性が失われた系ではなく、連続並進対称性は、格子の周期的並進対称性も含むものであるから、基本胞に原子が 1 個も含まれない「空」ではあるが、空基本胞の格子は残っている、と考えることもできる。これによって例えば還元ゾーン形式などを考えることを空格子近似 (empty lattice approximation) と呼ぶ。これは、ブロッホ関数表式で考えると、平面波波動関数  $e^{ik' \cdot \mathbf{r}}$  の波打ちを、周期的部分  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  と、結晶波数部分  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  とに分けて還元ゾーン形式を適用することに相当する。

具体例を 3 次元結晶で見てみよう。fcc の場合の図 1.4 の逆格子とブリュアンゾーンを考える。まず、還元ゾーン形式を考えるには、(2.11) で、その原理が逆格子ベクトルだけの不定性にあることから、fcc の逆格子、図 1.4(a) の bcc 格子を考え、各逆格子点を中心とするパラボラを描いて、これを図 1.4(c) の第一ブリュアンゾーンで切り出せば還元ゾーン形式表示が得られることになる。パラボラを描くにあたって考えなければならない逆格子点を表 2.2 にまとめている。原点からの距離が遠くなれば、それだけ第一ブリュアンゾーンではエネルギーの高いブランチを表現することになる。

3 次元のバンド構造を表示する場合に問題になるのが、表記法である。3 次元空間に複数のパラボラを重ねて描くことは不可能であり、適当な省略記法が使用される。図 2.3 が多く使用される記法であり、図 1.4(c) のブリュアンゾーン内で対称性の高い点を結ぶ直線上でエネルギー分散を考える。図のように、 $L \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow K \rightarrow \Gamma$  のように周回

距離	逆格子点	点の数
0	(0,0,0)	1点
$\sqrt{3}$	(1,1,1), (1,1,-1), (1,-1,1), ...	8点
2	(2,0,0), (0,2,0), (0,0,2), (-2,0,0), ...	6点
$\sqrt{8}$	(2,2,0), (2,0,2), (0,2,2), (-2,2,0), ...	12点
$\sqrt{11}$	(3,1,1), (1,3,1), (1,1,3), (-3,1,1), ...	24点

表 2.2  $\Gamma$  点からの距離 (単位  $G_0 \equiv 2\pi/a$ ) による, 逆格子点の分類.

する. (a) が空格子近似, (b) は経験的擬ポテンシャル法 (次回解説) で計算した Si のバンド分散である. 空格子近似では当然, バンドギャップが現れない. しかし, 意外に類似しているところもあり, 現実に近い計算を見る際に, どの逆格子点を中心とした分散を見ているのか, という点, 更に, 量子的準位反交差によってギャップが現れる際に対称性を考えなければならないが, 空格子近似はそれにも役立つものである.

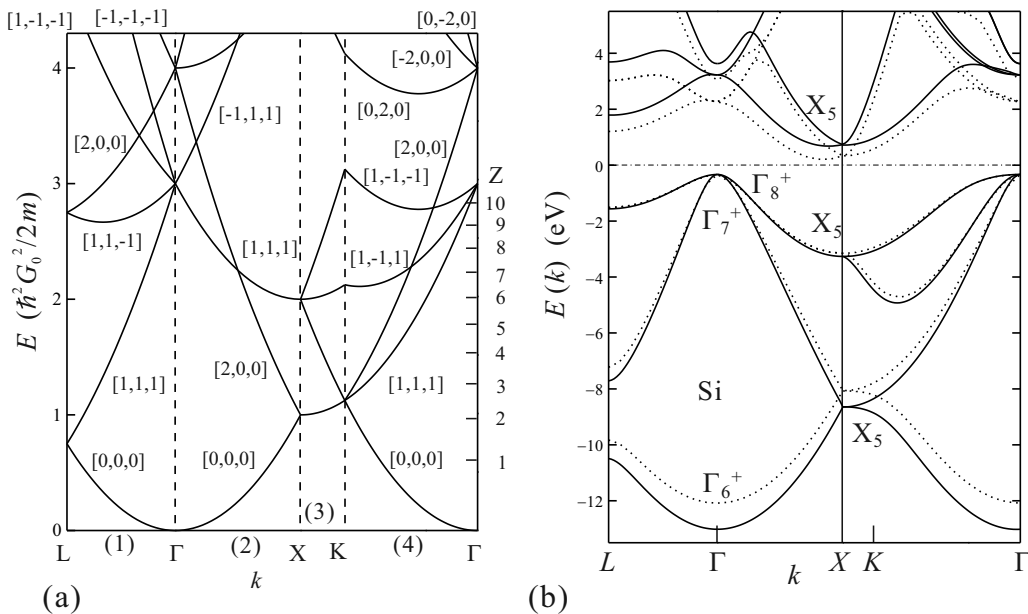


図 2.3 (a) fcc 格子の空格子近似表示. (b) Si の経験的擬ポテンシャル法により計算したバンド構造. [...] で示した 3 つの数字の組は, 当該パラパラの原点を表す.

### 2.1.5 強束縛近似

次週は強束縛近似より開始する.

## 参考文献

- [1] 植村 泰忠, 菊池 誠 「半導体の理論と応用 (上)」 (裳華房, 1960) 絶版で古書のみ, 図書館でも大きなところがないと置いていないが, 余裕のある方は読んで損はない. 朝永量子力学の半導体版というところ.
- [2] 川村 肇 「半導体物理」 (共立出版, 1987) 名著として有名な「半導体の物理」 (槇書店, 1971) の後継著. やや常識的知識の記述が減り, バンド計算や深い単位の計算の記述が増えている.
- [3] 御子柴 宣夫 「半導体の物理」 (培風館, 1982) コンパクトな中に非常に多くのトピックスが解説されている.
- [4] P. Yu and M. Cardona, “Fundamentals of Semiconductors”, (4th ed. Springer, 2010) (和訳, ただし第2版) 「半導体の基礎」 (末元 徹, 岡 泰夫, 勝本信吾, 大成誠之助 訳) 光物性関係の記述が詳しい.
- [5] S. M. Sze, K. K. Ng, “Physics of Semiconductor Devices” (Wiley, 2007) 半導体デバイスの標準的教科書.
- [6] 勝本 信吾 「半導体量子輸送物性」 (培風館, 2014) 8年前の講義の量子輸送部分を取り出し, かなりの加筆を行ったもの.
- [7] 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝 「応用群論」 (裳華房, 1980). 対称性と群論についての広汎な教科書.
- [8] 今野 豊彦 「物質の対称性と群論」 (共立出版, 2001). 結晶対称性・物性と群論についての詳細な教科書. 最近では主流である国際表記を使用しているのも特長である.



### 2.1.5 強束縛近似

自由空間の連続エネルギーに格子ポテンシャルによる干渉効果によってエネルギーギャップというスリットが入った、と捉えるほとんど自由な電子の近似に対して、空間的に局在して離散的な原子軌道エネルギー準位が、隣接サイト間の (ここでは単位胞を「サイト」と称する) トンネルにより広がりを持ち、バンドを形成する、というのが強束縛近似 (tight-binding approximation, TBA) の考え方である。

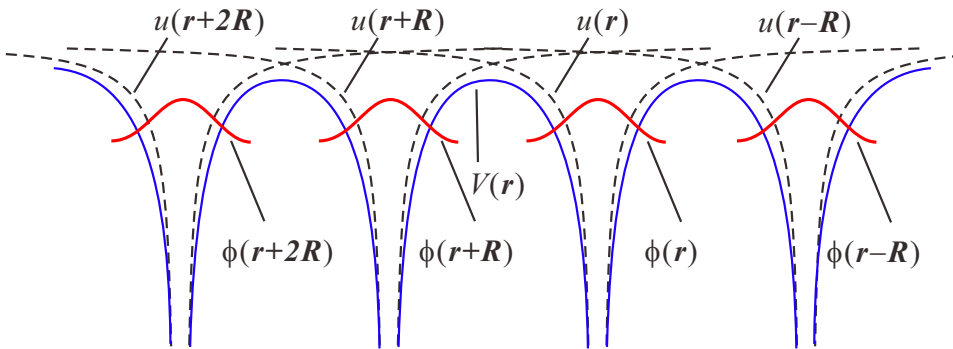


図2.4 強束縛近似の説明図. 青線の周期ポテンシャルは、破線の原子ポテンシャルの和である. 赤線で示された原子局在関数の線形和をブロッホ関数形に書く.

基本的な考え方を図 2.4 に示した. 1 サイトの電子に対するハミルトニアンを

$$\mathcal{H}_a = \hat{T} + u \quad (2.12)$$

とする.  $\hat{T}$ ,  $u$  は, それぞれ運動エネルギーとサイトポテンシャルである.  $i$  サイトの格子点位置を  $\mathbf{R}_i$  として,  $\mathbf{R}_i$  にサイトがある時の  $\mathcal{H}_a$  の座標表示を  $\mathcal{H}_a(\mathbf{R}_i) = \hat{T} + u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  と書く.  $\mathbf{R}_i$  が原点の時の規格直交固有関数系を  $\{\phi_n\}$ , すなわち,

$$\mathcal{H}_a(\mathbf{R}_i)\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \epsilon_n\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2.13)$$

とする.  $n$  はサイト局在ポテンシャルによる離散準位の指数である.  $u$  のオーバーラップにより得られた周期ポテンシャルを  $V(\mathbf{r})$  とすると, 全体のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \hat{T} + V(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

である. 図 2.4 のように  $u$  を並べて生じる周期ポテンシャルに対する解を考える. 簡単のため, 隣接サイトの  $\phi_n$  間の直接のオーバーラップ (重なり積分) はないものとする ( $\langle \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle = \delta_{ij}$ ). また,  $\mathcal{H}$  による  $n$  の異なる状態からの混じりも無視できるとすると, 全体の波動関数は  $\phi_n$  の線形結合で書ける. サイトの同等性から, 系のサイト数を  $N$  として, 各係数は  $c/\sqrt{N}$ ,  $|c| = 1$ ,  $c$  は  $\mathbf{r}$  に対して定数, の形になるべきである. 一方, 全サイトの和を取ると, 関数は Bloch 型になっている必要がある. 以上の要請から, 次のようにすべきであることがわかる.

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{N}} \left[ \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)} \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right]. \quad (2.15)$$

最後の  $[\dots]$  の部分は, 格子周期関数になっているので, 全体として Bloch 型になっていることが確認される.

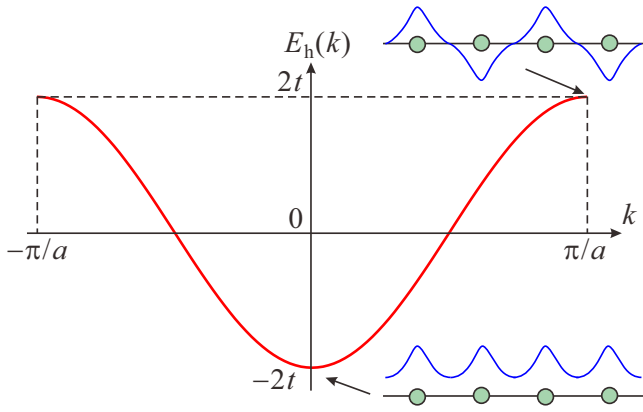


図 2.5 1次元強束縛近似で、隣接サイト間だけ  $t$  の飛び移り積分があるとした時のコサインバンド分散関係。模式的に描いたのは、バンドの底と頂上で隣接波動関数がどのような位相で重ね合わされているか、の図。

この  $\psi_{n\mathbf{k}}$  で  $\mathcal{H}$  の期待値 (エネルギー期待値) を取ると、

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle &= N^{-1} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \langle \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | [\hat{T}_r + V(\mathbf{r})] | \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle \\
 &= N^{-1} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \langle \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | [\hat{T}_r + u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) + V(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)] | \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle \\
 &= \epsilon_n + N^{-1} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \langle \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | [V(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)] | \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle \\
 &= \epsilon_n + \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \langle \phi_n(\mathbf{r}) | [V(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r})] | \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle.
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

2行目から3行目では、 $\hat{T}_r + u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  が  $i$  サイトの原子ハミルトニアンであることを用い、再び重なり積分を無視している。3行目から4行目では、 $\mathbf{r}$  で無限積分することから、各項について  $\mathbf{R}_i$  を原点に座標を取り直して同じ項の  $N$  倍にして規格化定数とで1となることを使った。以上から、結晶ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  と孤立ポテンシャル  $u(\mathbf{r})$  の差を  $v(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r})$  と書くと、

$$E_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n + \langle \phi_n(\mathbf{r}) | v(\mathbf{r}) | \phi_n(\mathbf{r}) \rangle - \sum_{\mathbf{R}_j \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} t_n(\mathbf{R}_j), \tag{2.17}$$

ただし、飛び移り積分 (hopping integral)  $t_n(\mathbf{R}_j)$  は

$$t_n(\mathbf{R}_j) \equiv -\langle \phi_n(\mathbf{r}) | v(\mathbf{r}) | \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle \tag{2.18}$$

と定義される。

簡単のため、1次元系で考えることにし、飛び移り積分が、隣接サイト間でのみ値  $t$  を持つ、と近似すると、(2.17) は格子定数を  $a$  として  $R_j = \pm a$  のみの和となるので

$$E_n(k) = \epsilon_n - \alpha_n - t(e^{ika} + e^{-ika}) = \epsilon_n - \alpha_n - 2t \cos ka \tag{2.19}$$

とコサイン型のバンドが得られる。 $\alpha_n \equiv -\langle \phi_n(r) | v(r) | \phi_n(r) \rangle$  は孤立ポテンシャルから結晶ポテンシャルへ変わった事によるオンサイトのエネルギー変化で結晶場 (crystal field) の寄与と呼ばれる。

図 2.5 に、このコサインバンドの様子を示した。NFEA の場合は、バンドの底  $k = 0$  から始まって、バンド端へ進むにつれて摂動が強くなったが、強束縛近似では出発点はバンド中央であり、例えば  $a$  を固定して  $t$  を変化させて摂動として考えたとすると、フラットなバンドからバンドが広がって図 2.5 の状態になったことになる。

この時、バンドの底では、(2.19) からわかるように、定在波状態となっており各原子の局在波動関数は図中に模式的に示したように同位相で足しあわされている。これに対してバンド頂上では同様に (2.19) より、やはり定在波状態であるが、隣接状態は逆位相になっている。これらの特徴は、縮退した2重量子井戸間にトンネルマトリクス  $t$  を導入した場合や2原子分子と全く同じで、逆位相で足しあわされた反結合性軌道 (anti-bonding orbital) がエネルギーが高くなり、同位相の結合性軌道 (bonding orbital) がエネルギーが下がる (すなわち準位間反交差) ことに対応している。

## 2.2 バンド構造の測定, 計算

エネルギーバンド構造, すなわち第一ブリュアンゾーンでのエネルギー分散関係の, 物質科学, 工学にとっての重要さは言を俟たない. 前節の2つの極限からの見方は, バンド概念を理解したり更にはそこで生じる現象について一般的な物理的視点を得るには有用であるが, 実験データを定量的に解析したり, 現実の材料を選択して所望の素子を設計したりするためには, バンド構造を実験及び理論計算を用いて必要な精度まで得ておかななくてはならない.

バンド構造も, 光学応答, ホットエレクトロン特性などが問題の場合には, 広い結晶波数の範囲で分散がどのようになっているかが重要であるが, 光学応答でも, バンド端からの発光や, 励起子などの問題, 低い電場に対する電気伝導などについては, バンドの端の分散を精密に知ることが必要になる. 前者を「大域的バンド構造」, 後者を「バンド端構造」と呼ぼう. それぞれについて得るための, 代表的な実験的, 理論的な手法を紹介する. 実験の測定値に直接よらずに計算する「第一原理計算」の手法の一つを付録2Aで紹介する.

### 2.2.1 大域的バンド構造測定: 角度分解光電子分光法

近年著しく分解能が向上し, 大域的なバンド構造を直接的に実験的に得る手段として角度分解光電子分光法 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) がある.

まず, 右に示したのが, 光電子分光 (photoemission spectroscopy) の概念図である. 真空準位を基準とした光電子のエネルギーを  $E^\nu$ , フェルミ準位  $E_F$  を基準とする電子の結合エネルギーを  $E_B$ , 光のエネルギーを  $h\nu$ , 測定物質の仕事関数を  $\phi$  とすると, 右に示した光吸収過程においてエネルギー保存則

$$E^\nu = h\nu - \phi - E_B \quad (2.20)$$

が成立する. 実験で測定されるのは,  $E_{\text{kin}} = \phi + E^\nu$  であり, むしろ関係は簡単で,

$$E_B = h\nu - E_{\text{kin}} \quad (2.21)$$

より, 結合エネルギーが求められる. 以上の光電子分光法では放出光電子は角度によらず集められたので, 結局状態密度が求められる.

光電子放出過程において, 表面に平行な結晶波数成分  $\mathbf{k}_\parallel$  と逆格子ベクトル  $\mathbf{G}$  を加えたものは保存される. 始状態の波数を  $\mathbf{k}_i$ , 真空中に取り出された電子波数を  $\mathbf{k}_f$  とすると,

$$(\mathbf{k}_i + \mathbf{G})_\parallel = \mathbf{k}_{f\parallel}. \quad (2.22)$$

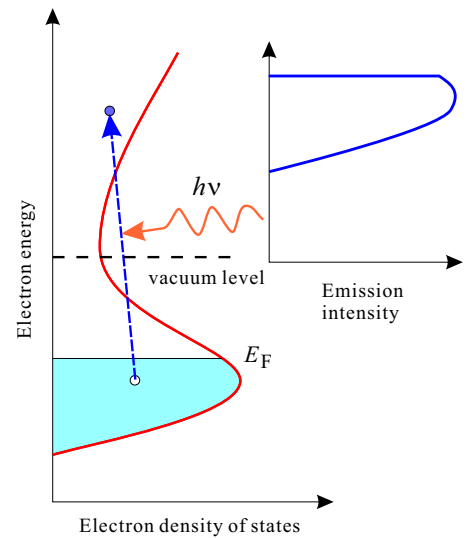
エネルギー保存則は

$$E_i(\mathbf{k}_i) + h\nu = E_f(\mathbf{k}_i) = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_0} + \phi \quad (2.23)$$

である. 仕事関数  $\phi$  と結晶内の終状態の分散関係  $E_f(\mathbf{k})$  が既知であれば, これらから分散  $E_i(\mathbf{k})$  を求めることができる. ここで,  $E_f(\mathbf{k})$  を自由電子分散関係で近似することが良く行われる. ただし, この引数の波数は結晶波数であるから, この近似でのエネルギー保存則 (2.23) は,

$$E_i(\mathbf{k}_i) + h\nu = \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_i + \mathbf{G})^2}{2m_0} + V_0 = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_0} + \phi \quad (2.24)$$

となる. これでも, 「結晶内自由電子」のゼロ運動エネルギー位置 (ポテンシャル)  $V_0$  が不明であるが, 様々な実験結果の解釈がコンシステントになるように決めることが行われる.



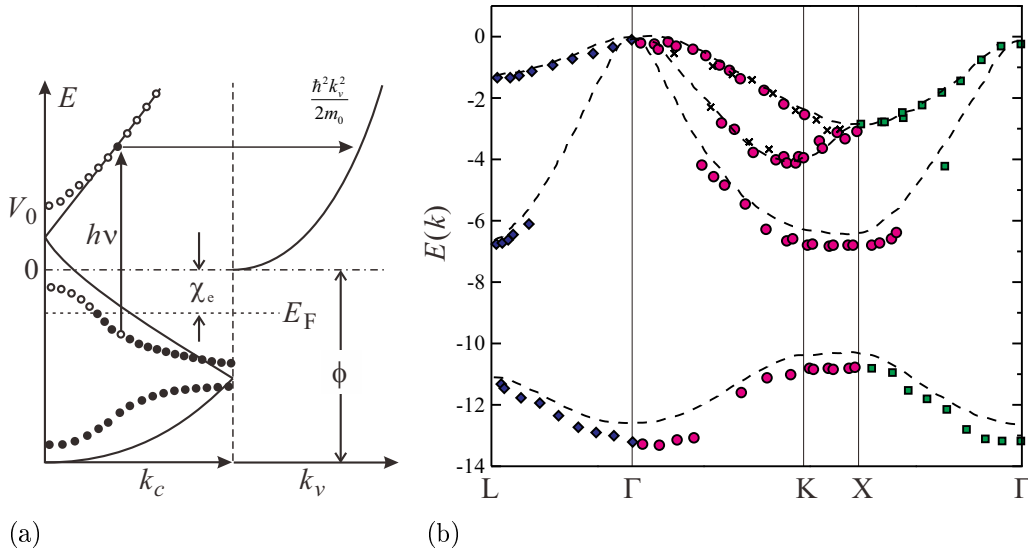


図 2.6 (a) ARPES において、分散関係を求めるための手続きの模式図. (b) GaAs について、垂直放出法により求めたバンド構造.

この手法により、最も簡単に分散関係を得るには、表面に垂直方向に放出される光電子のみを測定する手法もある。この場合は、 $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$  より、エネルギー保存則は

$$E_i(\mathbf{k}_i) + h\nu = \frac{\hbar^2 |(\mathbf{k}_i + \mathbf{G})_{\perp}|^2}{2m_0} + V_0 = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_0} + \phi \quad (2.25)$$

となり、

$$|(\mathbf{k}_i + \mathbf{G})_{\perp}| = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_0} + \phi - V_0 \right)} \quad (2.26)$$

より、 $\mathbf{k}_i$  また、分散を求めることができる。

## 2.2.2 大域的バンド構造計算：(経験的) 擬ポテンシャル法

擬ポテンシャル (pseudo potential) 法は、Bloch 関数の格子周期関数部分を平面波展開し、展開係数を求めることで、波動関数を得ようというものである [2, 3]。その際、原子核近傍のポテンシャルが強く、高い波数の平面波を多く要するところを、なだらかなポテンシャル (擬ポテンシャル) で代用し、バンドを与える波動関数の裾の部分は元のポテンシャルと同じになるようにする。経験的な擬ポテンシャル法では、更に実験値を援用することで擬ポテンシャルパラメーターを得る。極めて少ないパラメーターで ARPES の結果などを再現することができる。

周期ポテンシャル  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  ( $\mathbf{R}$  は格子ベクトル) 中の定常 Schrödinger 方程式

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.27)$$

の解、バンド指数を省略した Bloch 関数を

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

と書く。格子周期関数  $V(\mathbf{r})$ ,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を逆格子  $\mathbf{G}$  を用いてフーリエ展開し、

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}'} C_{\mathbf{G}'} e^{i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{r}} \quad (2.29)$$

とする。(2.28), (2.29) を (2.27) へ代入することで、

$$\sum_{\mathbf{G}} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E \right\} C_{\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}'} V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} C_{\mathbf{G}'} \right] e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} = 0.$$

$\mathbf{G}$  の和の各項が 0 でなければならないから

$$\sum_{\mathbf{G}'} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^2 - E \right\} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \right] C_{\mathbf{G}'} = 0 \quad (2.30)$$

という  $\{C_{\mathbf{G}}\}$  の連立方程式が得られ、自明でない解を持つための条件は

$$\left| \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - E \right\} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \right]_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \right| = 0 \quad (2.31)$$

である。現実の 3 次元結晶に対して (2.30) の展開が完全に行えれば (2.31) の永年方程式を解くことで、結晶中のバンド構造  $E(\mathbf{k})$  を求めることができる。式 (2.31) より計算に必要なものは、周期ポテンシャルのフーリエ展開係数  $V_{\mathbf{G}}$  である。

擬ポテンシャル法 (pseudo potential method) は、有効な  $V_{\mathbf{G}}$  を次のような考えに基づき計算する。

(1) まず、半導体の性質を議論する上で重要なのは、フェルミ準位を挟む価電子帯と伝導帯である。これらは、構成原子の最外殻電子が形成しており、内殻の電子は原子核周辺に強く局在しているため、結晶周期ポテンシャルに絡り込み、外殻電子に対して、上記の永年方程式を適用する。

(2) 以下が、擬ポテンシャル法特有の部分である。 $V(r)$  は原子核近傍では核からの距離を  $r$ 、原子番号を  $Z$  として

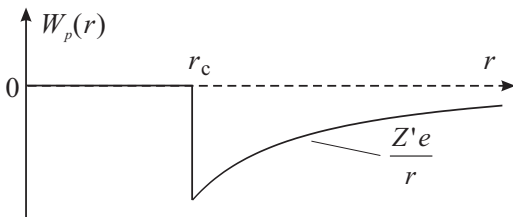
$$V(r) = Ze/r$$

で、問題となる外殻電子も原子核近傍では強く波打っている (振幅の空間変調が大きい)。一方、核より遠い地点では、これら内殻の電子 ( $Z_c$  個としよう) によってポテンシャルの遮蔽が生じ、有効原子番号は  $Z' = Z - Z_c$  へと減少する。更に Coulomb 相互作用を平均場近似などで取り込んだとすると、遮蔽によって  $r$  に対して  $r^{-1}$  よりも速くポテンシャルは弱くなり、波動関数の波打ちも比較的弱い。バンド構造は、隣接サイトの局在波動関数との重なりによって生じており、現実にはこのポテンシャルの弱い部分で決まっている。

このような  $V(r)$  をそのままフーリエ展開すると、核付近の強い空間変化によって多量の高周波成分が入ってくるが、上の考えに基づけば、これらはバンド構造には関係しない。これら  $V_{\mathbf{G}}$  は、その計算自身が無駄である上に、(2.31) の永年方程式に入り込むことで、バンド構造計算を困難にしている。

そこで、核付近を単純化し、波動関数の裾野付近を再現するような「擬ポテンシャル」を探し、これについて  $V_{\mathbf{G}}$  を求めて (2.31) を解こう、というのが擬ポテンシャル法の基本的な考え方である。

最も簡単なものとして例えば左図のように



$$W_p(r) = 0 \quad (r < r_c), \quad W_p(r) = Z'e/r \quad (r \geq r_c) \quad (2.32)$$

とすると、 $r_c$  を適当に取れば、最外殻電子波動関数の裾野部分を近似しつつ、固有エネルギーを維持し、また、イオンコア付近のポテンシャルは小さく、小さな波数展開で近似できる擬ポテンシャルを構成できる。上を単位胞位置  $\mathbf{R}_j$  について加えることで

結晶の擬ポテンシャル

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{j,\alpha} W_p^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j - \boldsymbol{\tau}_\alpha) \quad (2.33)$$

が得られる。ここで、 $\alpha$  は単位胞を形成する各原子を指定する指数で、 $\boldsymbol{\tau}_\alpha$  は単位胞の基準位置からの各構成原子の相対位置ベクトルである。

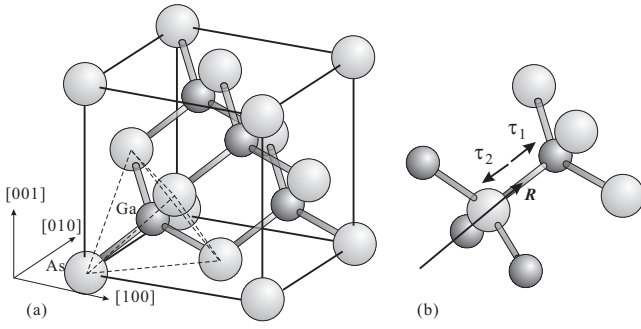


図 2.7 (a) 閃亜鉛鉱型結晶の単位胞 (GaAs) の例。ダイヤモンド構造で、格子点を III 族 (Ga) 原子と IV 族 (As) 原子が交互に占める。破線で示した正四面体を取ると、頂点に As、中心部に Ga が来る。(b) 基本胞は Ga と As を 1 個ずつ含む。(a) の単位胞の一辺を  $a$  とし、格子点を Ga と As の中点に取ると、Ga と As の位置ベクトルは格子点からそれぞれ  $(a/8)(1, 1, 1)$ ,  $(-a/8)(1, 1, 1)$  である。

	$v_p^s(111)$	$v_p^s(220)$	$v_p^s(311)$	$v_p^a(111)$	$v_p^a(200)$	$v_p^a(311)$
Si	-2.856	0.544	1.088	0	0	0
Ge	-3.128	0.136	0.816	0	0	0
GaAs	-3.128	0.136	0.816	0.952	0.68	0.136
CdTe	-2.72	0	0.544	2.04	1.224	0.544

表 2.3 代表的半導体の、特に光反射実験結果と一致するようにして求めた擬ポテンシャル形状因子。単位は eV。値は、M L. Cohen and T. K. Bergstresser Phys. Rev. **141**, 789 (1966) より。

格子と同じ周期性を持つポテンシャル (2.33) のフーリエ変換は、波数が逆格子点  $\mathbf{K}$  となる成分のみである。

$$\begin{aligned}
 v_p(\mathbf{K}) &= \int \sum_{j,\alpha} W_p^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j - \boldsymbol{\tau}_\alpha) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \frac{d\mathbf{r}}{V} \\
 \mathbf{r}' &\equiv \mathbf{r} - \mathbf{R}_j - \boldsymbol{\tau}_\alpha, \quad N: \text{単位胞数}, \quad \Omega: \text{単位胞体積}, \quad \text{として}, \quad e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_j} = 1 \text{ より} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_j} \sum_\alpha e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_\alpha} \frac{1}{\Omega} \int_\Omega W_p^\alpha(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' = \sum_\alpha e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_\alpha} \frac{1}{\Omega} \int_\Omega W_p^\alpha(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}', \\
 &= \sum_\alpha e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_\alpha} w_p^\alpha(\mathbf{K}). \tag{2.34}
 \end{aligned}$$

$w_p^\alpha(\mathbf{K})$  は (2.32) のフーリエ変換であり、原子種  $\alpha$  すなわち核ポテンシャルの強さや形状には依存するが結晶形には依らず、形状因子 (form factor) と呼ばれる。これに対して  $e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_\alpha}$  は、原子種の空間配置 (結晶形) のみに依存し、これを構造因子 (structure factor) と呼ぶ。この分離により、実験値を使った類似結晶からの類推が可能になる。

閃亜鉛鉱構造の場合図 2.7(b) より  $\boldsymbol{\tau}_1 = -a(1/8, 1/8, 1/8) = -\boldsymbol{\tau}_2 \equiv \boldsymbol{\tau}$  と書くことができるので、(2.34) は

$$\begin{aligned}
 v_p(\mathbf{K}) &= e^{i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_1} v_p^1(\mathbf{K}) + e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_1} v_p^2(\mathbf{K}) = (v_p^1 + v_p^2) \cos \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau} + (v_p^1 - v_p^2) \sin \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau} \\
 &= v_p^s(\mathbf{K}) \cos \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau} + v_p^a(\mathbf{K}) \sin \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau} \tag{2.35}
 \end{aligned}$$

となる。ここで、形状因子の  $v_p^s$  と  $v_p^a$  はそれぞれ、 $v_p$  の対称成分、反対称成分、余弦/正弦関数部分が構造因子である。Si, Ge などダイヤモンド構造の場合、閃亜鉛鉱構造で  $v_p^1 = v_p^2$  とすれば良く、 $v_p^a = 0$  となる。

擬ポテンシャルの具体形は、形状因子の計算に必要な。が、ここで、具体形から演繹的に形状因子を計算するのではなく、むしろ光学測定などの実験結果に合うように、形状因子をフィッティングパラメーターとして決めてしまおう、というのが経験的擬ポテンシャル法 (empirical pseudo potential method) である。

### 2.2.3 ダイヤモンド型、閃亜鉛鉱型半導体の大域的バンド構造

ダイヤモンド構造の場合、 $v_p^a(\mathbf{K}) = 0$  であり、擬ポテンシャルを考えていることから、 $|\mathbf{K}|$  の小さな逆格子点について  $v_p^s(\mathbf{K})$  を計算すればよい。 $|\mathbf{K}| \leq \sqrt{11}$  を考えることにすると、??頁に示した  $a\mathbf{K}/2\pi = (000), (111), (200), (220), (310)$  およびその要素の符号を変えたもの 51 個が該当する (以下、しばらくベクトル要素間のコンマを省略する)。従って、式 (2.30) 左辺の行列のサイズは  $51 \times 51$  である。

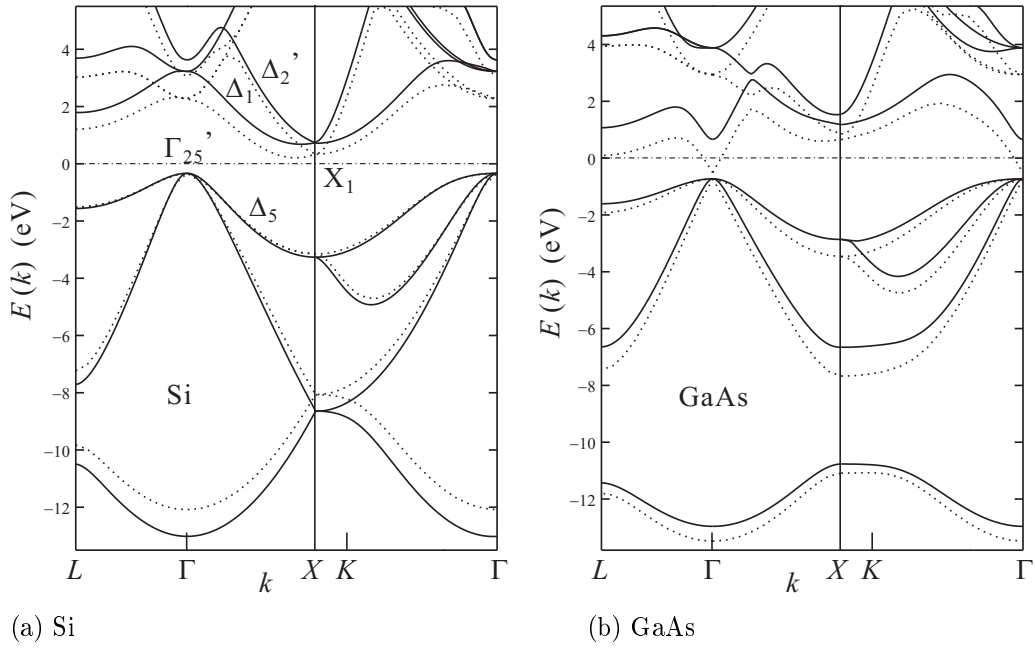


図 2.8 表 2.3 の形状因子により求めたそれぞれ (a) Si, (b) GaAs のバンド構造の展開図 (実線). 点線は第一原理バンド計算でも最も簡易なもの 1 つ, Linear Muffin-Tin Orbital (LMTO) 法の結果である. 2 種類の結果は伝導帯頂上で一致させている. フェルミ準位位置を  $E(k) = 0$  に取った.

ポテンシャルは逆格子点  $\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2$  間の要素中に  $V_{\mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2}$  として現れるが,  $\mathbf{K}_1 = \mathbf{K}_2$  のポテンシャル対角要素はエネルギーの一樣シフトを生じるのでゼロとする. また,  $|\mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2| \equiv |\Delta\mathbf{K}|$  が  $\sqrt{11}$  よりも大きな項もゼロとする. 原子ポテンシャルは (2.32) のように回転対称とすると, そのフーリエ変換である形状因子も波数の絶対値のみの関数であるから  $\sqrt{11}$  以下では, (111), (200), (220), (311) の形状因子がわかれば良い. このうち, (200) は構造因子  $\cos \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}$  が零となるので考える必要がなく, 零と置く. 最終的にそれ以外の 3 つの形状因子のみが必要である. そこで, Si, Ge について適当に内殻電子をカバーしてエネルギー固有値から得られる物理量が実験値と一致するように形状因子を決める. 更にパラメーターを減らしたい場合は, 例えば (2.32) の  $r_c$  を決め, これより  $v_p^s(\mathbf{K})$  を計算し, 実験と一致するように繰り返して最適値を決定する. 表 2.3 に示したのは, ダイヤモンド構造, 閃亜鉛鉱構造の代表的半導体について擬ポテンシャル形状因子の例で, Si, Ge については特に光反射のデータと一致するように 3 つのパラメーター  $v_p^s(\mathbf{K})$  を決定した.

閃亜鉛鉱型半導体についても同様に決めれば良いが,  $v_p^s(\mathbf{K})$  が有限となりパラメーターの数が増えるため, 補助的な方法を使うことも考えられ, 表 2.3 の GaAs の場合, 周期律表上で Ge を挟んだ形をしているため,  $v_p^s(\mathbf{K})$  については Ge の値を用いている. 非対称項は (2.35) より  $\sin \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}$  に比例するので, (220) については寄与がなく, (110), (200), (311) が対象となる. これらについて, 光学測定の結果を再現するように決定した結果が表 2.3 である. II-VI 族の CdTe の場合も同様に,  $v_p^s(\mathbf{K})$  として Sn (灰色スズ) の値を用いて求めている.

以上で  $v_p(\mathbf{K})$  が求まったので, これを (2.31) の, 今の場合  $51 \times 51$  行列の固有値問題を解いて  $E(\mathbf{k})$  を求める. このようにして計算した大域的バンド構造について図 2.8 に示した.

以上の計算を見てわかるように, この計算には, バンド構造の上で重要なスピン軌道相互作用が考慮されていない. このため, 計算結果では, 特に価電子帯頂上付近で, 3 つのバンドが縮退している. スピン軌道相互作用を入れて擬ポテンシャル法計算をすることももちろん可能であり, 3 つの内 1 つはこれによって下に離れる. 図 2.9 の Ge の計算ではスピン軌道相互作用が取り入れられており, 価電子帯頂上でスピン軌道分裂が観察される.

以上のようにして求めた代表的ダイヤモンド型, および閃亜鉛鉱型半導体の Si, GaAs, Ge のバンド構造を, 図 2.8, 図 2.9 に示した. Si の伝導帯の底は, X 点近傍にあるが, 良く見ると X 点よりも若干第 1 ブリュアンゾーン内部に位置している. GaAs は  $\Gamma$  点, Ge は L 点にある. 従って, 等エネルギー面を伝導帯について描くと, 良く知られているように, 模式的には図 2.10 のように表せる. 元のグラフを見れば, かなりこれが誇張した表現になってい

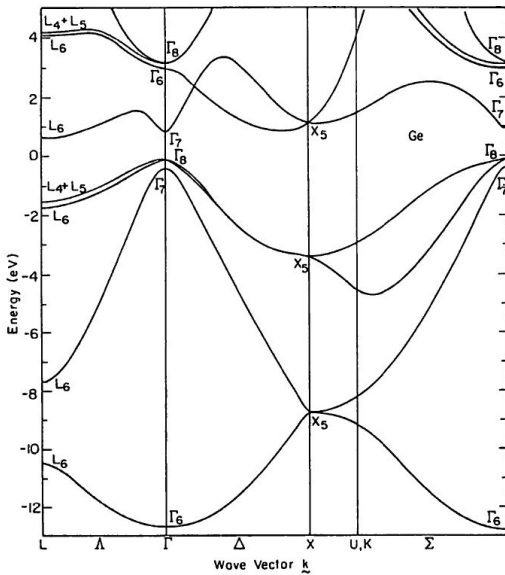


図 2.9 半経験的擬ポテンシャル法で計算した Ge の大域的バンド構造. スピン軌道相互作用を考慮しているため, 価電子帯頂上でスピン軌道分裂が見られる. 文献 [2] より.

ることがわかるであろう.

Si では第 1 ブリュアンゾーン内に 6 つの底が存在し, これらは谷 (valley) と呼ばれる. 伝導帯側にフェルミ準位が来た場合, 谷の数だけのフェルミ面が生じるので, フェルミ面上での積分を行う場合などには注意が必要である. GaAs では谷は 1 つだけ  $\Gamma$  点にあり, 有効質量も等方的である. Ge は L 点が谷であり, L 点は  $[\pm 1, \pm 1, \pm 1]$  方向に合計 8 点あるので, 谷も 8 個になるが, それぞれの谷は隣接ブリュアンゾーンで中央から分け合うことになるので, 実質的な谷の数は 4 である.

## 2.2.4 バンド端構造 : 有効質量

バンドの端, エネルギーギャップ領域との境目付近のバンド構造は, 半導体物理, 工学にとって極めて重要である. これを有効質量 (effective mass) という概念で扱うことが多く, 人間の考察にとっては非常に有用である. 有効質量近似については, 次週で扱うが, ここで, 有効質量の定義を導入しておく.

ブロッホ電子波動関数  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  が, エネルギー分散関係  $E_n(\mathbf{k})$  を持つとすると, その群速度は

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) \quad (2.36)$$

で与えられる. 従って, 加速度は

$$\frac{d\mathbf{v}_n}{dt} = \frac{d\mathbf{k}}{\hbar dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} (\nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})) = \frac{\nabla_{\mathbf{k}}}{\hbar^2} \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial k_j} F_j \quad (2.37)$$

で与えられる.  $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = \hbar d\mathbf{k}/dt$  は, 「力」を表すベクトルである.

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \quad (2.38)$$

と定義すると, (2.37) は,

$$\frac{dv_i(\mathbf{k})}{dt} = \sum_j \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} F_j \quad (2.39)$$

と書ける. (2.39) の形から,  $1/m^*$  を逆有効質量テンソルと呼ぶ. 有効質量テンソル (effective mass tensor)  $m^*$  は, この逆行列として定義される.

$$F_i = \sum_j m_{ij}^* \frac{dv_j(\mathbf{k})}{dt}. \quad (2.40)$$



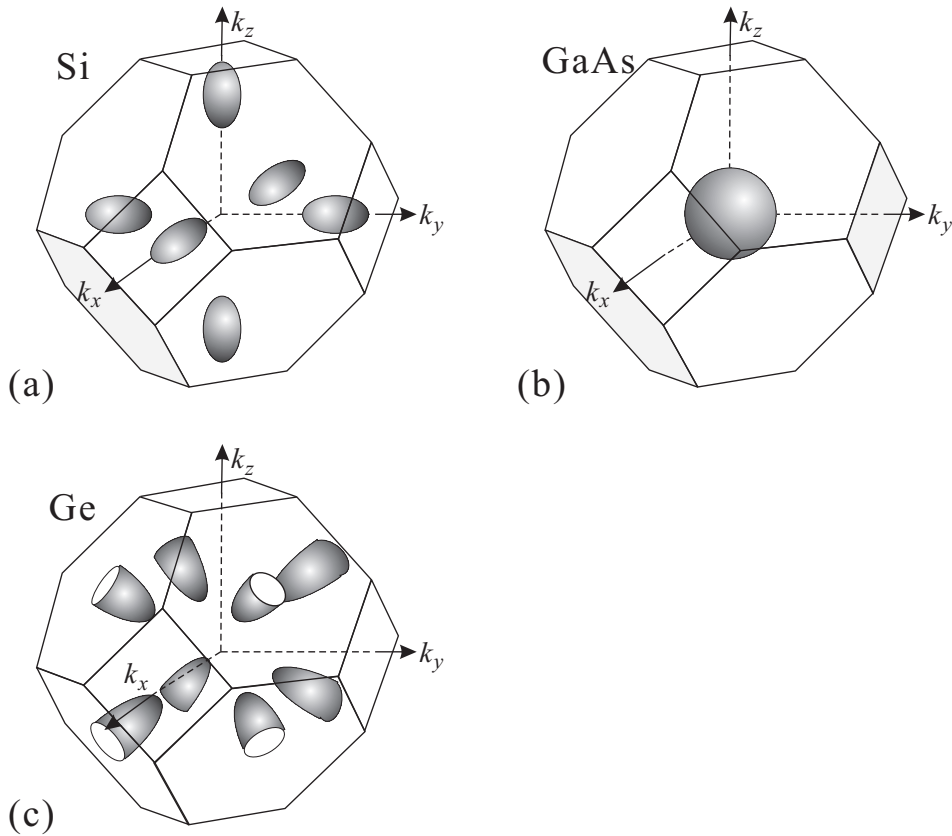


図 2.10 図 2.9 の擬ポテンシャル計算から得られたバンド構造を元に、(a) Si, (b) GaAs, (c) Ge の伝導帯の適当なエネルギーについて、 $k$  空間内での等エネルギー面を模式的に描いたもの。第 1 ブリュアンゾーンに限定したため、L 点にバンドの谷の底がある Ge の場合、ゾーン界面が谷を表す回転楕円体の中央を分断する形になっている。

今、あるエネルギーバンドの底の分散関係が等方的で  $E(k) = ak^2$  のようであったとすると、 $m^*$  はスカラーとなり、 $\hbar^2/(\partial^2 E(k)/\partial k^2) = \hbar^2/2a$  である。また、NFEA でギャップが開いた (1.9) の場合を考えると、 $\Delta k \sim 0$  では、

$$E_{\pm} \approx \epsilon_z \pm V_0 \left[ 1 + \frac{\epsilon_z}{2V_0} \left( \frac{\Delta k}{k_g} \right)^2 \right], \quad k_g \equiv \frac{\sqrt{2m_0 V_0}}{\hbar} \quad (2.41)$$

であるから、有効質量は

$$m^* = \pm \frac{\hbar^2}{2} \frac{2V_0}{\epsilon_z} \frac{2m_0}{\hbar^2} = \pm \frac{2V_0}{\epsilon_z} m_0 = \pm \frac{\epsilon_g}{\epsilon_z} m_0 \quad (2.42)$$

となる。 $\epsilon_z$  はバンドの幅、 $\epsilon_g$  はバンドギャップ幅であるから、この簡単な近似では、バンド幅に比べてバンドギャップがどの程度あるかによって有効質量が決まっており、ギャップが相対的に大きいほど有効質量は重くなる。もちろん、大変粗い近似の結論ではあるが、同型のバンドの場合、傾向としては一致することが多く、例えば GaAs, InP, InAs の  $\Gamma$  点の伝導帯の有効質量などではこのような傾向がある。

## 2.2.5 バンド端構造測定：サイクロトロン共鳴

2.2.1 節で見た ARPES は、原理的に測定範囲が  $E_F$  以下に限られる。また、半導体特有の電気伝導や光学応答について理論的な予言を行うのに必要なパラメーターを得るには、まだ精度が十分とは言えない。伝導帯、価電子帯の「底」の部分の情報を実験的に得る手段として、古くから使われてきたのがサイクロトロン共鳴 (cyclotron resonance) である。これは、磁束密度  $B$  中の電荷  $q$ 、質量  $m$  の荷電粒子の運動を磁場に垂直な面に射影すると、サ

イクロトン振動数

$$\omega_c = \frac{qB}{m} \quad (2.43)$$

で円運動することを使っている。

古典的に解析してみる。有効質量テンソル  $\overleftrightarrow{m}$ ，電荷  $q$  のキャリアに対する運動方程式は，散乱時間を  $\tau$  として，

$$\overleftrightarrow{m} \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\overleftrightarrow{m}\mathbf{v}}{\tau} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2.44)$$

である。電場が  $\mathbf{E}e^{-i\omega t}$ ，速度も  $\mathbf{v}e^{-i\omega t}$  のように変動するものとする，

$$\left(-i\omega + \frac{1}{\tau}\right) \overleftrightarrow{m}\mathbf{v} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.45)$$

$\mathbf{v}$  を一旦こう置いてしまうと，共鳴条件は  $\mathbf{E} = 0$  でも同じであるため，簡単のために  $\mathbf{E} = 0$  とする。標記簡単化のため  $\omega' = \omega + i/\tau$  とし， $\mathbf{B} = B(\alpha, \beta, \gamma)$ ，また

$$\overleftrightarrow{m}^{-1} = \begin{pmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

とすると（結晶が立方対称である時，この条件が満たされる），

$$\begin{aligned} i\omega' m_1 v_x + q(v_y B_z - v_z B_y) &= 0, \\ i\omega' m_2 v_y + q(v_z B_x - v_x B_z) &= 0, \\ i\omega' m_3 v_z + q(v_x B_y - v_y B_x) &= 0. \end{aligned}$$

これがトリビアルでない解を持つためには

$$\begin{vmatrix} i\omega' m_1 & qB\gamma & -qB\beta \\ -qB\gamma & i\omega' m_2 & qB\alpha \\ qB\beta & -qB\alpha & i\omega' m_3 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.47)$$

条件  $\omega_c \tau \gg 1$  より，

$$\omega_c = \frac{qB}{m_c} = qB \sqrt{\frac{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}{m_1 m_2 m_3}} \quad (2.48)$$

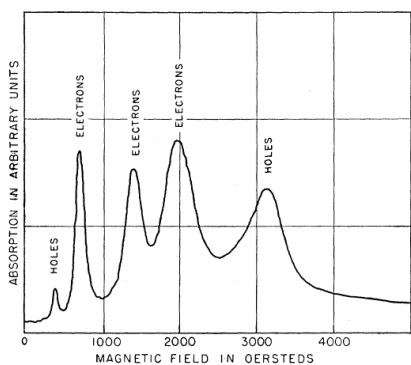
である。 $m_c$  は (2.43) が成立するとして実験的に得られる質量で，サイクロトン質量と呼ぶ。

実験では，条件  $\omega_c \tau \gg 1$  が成立しなければならないが，このためには不純物が少ない試料である必要があり，低温ではキャリア濃度（後出）が大変低くなる。このため，実験においては通常光照射などによってキャリアを励起して測定する。図 2.11(a) に示したのはこのような方法によって，マイクロ波（24 GHz）の吸収を通してサイクロトン共鳴信号を得た例である。いくつかのピークに伝導帯の励起である electron(電子)，価電子帯の励起である hole(正孔) というサインがある。電子が負電荷を持つものに対して，正孔は先の講義で説明するように正の電荷を持っている。このため，マイクロ波として円偏光したものを使用すると，偏波の回転方向により吸収強度の応答が逆になり，そのことによりこのようなアサインができたものである。

実際の解析においては，結晶の対称性からバンド端付近の等エネルギー面は回転楕円体になることが結論されるため楕円体方向に座標軸を取り直すと，有効質量は，長軸（主軸）方向の  $m_l$  と単軸方向の 2 つの  $m_t$  を対角項とするテンソルで表される。磁場と長軸との角度を  $\theta$  として，(2.48) は

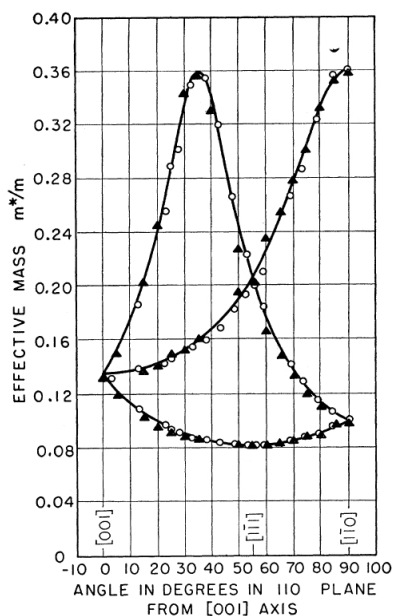
$$\left(\frac{1}{m_c}\right)^2 = \frac{\cos^2 \theta}{m_t^2} + \frac{\sin^2 \theta}{m_l m_t} \quad (2.49)$$

となる。Ge と Si の電子信号についての磁場角度依存性をそれぞれ図 2.11(b), (c) に示した。この信号解析から，回転楕円体の向き（従って対称性からその数）， $m_t$ ， $m_l$  の値を知ることができる。

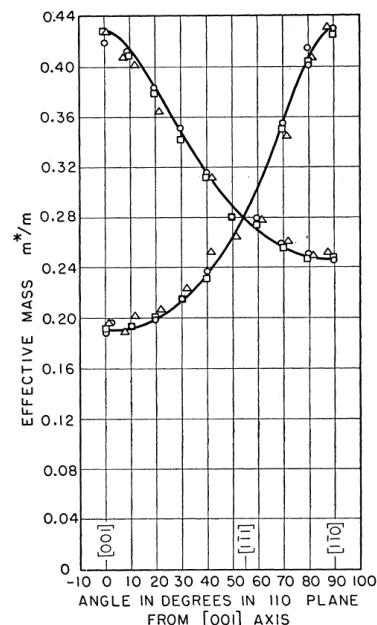


(a)

図 2.11 (a) サイクロトン共鳴によるマイクロ波吸収信号の例 (Ge). (b) サイクロトン質量の磁場角度依存性 (Ge 電子). (c) 同じく Si 電子. [1] より.



(b)



(c)

## 2.2.6 バンド端構造計算 : $k \cdot p$ 摂動法

$k \cdot p$  摂動の基本は、第 1 回の講義で提示した式 (1.4) である。すなわち、ブロッホ関数  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を元の周期ポテンシャル Schrödinger 方程式に代入して得られる  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の条件式である。1次元の (1.4) を、3次元系について書き直すと、

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} - i \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{k} \cdot \nabla \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.50)$$

が得られる。ブロッホ波数  $\mathbf{k}$  はパラメーター ( $c$  数) で演算子ではない点に注意する。

(2.50) 左辺の括弧内を  $\mathbf{k}$  に依存するハミルトニアン  $\mathcal{H}(\mathbf{k})$  と考え、 $\mathcal{H}_0 \equiv \mathcal{H}(\mathbf{0})$  を無摂動ハミルトニアン、

$$\mathcal{H}'(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} - i \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{k} \cdot \nabla \quad (2.51)$$

を摂動項として扱う。演算子の項は第 2 項であり、 $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  の形をしているのが、命名の所以である。

すなわち、(2.51) は  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  でゼロになるので、この無摂動状態の解 (格子周期ポテンシャル中の格子周期関数) を、何らかの方法で精確に求めることができたとする。この固有関数の集合  $\{u_{j0}(\mathbf{r})\}$  は完全系であるから、

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{j=0}^{\infty} c_{nj}(\mathbf{k}) u_{j0}(\mathbf{r})$$

と展開できる。この  $c_{nj}(\mathbf{k})$  を  $\mathcal{H}'(\mathbf{k})$  に対する摂動論で求めよう、というのが、 $k \cdot p$  摂動法である。

上では、 $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  を無摂動点にとったが、 $k$  空間で結晶の対称性が高い点では、7.1 節の空格子点近似で見たように何らかの状態の縮退が生じており、準位間反交差によって  $\partial E / \partial k = 0$  となっているから、ここを起点に  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  ( $\Gamma$  点) の場合と同様、 $k \cdot p$  摂動を行うことができる。このような点の周りでは  $\mathcal{H}'(\mathbf{k})$  は小さく、摂動として扱うことが現実的となる。また、このような点のバンド構造が様々な半導体特有の性質を決定していることが多い。上の展開で現実には無限和を求めることはできないので、問題にしているバンド  $n$  の周りで幾つのバンドを入れて計算するか、そして摂動の次数により精度が決まる。

(a)  $u_{i0}(\mathbf{r})$  に縮退がない場合

$$u_{i\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{i0}(\mathbf{r}) + \sum_{j \neq i} \frac{\langle j | \mathcal{H}' | i \rangle}{E_i - E_j} u_{j0}(\mathbf{r}), \quad E_i(\mathbf{k}) = E_i(0) + \langle i | \mathcal{H}' | i \rangle + \sum_{j \neq i} \frac{|\langle i | \mathcal{H}' | j \rangle|^2}{E_i - E_j} \quad (2.52)$$

が1次摂動の結果として得られる。ただし、 $|u_{i0}(\mathbf{r})\rangle$  を  $|i\rangle$  と略記した。 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ ,  $\langle i|\nabla|i\rangle = 0$  であるから、

$$E_i(\mathbf{k}) = E_i(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^4}{m_0^2} \sum_{j \neq i} \frac{\langle i|\mathbf{k} \cdot \nabla|j\rangle \langle j|\mathbf{k} \cdot \nabla|i\rangle}{E_i - E_j}. \quad (2.53)$$

(b)  $u_{i0}(\mathbf{r})$  が縮退している場合  $u_{00}(\mathbf{r})$  が  $n$  重縮退している場合 (他の準位の場合も同様), この準位を直交基底  $u_{00}^j(\mathbf{r})$  ( $j = 1, \dots, n$ ) で表し ( $|0j\rangle$  と略記), 摂動を受けた波動関数を1次結合  $|u_{0\mathbf{k}}\rangle = \sum_{j=1}^n A_{ij}(\mathbf{k})|0j\rangle$  で近似しよう。これを (2.50) へ代入して  $[\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' - E_0(\mathbf{k})]u_{0\mathbf{k}} = 0$  として,  $|0i\rangle$  との内積を取ると,

$$\sum_{j=1}^n A_{ij}(\mathbf{k}) [\langle 0i|\mathcal{H}_0|0j\rangle + \langle 0i|\mathcal{H}'|0j\rangle - \langle 0i|E_0(\mathbf{k})|0j\rangle] = \sum_{j=1}^n A_{ij}(\mathbf{k}) [\langle 0i|\mathcal{H}'|0j\rangle + (E_0 - E_0(\mathbf{k}))\delta_{ij}] = 0 \quad (2.54)$$

であるから, 自明でない解が存在するための条件は永年方程式

$$|\langle 0i|\mathcal{H}'|0j\rangle + (E_0 - E_0(\mathbf{k}))\delta_{ij}| = 0 \quad (2.55)$$

であり, これから分散関係  $E_0(\mathbf{k})$ , また解  $A_{ij}(\mathbf{k})$  から  $\mathbf{k}$  に対応する固有関数系の近似式を得ることができる。

## 2.2.7 スピン軌道相互作用

スピン軌道相互作用 (spin-orbit interaction) をきちんと導出するには, Dirac 方程式まで戻す必要があり, 時間不足であるので, ここでは, スピン軌道相互作用ハミルトニアンとして

$$\mathcal{H}_{so} = -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times (\nabla V) \quad (2.56)$$

を採用してバンド構造への影響を調べる。 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  はパウリ行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

を要素とするベクトルである。(2.50) に (2.56) を加えて (1.5) を用い,

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V \right] |n\mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |n\mathbf{k}\rangle, \quad (2.58)$$

$$\boldsymbol{\pi} \equiv \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V,$$

である。再びバンド端の基底  $|\nu 0\rangle$  を用いての展開を行う。ただし, 今度はスピン自由度を考慮し,  $|\nu, \sigma\rangle \equiv |\nu 0\rangle \otimes |\sigma\rangle$  として,  $|n\mathbf{k}\rangle = \sum_{\nu', \sigma'} c_{n\nu\sigma} |\nu', \sigma'\rangle$  と展開し,  $\langle \nu, \sigma|$  と内積を取ることによって固有方程式

$$\sum_{\nu', \sigma'} \left\{ \left[ E_{\nu'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} + \Delta_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} \right\} c_{n\nu'\sigma'} = E_n(\mathbf{k}) c_{n\nu\sigma} \quad (2.59)$$

が得られる。ただし,

$$\mathbf{P}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} \equiv \langle \nu\sigma | \boldsymbol{\pi} | \nu'\sigma' \rangle, \quad \Delta_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} \equiv \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \langle \nu\sigma | [\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V)] | \nu'\sigma' \rangle \quad (2.60)$$

である。固有値問題を解くことで分散関係が得られる。この表式においてはスピン軌道の部分を省略しても十分良い近似であることが多い。この場合は  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p}$ ,  $\mathbf{P}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} = \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{P}_{\nu\nu'}$  である。

## 2.2.8 fcc 半導体の $\Gamma$ 点付近波動関数

半経験論的  $k \cdot p$  法では、固有関数の詳細は未知のまま物理量計算に必要なパラメーターを抽出し、ここに実験値を使う。これらのパラメーターは、対称性の高い点の周りでは無限積分により多くが零となり計算を容易にするので、結晶格子及び原子軌道の空間対称性の知見が有用である。組織的な議論には空間群の知識が有効であるが、紙数もないためここでは fcc 構造を持つ半導体の例を見ておこう。 $\Gamma$  点周辺のみを考える。

IV 族ダイヤモンド構造および III-V 族閃亜鉛鉱構造 (これら 2 つを DZB 構造と略記) 半導体のブラベー格子は fcc であり、図 5.10(b) の構造からもわかるように、化学結合論的には各原子において  $sp^3$  混成軌道を生じて共有結合的に結晶が形成されている。III-V 族では、 $sp^3$  電子配置を取るため各原子がイオン化し、イオン結合性も持つ。結局バンドギャップ付近バンド構造に直接影響するのは  $s$  軌道、 $p$  軌道である。DZB 構造では、fcc 1 原子あたり 2 個の原子がある (図 5.10)。図 5.9 で  $Z = 2 \times 4 = 8$  としてみると、 $\Gamma$  点からの距離  $\sqrt{3}$  付近の縮退点でフェルミ準位付近にギャップが開くことがわかる。

原子核近傍では  $|s\rangle$  類似の角度依存性を持ち、並進対称性を持つ関数  $|S\rangle$  を考える。具体的には、 $s$  軌道そのもの  $|s\rangle$  の線形結合 (linear combination of atomic orbitals) を取って

$$|u_s\rangle = \sum_{i,\beta} a_{i\beta} |s_{i\beta}\rangle$$

のようにする。ここで、 $i$  は単位胞の指数、 $\beta$  は擬ポテンシャルの時に見たように、単位胞内の原子の指数である。上式は、結晶の並進対称性は満たしているが、結晶ポテンシャルに対する Schrödinger 方程式には従っていない。そこで、上式で  $s$  軌道の回転対称性は保ったまま  $|s\rangle$  の形を変化させることで、 $|u_s\rangle$  が Schrödinger 方程式に従うようにできる、と考える。このように変化させた LCAO 波動関数を  $|S\rangle$  と書き、

$$\mathcal{H}_0 |S\rangle = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] |S\rangle = E_c |S\rangle \quad (2.61)$$

を満たすことを要請する。全く同様に、 $|p_x\rangle$ ,  $|p_y\rangle$ ,  $|p_z\rangle$  類似の並進対称関数  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$  を考える。 $\Gamma$  点では、伝導帯の底付近は  $s$  軌道、価電子帯の頂上付近は  $p$  軌道からできているので、これらの関数について無摂動 ( $\mathbf{k} = 0$ ,  $\Gamma$  点) の方程式、

$$\mathcal{H}_0 |\zeta\rangle = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] |\zeta\rangle = E_b |\zeta\rangle \quad (2.62)$$

( $\zeta = S, X, Y, Z$  で、 $E_b$  は  $\zeta = S$  に対し伝導帯の底で  $E_c$ 、それ以外に対し価電子帯の頂上で  $E_v$ ) を満たすことを要請する。本当にこのようにできるのかどうかを疑問に思われると思うが、実は、空格子近似で  $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$  を中心とするパラボラが縮退している点の周りでは、対称性の議論から上記  $s$  軌道、 $p$  軌道 3 種と同じ角度依存性の軌道を適用して良いことがわかっている\*1。

スピン軌道相互作用を考える際の便宜のため、縮退している  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$  について、角運動量固有関数  $|p_{+1}\rangle$ ,  $|p_0\rangle$ ,  $|p_{-1}\rangle$  に相当する、

$$|+\rangle \equiv (|X\rangle + i|Y\rangle)/\sqrt{2}, \quad |0\rangle \equiv |Z\rangle, \quad |-\rangle \equiv (|X\rangle - i|Y\rangle)/\sqrt{2}$$

を基底に取り直す。以上軌道部分の 4 つと、スピン部分の  $\uparrow$ ,  $\downarrow$  の 2 基底の直積で全部で 8 つの基底を用い、縮退・スピン軌道相互作用を考慮した  $k \cdot p$  摂動計算を行う。

$|n\mathbf{k}\rangle$  に対する摂動ハミルトニアンを

$$\mathcal{H}' + \mathcal{H}_{\text{SO}} = -i \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{k} \cdot \nabla - \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V) \quad (2.63)$$

\*1 犬井, 田辺, 小野寺, 「応用群論」(裳華房, 1976) 第 11 章。

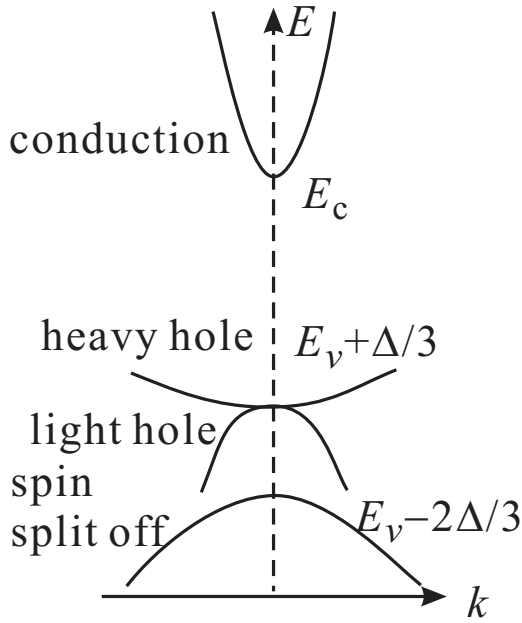


図 2.12 ダイヤモンド，閃亜鉛鉱型半導体について，S 軌道，P 軌道だけを考慮して  $k \cdot p$  摂動を行なって得られたバンド構造。スピン軌道相互作用によるスプリットは現れているが，重い正孔の有効質量は電子と同じ，すなわち，正孔質量が負になってしまう結果が得られた。

と取る。(2.58) から高次の項を落として  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p}$  とした。また， $|S\rangle$ ， $|X\rangle$  等の間での行列要素は

$$P \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_x|X\rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_y|Y\rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S|p_z|Z\rangle, \quad (2.64)$$

$$\Delta \equiv -\frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \langle X|[\nabla V \times \mathbf{p}]_y|Z\rangle = (xyz \text{ の循環}) \quad (2.65)$$

およびその共役要素しか存在しないことが原子核周りの対称性からわかる。

$\mathcal{H}'$  の行列要素で零でないものは，

$$\langle S\alpha|\mathcal{H}'|0\alpha'\rangle = Pk_z\delta_{\alpha\alpha'}, \quad \langle S\alpha|\mathcal{H}'|\pm\alpha'\rangle = \frac{\mp P}{\sqrt{2}}(k_x \pm ik_y)\delta_{\alpha\alpha'} \quad (2.66)$$

及び，この共役要素 ( $\mathcal{H}'_{ji} = (\mathcal{H}'_{ij})^*$ ) である。 $\alpha, \alpha'$  はスピン座標を表す。 $\mathcal{H}_{SO}$  については，

$$\begin{aligned} \langle \pm\uparrow|\mathcal{H}_{SO}|\pm\uparrow\rangle &= -\langle \pm\downarrow|\mathcal{H}_{SO}|\pm\downarrow\rangle = \pm\Delta/3, \\ \langle \pm\alpha|\mathcal{H}_{SO}|0\alpha'\rangle &= (1 - \delta_{\alpha\alpha'})\sqrt{2}\Delta/3 \end{aligned} \quad (2.67)$$

以外の要素はすべてゼロになる。(2.62) より，無摂動部分  $\mathcal{H}_0$  については

$$\langle S\alpha|\mathcal{H}_0|S\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}E_c, \quad \langle \{+, 0, -\}\alpha|\mathcal{H}_0|\{+, 0, -\}\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}E_v \quad (2.68)$$

である。

以上から，永年方程式を得てエネルギー固有値  $E_n(\mathbf{k})$  を求める。今の基底で  $\mathcal{H}'$  を表す行列は， $8 \times 8$  であるが，簡単のため  $\mathbf{k} = (0, 0, k)$  と波数を  $z$  方向に限ると

$$\begin{bmatrix} H_d & 0 \\ 0 & H_d \end{bmatrix}$$

のように  $4 \times 4$  行列に分解され，

$$H_d = \begin{bmatrix} E_c & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_v - \Delta/3 & \sqrt{2}\Delta/3 & 0 \\ kP^* & \sqrt{2}\Delta/3 & E_v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_v + \Delta/3 \end{bmatrix} \quad (2.69)$$

である。

これから、固有値  $\lambda$  についての永年方程式を求めると、

$$\lambda = E_v + \frac{\Delta}{3},$$

$$(\lambda - E_c) \left( \lambda - E_v + \frac{2\Delta}{3} \right) \left( \lambda - E_v - \frac{\Delta}{3} \right) - |P|^2 k^2 \left( \lambda - E_v + \frac{\Delta}{3} \right) = 0.$$

である。2 番目の式については、 $|P|^2 k^2$  の項が小さいと近似すると、伝導帯側  $E_c(\mathbf{k})$  と、価電子帯側  $E_{vj}(\mathbf{k})$  について、

$$E_c(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{|P|^2 k^2}{3} \left[ \frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right], \quad (2.70)$$

$$E_{v1}(\mathbf{k}) = E_v + \frac{\Delta}{3} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (2.71)$$

$$E_{v2}(\mathbf{k}) = E_v + \frac{\Delta}{3} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2|P|^2 k^2}{3E_g}, \quad (2.72)$$

$$E_{v3}(\mathbf{k}) = E_v - \frac{2\Delta}{3} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{|P|^2 k^2}{3(E_g + \Delta)} \quad (2.73)$$

が得られる。

以上から得られる  $k = 0$  付近のバンドの様子を図 2.12 に示した。有効質量の小さな伝導帯、2 種類の有効質量を持つ価電子帯頂上とスピン軌道相互作用のためにエネルギーが低い位置にあるスピンスプリットオフバンドは再現され光学測定やサイクロトロン共鳴の結果とはこれらの点では一致しているものの、特に重い方の価電子帯の有効質量が真空中電子と同じで曲率が反転しており、従って重い正孔の質量が負になってしまう点など、現実とは全く異なる結果を与えている。これは、縮退した 4 バンドだけ考慮して 1 次の摂動を行った粗い近似によるものであり、周囲のバンドも考慮し、摂動も 2 次まで行うことで精度は向上する。アルゴリズム開発や計算機性能の向上などにより、20 バンド程度を超える計算も行われ、 $k$  の大きなところまで使える高精度の結果も得られている [4]。

少数の実験値を使って半経験的に  $k \cdot p$  の結果を使用する方法としては（ここはフィッティングするだけで  $k \cdot p$  の計算は全く行わないわけだが）、2 次摂動の結果を少数のパラメーター（Luttinger パラメーターなど）で表し、実験値に合うようにパラメーターを決める、というものである。ダイヤモンド型、閃亜鉛鉱型半導体の価電子帯の場合、

$$E_v(\mathbf{k}) = E_v + \frac{\Delta}{3} + Ak^2 \pm \sqrt{B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)}, \quad (2.74)$$

$$E_{vsp}(\mathbf{k}) = E_v - \frac{2\Delta}{3} + Ak^2 \quad (2.75)$$

として、 $A$ ,  $B$ ,  $C$  をサイクロトロン共鳴などから求める。

## 2.3 2次元物質：グラフェンのバンド構造

2次元系の形成法として、文字通り 2次元的に原子が並んだ結晶（2次元物質）を使用するものがあり、グラフェンがその代表である。強束縛近似の応用の格好の例であるので、ここでバンド構造計算について取り上げておこう。

単層グラフェンの結晶は、図 2.13(a) のように、炭素原子が 6 角格子を組んだ単純な構造をしている。図に示した菱形が単位胞で、単位格子ベクトルおよび逆格子ベクトルは、

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}a/2 \\ a/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 4\pi/\sqrt{3}a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} -2\pi/\sqrt{3}a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

と書くことができる。

以下、最も簡単な近似の下、グラフェンの電子状態を計算してみる。大変粗い近似であるから、実験と比べると精度はないが、真性グラフェンにおいて、フェルミ準位位置にディラック点があることが結晶構造から結論されることは理解できる。C 原子は IV 族で、最外殻電子は  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$  に詰めることになるが、結晶構造からもわ

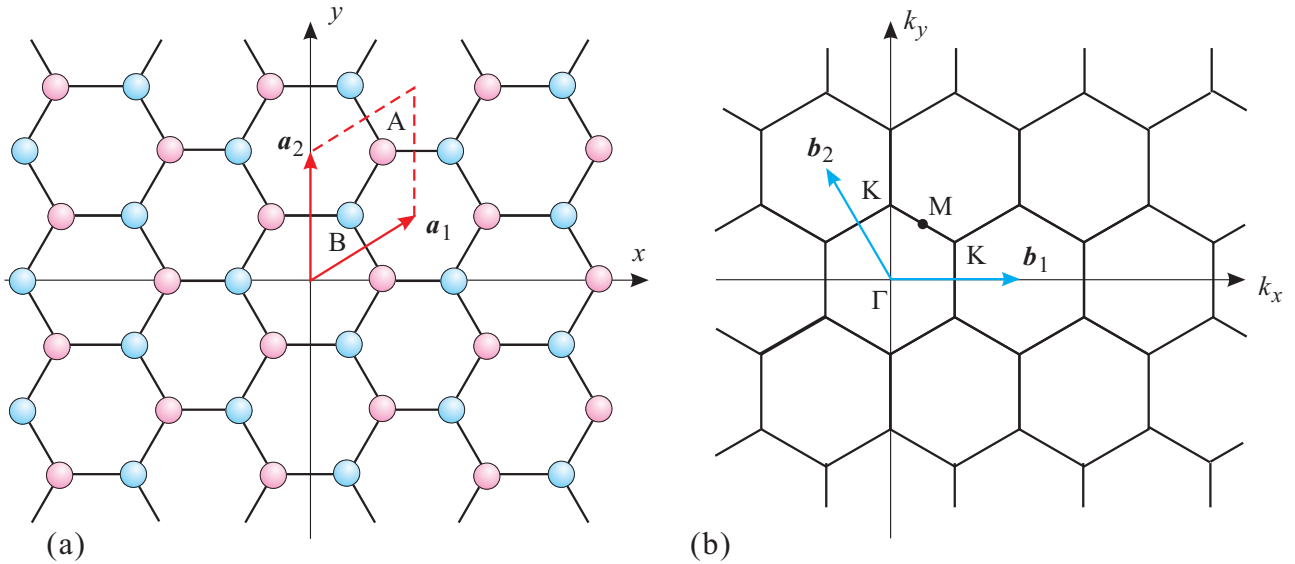


図 2.13 (a) グラフェンの 2 次元結晶構造. 炭素原子が蜂の巣的な六角格子構造を組んでいる. A 位置と B 位置の 2 種類の面心平方格子を重ねたものと見ることもできる. (b)(a) の逆格子.  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  に対応する逆格子ベクトルは  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  である. 第一ブリルアンゾーンの中心を  $\Gamma$  点, 対称性の良い点としては, 図に示した K 点, M 点がある.

かのように, これらは 1 次結合を作ることで,  $sp^2$  混成の  $\sigma$  電子と  $\pi$  電子に別れ,  $\sigma$  電子は共有結合を作って六角格子を形成しており, そのエネルギー帯は低い位置にある. 従って, フェルミ準位付近で問題となるのは  $\pi$  電子の方である. そこで, 六角格子上の  $\pi$  電子系について Schrödinger 方程式を考える.

これを

$$\psi = \mathcal{H}\psi \quad (2.77)$$

とし, 図 2.13(a) のように, 格子上のサイトを A サイトと B サイトとに分け, 強束縛近似で考える. すなわち,

$$\psi = \zeta_A \psi_A + \zeta_B \psi_B, \quad (2.78)$$

$$\psi_A = \sum_{j \in A} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2.79a)$$

$$\psi_B = \sum_{j \in B} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (2.79b)$$

$\phi(\mathbf{r})$  は  $\pi$  電子の原子波動関数,  $\mathbf{r}_j$  は格子位置である. ここで各部分格子波動関数間のハミルトニアン行列要素を

$$H_{AA} = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_A \rangle, \quad H_{BB} = \langle \psi_B | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad H_{AB} = H_{BA}^* = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad (2.80)$$

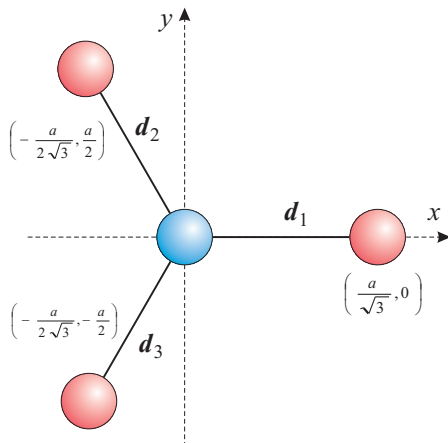


図 2.14 3 つの炭素原子最近接間結合を表すベクトル.



とする。また、系内の原子数を  $2N$ 、すなわち

$$\langle \psi_A | \psi_A \rangle = \langle \psi_B | \psi_B \rangle = N \quad (2.81)$$

とする。強束縛近似で  $\langle \psi_A | \psi_B \rangle = 0$  とすると、式 (2.78) を (2.77) に代入してトリビアルでない  $(\zeta_A, \zeta_B)$  が存在する条件から、永年方程式

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - NE & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} - NE \end{vmatrix} = 0 \quad (2.82)$$

が得られ、結局

$$E = (2N)^{-1} \left( H_{AA} + H_{BB} \pm \sqrt{(H_{AA} - H_{BB})^2 + 4|H_{AB}|^2} \right) \equiv h_{AA} \pm |h_{AB}|. \quad (2.83)$$

ただし、対称性より、 $H_{AA} = H_{BB}$  であることを用い、また、 $(2N)^{-1}$  で原子あたりにした量を小文字で表した。

$$H_{AB} = \sum_{l \in A, j \in B} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)] \langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_{\mathbf{r}}. \quad (2.84)$$

ここで更に、 $\mathcal{H}$  の行列要素は最近接波動関数にしかない、と近似する。計算するための中心原子を図 2.13(a) の A と書かれた原子に取ると、A から最近接原子 1, 2, 3 までの 3 つのベクトルを  $\mathbf{d}_i (i = 1, 2, 3)$  とすると、図から明らかのように、

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1 = \frac{k_x a}{\sqrt{3}}, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2 = \left( -\frac{k_x}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y}{2} \right) a, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_3 = \left( -\frac{k_x}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y}{2} \right) a \quad (2.85)$$

である ( $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$ )。また、 $\langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_{\mathbf{r}}$  の項については、対称性から全て等しく、これを  $\xi$  と置く。結局結晶構造から残りの共鳴積分はこの繰り返しであるから、

$$h_{AB} = \left( \sum_{j=1}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j) \right) \xi. \quad (2.86)$$

である。

式 (2.85), (2.86) を式 (2.83) へ代入することで、次のエネルギー表式が得られる。

$$E = h_{AA} \pm \xi \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}. \quad (2.87)$$

第 2 項が隣接原子共鳴積分による摂動項であるが、逆格子空間で K 点と呼ばれる

$$(k_x, k_y) = \left( 0, \pm \frac{4\pi}{3a} \right), \quad \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right), \quad \left( -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (2.88)$$

でゼロとなることがわかる。 $k_y = 4\pi/3a$  とすると、 $k_x = 0$  (K 点の 1 つ) の周りで (2.87) は

$$E \left( k_x, \frac{4\pi}{3a} \right) \approx h_{AA} + \frac{\sqrt{3}\xi a}{2} |k_x| \quad (2.89)$$

と表される。すなわち、K 点では上側のバンドは下側にリニアな尖った形になっている。下側も同様であるから、結局、K 点では図 2.15 のようにディラック点と呼ばれる、エネルギーギャップと有効質量がないバンド構造が生じる。

式 (2.87) 自身は、1 次元結晶の強束縛近似で余弦バンドが現れるのと同様で余り現実的なものではないが、上の議論で K 点にディラック点が現れた理由を考えると、式 (2.86) で  $2\pi$  を 3 等分する方向に等しい共鳴積分が存在することが挙げられ、このことは、近似の精度を上げて同じ対称性が成立するため、同じようにバンド構造に現れる。すなわち、K 点は現実的にディラック点と考えて良い。

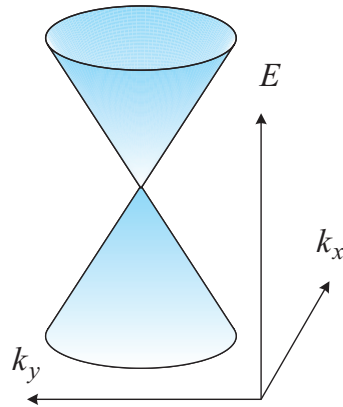
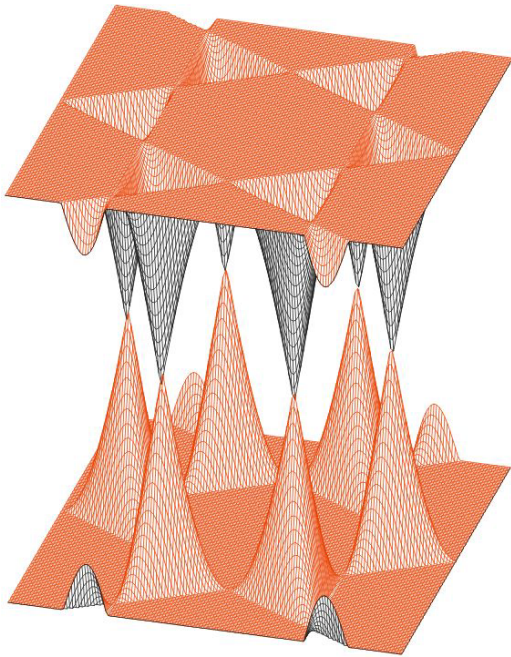


図 2.15 左図：グラフェンのエネルギーバンド表式 (2.87) をプロットし、K 点にコーンの頂点が一致した、ディラック点が現れる様子を示したもの。上図：ディラック・コーンを模式的に描いた。

## 付録 2A：密度汎関数法によるバンド計算

実際の物質中には多数の電子が存在し、その状態を表す波動関数は、粒子の入れ替え操作に対して反対称というフェルミ粒子の対称性を持っている。このために電子相関効果が生じる。また、電子間にはクーロン反発力が働いている。半経験的バンド計算においては、これらの電子間相互作用の効果は、一電子バンド描像のパラメーターを実験値へのフィットから得る際に取り込まれていたが、いわゆる第一原理 (ab initio) 計算においては、電子間相互作用を考慮することが求められる。電子間相互作用を取り入れた計算は、精度の高い計算には膨大な計算量を要し、計算機資源節約が求められるが、密度汎関数理論 (density functional theory, DFT) はその点が大変有利であり、様々な第一原理計算に使用されている。最近では、計算パッケージングによって、どんな計算をしているのかわからなくても答えが得られることもあるが、ここでは基本的な原理についてごく簡単に触れておく [5, ?].

第一原理から、様々な近似による計算結果を通して明らかになったことは、半導体のバンド構造の定性的な特徴は比較的簡単な近似でも再現できる一方、最も基本的な量であるバンドギャップですら、量子相関効果を取り入れなくては再現できない、ということである。相関効果をきちんと取り入れるのは DFT と言えども簡単ではなく、様々な場合によっては「第一原理」とは程遠い ad hoc と言われても仕方ないような理論の改変も行われる。当然ながら、計算がどのような近似で行われ、どの程度の精度があるか、注意が必要である。

### 2A.1 Kohn-Sham 方程式

Hohenberg と Kohn はポテンシャル  $v(\mathbf{r})$  中の電子ガスの状態について、電子分布密度を  $\rho(\mathbf{r})$  とすると、 $v(\mathbf{r})$  に依存しないユニバーサルな汎関数  $F\{\rho(\mathbf{r})\}$  を用いて  $\rho(\mathbf{r})$  に対する電子系のエネルギー  $E\{\rho(\mathbf{r})\}$  が

$$E\{\rho(\mathbf{r})\} = F\{\rho(\mathbf{r})\} + \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2A.1)$$

と書けること、また、 $E\{\rho(\mathbf{r})\}$  は、正しい基底状態の一電子密度  $\rho(\mathbf{r})$  に対して最小値を取ることを証明した。この証明は、基底状態に縮退がない場合についてであったが、Levy によってその制限は取り除かれている。証明は略す。

密度汎関数  $F\{\rho\}$  は  $v(\mathbf{r})$  を除くハミルトニアンを

$$\mathcal{H}_f = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i>j}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (2A.2)$$

として、形式的には次のように書かれる。

$$F\{\rho\} = \langle \Psi_N | \mathcal{H}_f | \Psi_N \rangle. \quad (2A.3)$$

$\Psi_N$  は  $\rho(\mathbf{r})$  を与える波動関数である。その具体的な形を求めるため、 $F\{\rho\}$  を

$$F\{\rho\} = T\{\rho\} + U\{\rho\} + E_{xc}^{(0)}\{\rho\} \quad (2A.4)$$

と分けて書いてみる。 $T\{\rho\}$  は運動エネルギー、 $U\{\rho\}$  は電子間のクーロン相互作用エネルギーを平均場近似で書いたもの

$$U\{\rho\} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad (2A.5)$$

で Hartree 項と呼ばれる。残りの  $E_{ex}\{\rho\}^{(0)}$  は交換相関 (exchange-correlation) エネルギーと呼ばれる。

$T\{\rho\}$  も運動エネルギーを  $\rho$  によって表すのは難しいので、次のような方法を使って変形する。仮想的な相互作用のない電子系が仮想的なポテンシャル  $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  中にあるとする。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \psi_i = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2A.6)$$

ただし、この仮想的電子系の電子濃度は、これまで考えた相互作用する電子系の濃度と一致する、とする。

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (2A.7)$$

この仮想系の運動エネルギーは

$$T_S\{\rho\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2A.8)$$

である。 $T_S\{\rho\}$  と  $T\{\rho\}$  との差も  $E_{ex}$  の方へくり込み

$$E_{ex}\{\rho\} = E_{ex}^{(0)} + T\{\rho\} - T_S\{\rho\} \quad (2A.9)$$

とすると、全エネルギーは

$$E\{\rho\} = T_S\{\rho\} + U\{\rho\} + E_{ex}\{\rho\} + \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2A.10)$$

と書ける。

ここで、 $\psi_i(\mathbf{r})^*$  について変分を行い、 $E\{\rho\}$  を最小化する。その際、規格化条件  $\langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1$  より、Lagrange の未定定数  $-\epsilon_i$  を導入する。すると、停留条件は

$$\frac{\delta E\{\rho\}}{\delta \psi_i^*} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \mu_{ex}(\mathbf{r}) - \epsilon_i \right] \psi_i(\mathbf{r}) = 0 \quad (2A.11)$$

となる。 $\mu_{ex}(\mathbf{r})$  は、

$$\mu_{ex}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{ex}\{\rho\}}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad (2A.12)$$

で定義される、交換相関ポテンシャル (exchange-correlation potential) と呼ばれる量である。停留条件を固有値方程式の形に書くと、

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \mu_{ex}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2A.13)$$

となる。(2A.13) は Kohn-Sham 方程式と呼ばれる。

結局以上で行ったことは、多体効果を  $E_{\text{ex}}\{\rho\}$  に押し込んだことである。今度はこれをどう得るかが問題となる。最も良く使用されてきた局所密度近似 (local density approximation, LDA) では、

$$E_{\text{ex}}\{\rho\} = \int \epsilon_{\text{ex}}\{\rho(\mathbf{r})\}\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2A.14)$$

として、 $\epsilon_{\text{ex}}\{\rho(\mathbf{r})\}$  としては、密度が  $\rho$  の一様電子ガスについて解かれた交換相関エネルギーの結果を用いる。その他、様々な近似が行われている。

## 参考文献

- [1] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel, Phys. Rev. **98**, 368 (1955).
- [2] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, "Electronics Structure and Optical Properties of Semiconductors" (Springer, 1988).
- [3] 浜口智尋「半導体物理」(朝倉書店, 2001). バンド計算などが比較的詳しく書かれている。良書だがこれも絶版のようである。英語版は C. Hamaguchi, "Basic Semiconductor Physics" (Springer, 2017). 高価だが ebook もある。
- [4] L. C. Lew Van Voon, M. Willatzen, "The k-p method" (Springer, 2009).
- [5] 望月和子, 鈴木 直「固体の電子状態と磁性」(大学教育出版, 2003). 多体問題やバンド計算の解説としても良書であるが、これもまた絶版。
- [6] 常田貴夫「密度汎関数法の基礎」(講談社, 2012). Kindle など, ebook あり。絶版になりにくいと期待している。

# 講義ノート 半導体 第3回

2021年4月24日 勝本信吾 東京大学物性研究所 (理学系研究科物理学専攻)

## 2.3.1 有効質量近似

空間的に一様でない摂動ポテンシャルを扱う方法を考える．結晶格子中の Schrödinger 方程式にポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  を加え

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \zeta(\mathbf{r}) = [\hat{H}_0 + U(\mathbf{r})] \zeta(\mathbf{r}) = E \zeta(\mathbf{r}) \quad (2.90)$$

とする． $\zeta(\mathbf{r})$  を  $\hat{H}_0$  の固有関数であるブロッホ状態  $\psi_{n\mathbf{k}}$  で

$$\zeta(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} f(n,\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} f(n,\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.91)$$

と展開する．(2.90) へ代入し， $\psi_{n'\mathbf{k}'}$  との内積を取ると， $\psi_{n\mathbf{k}}$  をブラケット記法で  $|n,\mathbf{k}\rangle$  と書いて，

$$[E_0(n',\mathbf{k}') - E] f(n',\mathbf{k}') + \sum_{n,\mathbf{k}} \langle n',\mathbf{k}' | U | n,\mathbf{k} \rangle f(n,\mathbf{k}) = 0 \quad (2.92)$$

である．第2項の  $U$  を挟む積分 ( $U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}$  と書く) は， $U(\mathbf{r})$  による  $|n,\mathbf{k}\rangle$  から  $|n',\mathbf{k}'\rangle$  への散乱を表す． $U$ ， $u_{n'\mathbf{k}'}^* u_{n\mathbf{k}}$  をフーリエ変換して

$$U(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{q} U_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} b_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

とする． $u_{n'\mathbf{k}'}^* u_{n\mathbf{k}}$  は格子の周期性があるので逆格子についてのフーリエ級数になる．係数  $b_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}$  は単位胞での積分を  $\Omega_0$ ，単位胞体積を  $v_0$  と書いて

$$b_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \int_{\Omega_0} \frac{d\mathbf{r}}{v_0} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

$$\therefore U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = \int d\mathbf{q} U_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{G}} b_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}.$$

最後の積分は  $(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q} + \mathbf{G})$  となり， $\mathbf{q}$  の積分を行うことで次が得られる．

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = (2\pi)^3 \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{G}} b_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(\mathbf{G}). \quad (2.93)$$

$U(\mathbf{r})$  は格子定数程度の空間スケールでは変化が小さいとすると， $U_{\mathbf{q}}$  として  $q$  がブリュアンゾーン端よりも十分小さな値  $|q| \ll \pi/a$  のもののみ考えれば良い．これは， $\mathbf{k}' - \mathbf{k} \sim \mathbf{G}$  とすることに相当するが， $U$  によってゾーンの端まで飛ぶような強い散乱が起こらないとすると， $\mathbf{G}$  として  $\vec{0}$  のみ取り得る．また， $U$  はバンドギャップより小さく， $U$  によるバンド間散乱はない，すなわち  $n \neq n'$  の間に行列要素はない，とする．結局，

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} \approx U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \delta_{n'n} \quad (2.94)$$

となり，(2.92) は次のように近似される．

$$[E_0(\mathbf{k}') - E] f(n,\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} f(n,\mathbf{k}) = 0. \quad (2.95)$$

次に (2.91) の展開について，この近似では  $u_{n\mathbf{k}}$  について  $\mathbf{k} \sim 0$  のもののみを考えるが，自由電子と類似とすると， $u$  は  $\mathbf{k}$  に対してほぼ一定 ( $\approx u_{n0}$ ) であり， $\mathbf{k}$  についての和から取り出せる．

$$\zeta_n(\mathbf{r}) = u_{n0} \sum_{\mathbf{k}} f(n,\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = u_{n0} F_n(\mathbf{r}). \quad (2.96)$$

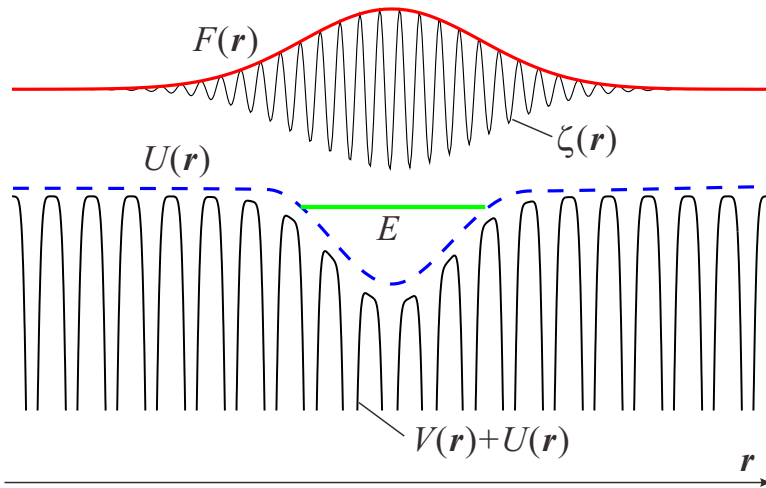


図 2.16 結晶ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  を持つ系にゆるやかな摂動ポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  が加わり、エネルギー  $E$  の束縛順位を持つ場合のポテンシャルと波動関数  $\zeta(\mathbf{r})$ 、包絡関数  $F(\mathbf{r})$  の模式図。

バンド間の混じりを無視し (2.95) は  $n$  について独立に書けているため、 $\zeta$  もバンドごとに考え、指数  $n$  を付けた。

包絡関数

$$F_n(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\mathbf{k}} f(n, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.97)$$

と定義される  $F_n(\mathbf{r})$  は  $f(n, \mathbf{k})$  の逆フーリエ変換であり、包絡関数と呼ばれ、格子間隔に比べて空間的にゆっくりした変化をする (図 2.16)。

無摂動時の分散関係に有効質量近似を使い、ここでは簡単のために等方的な質量  $m^*$  を使用して  $E_0(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^*$  とすると、(2.95) は、

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k} \mathbf{k}'^2}{2m^*} f(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = E f(\mathbf{k}') \quad (2.98)$$

となる。 $n$  を略した。これを、第 2 項にはすでに  $\mathbf{k}$  についての和があるためたたみ込み積分になることに注意して逆フーリエ変換すると、

有効質量方程式

$$\left[ \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}) \quad (2.99)$$

となって、 $F(\mathbf{r})$  の従う方程式は形式的に質量  $m^*$ 、ポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  のシュレディンガー方程式となる。

実際の波動関数は (2.96) より、包絡関数に格子周期の関数がかかったものであるが、包絡関数だけ見ることで、問題が摂動ポテンシャル中の有効質量をもつ粒子の量子力学に変化する。このように包絡関数レベルで考えることを有効質量近似、式 (2.99) を有効質量方程式という。ブロッホ固有状態は有効質量近似 (あるいは包絡関数の視点) では平面波状態、ということになる。

この有効質量近似の視点は、特に半導体工業技術を用いて固体中に様々な量子系をデザインして作り出す上で極めて有用である。次章の浅い不純物準位について早速適用する他、本講義中でも随所で使用することになる。注意点は、包絡関数は波動関数そのものではないため、ポテンシャル問題を考える際に使用する波動関数の値、空間微分の連続性などが必ずしも成立しないことである。特にこれまで仮定したように、摂動ポテンシャルの空間変化が必ずしも緩やかでない場合に注意が必要となる。



# 第3章 キャリア統計，不純物ドーピング

本章では，半導体中のキャリア (carrier, 電荷担体) のエネルギーに対する分布について考える．また，純粋な半導体に少量の不純物を加えることで物性を大きく変化させるドーピングを施した場合のキャリア統計についても考える．

## 3.1 真性半導体中のキャリア統計

不純物などが含まれていない純粋な半導体を真性半導体 (intrinsic semiconductor) と呼ぶ．これはもちろん，一種の「観念」ではあるが，特に不純物の少ない (ドーピングされていない) Si などはほぼ真性半導体であると言ってよい．高純度 Si ほどではなくても，温度など条件次第で真性半導体と考えてよい場合もある．

### 3.1.1 状態密度

ある方向  $i$  に対して，格子定数  $a_i$  の系を考え，そのサイズを  $N_i$  格子分とする．端は周期境界条件とする．結晶波数  $k_i$  の取りうる値は  $2\pi/N_i a_i$  の整数倍，すなわち， $\delta k_i = 2\pi/N_i a_i$  あたり 1 つの波数状態が存在する．そこで自由電子系を単純立方格子 (3次元の場合) の空格子近似で考え，各直交座標方向  $Na = L$  とすると， $n$  次元  $\mathbf{k}$  空間の体積  $(2\pi/L)^n$  当りに 1 つの状態がある (図 3.1(a))． $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_0$  より， $E$  と  $E + dE$  との間にある状態数密度 (図 3.1(b)) を  $dE$  で割ったものは  $\mathbf{k}$  空間での半径  $k$  の  $d$  次元球の体積を  $V_d(k)$  と書いて

$$\mathcal{D}(E) = \frac{1}{L^d} \left( \frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{dV_d(k)}{dE} = \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{dV_d(k)}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{dV_d(k)}{k dk} \tag{3.1}$$

で与えられる．この  $\mathcal{D}(E)$  をエネルギー状態密度 (density of states) という． $V_1 = 2k$ ， $V_2 = \pi k^2$ ， $V_3 = 4\pi k^3 / 3$  より，スピン自由度 2 も考えて 2 倍すると次が得られる (図 3.2)．

$$\mathcal{D}_{d=1}^{(0)} = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m_0}{E}}, \quad \mathcal{D}_{d=2}^{(0)} = \frac{m_0}{\pi \hbar^2}, \quad \mathcal{D}_{d=3}^{(0)} = \frac{\sqrt{2m_0^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}. \tag{3.2}$$

結晶中バンド電子の場合も，有効質量近似が成立すれば (3.2) の  $m$  を有効質量で置き換えて状態密度を表すことができる．そうでない場合は，定義に戻り，例えば 3次元系なら

$$\mathcal{D}(E) = \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{dS_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \frac{2}{\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})} \tag{3.3}$$

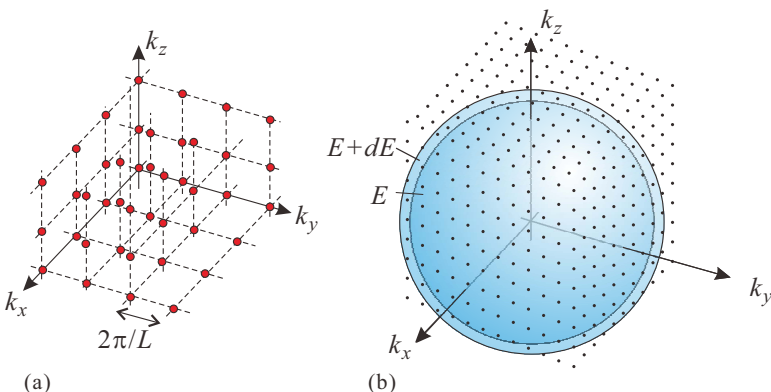


図 3.1 (a) 3次元自由電子の単純立方空格子近似に対して波数空間で結晶波数が取り得る点を赤丸で表した．(b) エネルギーが  $E$  と  $E + dE$  の間の球殻中にある  $\mathbf{k}$  可能点の数を数える．

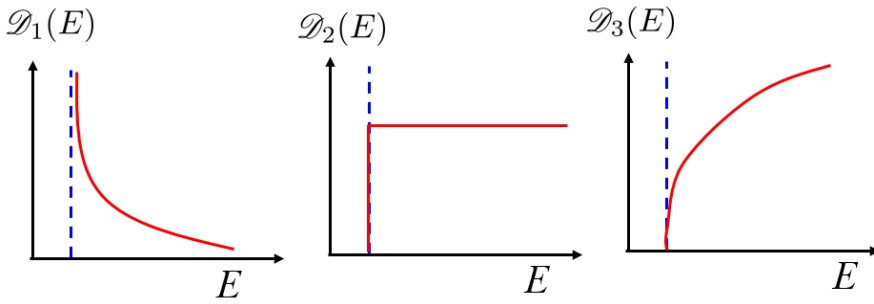
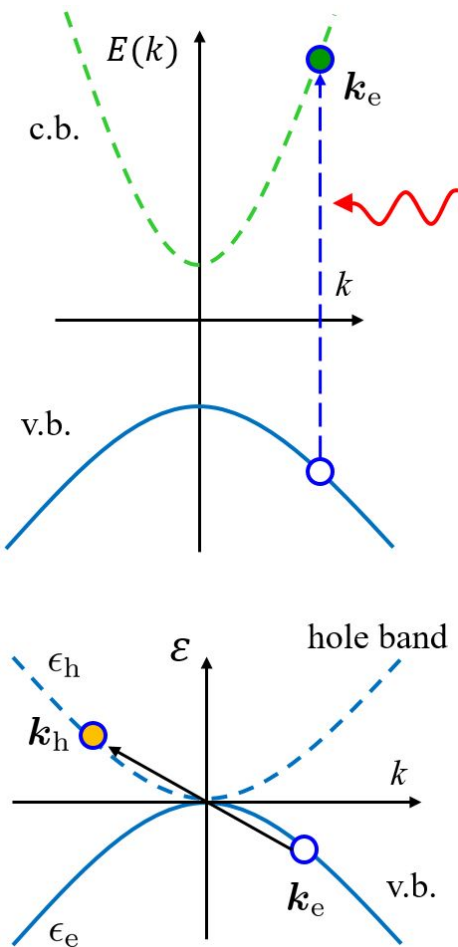


図3.2 式(3.2)の1, 2, 3次元の状態密度を、模式的に描いたもの.

を計算する. 積分は  $\mathbf{k}$  空間の  $E(\mathbf{k}) = E$  の面上で行う.

### 3.1.2 正孔概念



価電子帯が電子で完全に詰まった状態では, 価電子が運ぶ全電流  $\mathbf{J}_{\text{v.b.}}$  は逆向き電子により相殺されゼロとなる ( $\mathbf{J}_{\text{v.b.}} = \sum_{\text{v.b.}} (-e)\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = 0$ ). 左図のように何らかの原因で結晶波数  $\mathbf{k}$  の一電子状態が空いたとすると,

$$\mathbf{J}_{\text{v.b.}}(\mathbf{k}) = \sum_{\text{v.b.}} (-e)\mathbf{v}_{\mathbf{k}'} - (-e)\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = e\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \quad (3.4)$$

となり, あたかも速度  $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$  の電荷  $+e$  を持った粒子がいるかのような状態になるこの価電子帯の多体状態を, **正孔**と呼ぶ.

正孔の波数を考え,  $\mathbf{k}_h$  と書く. 上記多体状態の持つ波数は正孔生成による価電子帯波束の変化分であるから,

$$\mathbf{k}_h = \sum_{\text{v.b.}} \mathbf{k}'_e - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e \quad (3.5)$$

となり, 引き抜いた電子の波束  $\mathbf{k}_e$  の符号を反転したものである. 電場  $\mathbf{E}$  がかった場合価電子帯の電子は, 有効質量に応じて加速/減速され,  $\mathbf{k}$  空間内を移動する. 電子分布の中の「孔」の位置も同じ方向に移動する. すなわち正孔の運動方程式は電子と同じである. しかし, 正孔を  $+e$  の電荷を持つ粒子とすると, 電場による加速度の向きは電子とは逆になるため, 正孔描像と整合させるためには, 有効質量の符号も反転させなければならない.

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = (-e)\mathbf{E} \rightarrow (-m^*) \frac{d\mathbf{v}}{dt} = e\mathbf{E}.$$

更に, 運動エネルギーについても, 価電子帯のエネルギーは引き抜いた電子の分減少している. エネルギーの原点を価電子帯頂上にとると,

$$\left(\frac{1}{m_h^*}\right)_{ij} = -\left(\frac{1}{m_e^*}\right)_{ij}, \quad E_h(\mathbf{k}_h) = E_h(-\mathbf{k}_e) = -E_e(\mathbf{k}_e). \quad (3.6)$$

(3.6) より, 有効質量  $m_h^*$  は価電子帯頂上付近で正になり, 正孔の分散関係は価電子帯の分散関係を 180 度回転した形となる. 正孔の状態密度  $\mathcal{D}_h(E)$  を定義できるが, これは電子の状態密度  $\mathcal{D}_e(E)$  と同じである. 以上より, 正孔状態を正電荷を持った電荷キャリアとして扱うことができる. 以上の描像とエネルギー分散ダイアグラムを整合させるには, 左図下パネルのホールバンドを考えるのが良い. 良く使われる価電子帯に白い穴を開けた描像 (左図でも実際使われている) は, 価電子帯全体で正孔を表しており, 穴の位置は  $\mathbf{k}_e$  に取られるので, 特に  $\mathbf{k}_h$  との違いに注意する必要がある.



### 3.1.3 熱平衡分布

有限温度で半導体が熱平衡状態にある時、電子・正孔がどのように分布するかを見る。以下しばらくは真性半導体に限らず、一般的に話を進める。すぐ次に見るように、ドーピングなどの効果は、摂動がそれ程大きくない場合は、フェルミ準位  $E_F$  の位置を変化させる。  $E \sim E + dE$  間に存在する電子・正孔の密度は、フェルミ分布関数を  $f(E)$  としてそれぞれ

$$g_e(E)dE = \mathcal{D}_e(E)f(E)dE, \quad (3.7a)$$

$$g_h(E)dE = \mathcal{D}_h(E)[1 - f(E)]dE \equiv \mathcal{D}_h(E)f_h(E)dE \quad (3.7b)$$

である。ここで、正孔の分布関数

$$f_h(E) = 1 - f(E) = \frac{1}{1 + \exp(E_F - E)/k_B T)} \quad (3.8)$$

を導入した (図 3.3(c)). 状態密度については、伝導帯の底と価電子帯の頂上について分散関係を有効質量を持つ自由電子で近似すると (3.2) より、

$$\mathcal{D}_e(E) = \frac{\sqrt{2m_e^*{}^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E - E_c} \quad (\text{伝導帯}), \quad (3.9a)$$

$$\mathcal{D}_h(E) = \frac{\sqrt{2m_h^*{}^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_v - E} \quad (\text{価電子帯}) \quad (3.9b)$$

と書くことができる。ここで、 $E_c$ 、 $E_v$  は図 3.3(a) に示したように、それぞれ伝導帯の底、価電子帯の頂上の位置である。

以上から、有限温度での電子と正孔の分布は図 3.3(b) のようになり、伝導帯中の電子の総数  $n$ 、価電子帯中の正孔の総数  $p$  は、

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g_e(E)dE = \frac{\sqrt{2m_e^*{}^3}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_c}dE}{1 + \exp(E - E_F)/k_B T)}, \quad (3.10a)$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} g_h(E)dE = \frac{\sqrt{2m_h^*{}^3}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{E_v} \frac{\sqrt{E_v - E}dE}{1 + \exp(E_F - E)/k_B T)} \quad (3.10b)$$

と表される。  $f_F(E) \ll 1 (E \geq E_c)$ 、  $f_h(E) \ll 1 (E \leq E_v)$  の場合、

$$f_F(E) \sim \exp(E_F - E)/k_B T, \quad f_h(E) \sim \exp(E - E_F)/k_B T \quad (3.11)$$

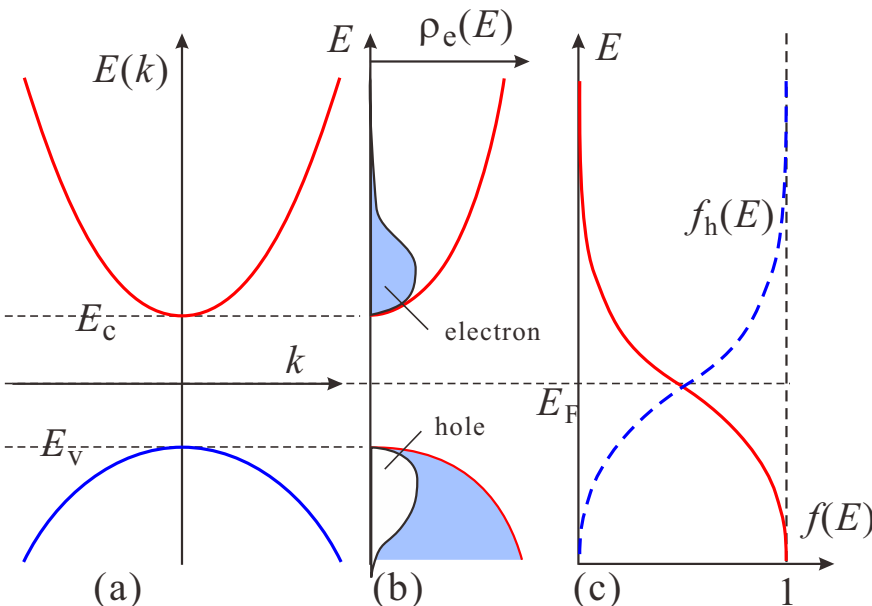


図 3.3 (a) バンド模式図. (b) 状態密度と電子・正孔の分布  $n(E)$ (グレー),  $p(E)$ (白抜き). (c) 電子分布関数  $f(E)$ (実線) と正孔分布関数  $f_h(E)$ (破線).

とマックスウェル (Maxwell) 分布で近似し,  $x = (E - E_F)/k_B T$  として公式

$$\int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

を適用することで,

$$n = 2 \left( \frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right) \equiv N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right), \quad (3.12a)$$

$$p = 2 \left( \frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) \equiv N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) \quad (3.12b)$$

が得られる.  $N_c, N_v$  は  $E_c, E_v$  にこの数の状態があるとした時に  $n, p$  を与える数であり, **有効状態密度** (effective density of states) と呼ばれる. (3.10a), (3.10b) より

半導体方程式

$$np = N_c N_v \exp\left(\frac{E_v - E_c}{k_B T}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) = n_i^2 \quad (3.13)$$

である\*1. 禁制帯の幅  $E_g \equiv E_c - E_v$  はエネルギーギャップ, また  $n_i$  は真性半導体の場合のキャリア濃度である. (3.13) はドーピングなどによって変化する  $E_F$  によらない形になっており, 熱平衡の  $np$  という積が, 半導体種と温度によって決まる量であることを示している.

真性半導体においては電荷を持っているのは電子・正孔だけであるから, 電気的中性条件より  $n = p$  で, これを  $n_i$  と置いたのが上の半導体方程式 (semiconductor equation, or law of mass action) である. また, 真性半導体においては, やはり  $n = p$  より

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_h}{m_e} \quad (3.14)$$

によって  $E_F$  の位置が与えられ, 低温では第2項は小さく,  $E_F$  はバンドギャップ中央付近に来る.

## 3.2 不純物ドーピング

半導体においてごく微量の不純物を混入することで, 物性に大きな変化を引き起こすことをドーピング (doping) と呼ぶ\*2.

### 3.2.1 ドナー, アクセプター

典型的な Si の場合を, 図 3.4 に模式的に示した. Si の単結晶で, Si 原子の最近接に 4 つの Si がある場合は, (a) のように, 中心に描かれた Si 原子は最外殻の電子を最近接 Si と共有し, 結果として最外殻に 8 個の電子がいて  $3s, 3p$  の軌道を埋めて閉殻構造を作っている. これを (b) のように V 族の Sb 原子で置換した場合, 閉殻構造を作ると最外殻電子が 1 個余る. 一方, Sb 原子核の電荷も周囲を囲む電子の電荷によって相殺されず  $+e$  だけ残るので, この残電荷が Sb 原子周囲にクーロンポテンシャルを生じる. 余った電子は, エネルギーの近い伝導帯へ励起されるか, このクーロンポテンシャル内に生じる伝導帯端から少し下の束縛準位に捕獲されるかのどちらか, となる. このように, 伝導帯や浅い準位へ電子を放出する不純物を **ドナー** (donor) と呼ぶ.

\*1 英語では, law of mass action で, かつては「質量作用の法則」という和訳が当てられていたが, 日本語では誤解を招きやすい表現であり, 最近「化学平衡の法則」とされることが多い. が, 半導体では「化学平衡」もおかしいので, これも最近ではほとんど見かけないが, 半導体方程式 (semiconductor equation) という表現を使ってみた.

\*2 高温超伝導に端を発する強相関係の研究で, 1% 以上, 半導体分野では合金と呼ぶのが適当な領域でも結晶型が変わらなければドーピングと呼ぶようになった. 更には, 強電場を印可しキャリア濃度を変化させることを電場ドーピングと呼び, 不純物の方は化学ドーピングと呼ぶ向きもあるが, ここでは半導体物理学・工学の伝統に従う.

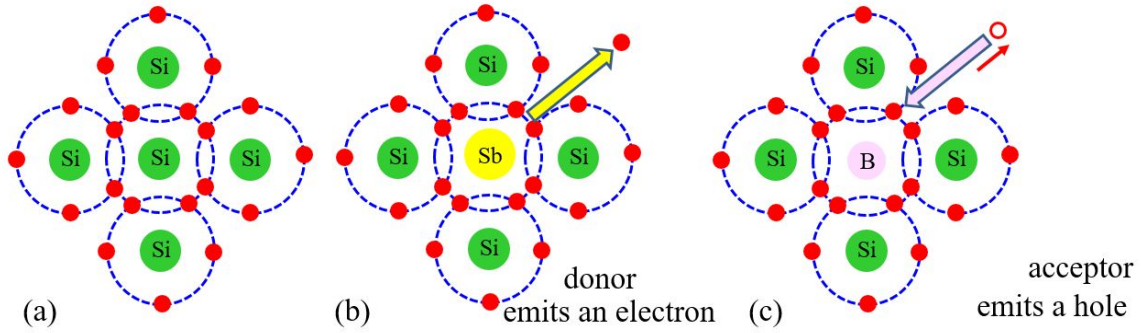


図 3.4 (a) Si 中 Si 原子の最外殻電子構造模式図。周囲の 4 つの原子と電子を共有して閉殻構造を形成。(b) Sb 原子に置換した場合。閉殻にすると最外殻電子が 1 個余るため、共有結合外へ放出。(c) B 原子に置換した場合。価電子帯に穴、すなわち正孔が生じる。

(c) のように、III 族の B 原子で置換した場合は、ちょうど Sb とは逆で閉殻構造を作るには電子が不足している。このため、価電子帯に正孔を作って電子を補うが、結果として B 原子の周りには、電子電荷の方が余計になり  $-e$  だけのクーロンポテンシャルを生じる。このように、価電子帯や浅い準位へ正孔を放出する不純物を **アクセプター** (acceptor) と呼ぶ。

IV 族の元素半導体に対して、化合物半導体の場合は状況がやや複雑になる。例えば、III-V 族半導体に IV 族元素をドーピングした場合、III 族サイトを置換すればドナーに、V 族サイトを置換すればアクセプターになる。このようにドーピングの仕方によってドナー/アクセプターが変化するような元素については、両性を持つ (amphoteric) という。

### 3.2.2 浅い水素原子型不純物状態に対する有効質量近似

ドナー、アクセプターの形成するクーロンポテンシャルについて、半導体は一般に価電子の分極によって比較的大きな誘電率を持っており、この不純物引力ポテンシャルは真空中に比べてかなり弱くなる。従って不純物束縛状態の束縛エネルギーは水素原子に比べて小さく、多くの場合いくつかの単位胞に広がった状態となり、有効質量近似が適用できる。

有効質量が等方的な場合、不純物位置に原点を取ると、 $U(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0\epsilon r$  であるから有効質量方程式は

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \right] F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}) \quad (3.15)$$

である。有効質量  $m^*$  と比誘電率  $\epsilon$  以外は水素原子問題と同形であり、水素原子の結果を応用できる。

$$Ry^* = \frac{e^2 m^*}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{m^*}{m} \frac{1}{\epsilon^2} Ry, \quad a_B^* = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m^* e^2} = \frac{m}{m^*} \epsilon a_B \quad (3.16)$$

は、それぞれ有効リュードベリ (Rydberg) 定数、有効ボーア半径である。

これらを使い、固有エネルギーは、

$$E_n = E_c - \frac{Ry^*}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (3.17)$$

と表され、特に  $1s$  軌道に相当する波動関数は、

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_B^{*3}}} \exp\left(-\frac{r}{a_B^*}\right) \quad (3.18)$$

である。有効質量が等方的である場合として、n 型の GaAs の場合、 $\Gamma$  点極小では  $\epsilon \approx 11.5$ 、 $m^* \approx 0.067m$  であるから、 $a_B^* = 172a_B = 91 \text{ \AA}$  となり、格子定数  $5.65 \text{ \AA}$  に比して十分に大きく有効質量近似が良く、 $Ry^* = 5.07 \times 10^{-4} Ry = 5.57 \times 10^3 \text{ m}^{-1}$  より、 $1s$  状態の束縛エネルギーは、 $6.9 \text{ meV}$  と大変小さくなる。

Semiconductor	Calculated binding energy (meV)	Experimental binding energy (meV)
GaAs	5.72	Si <sub>Ga</sub> (5.84); Ge <sub>Ga</sub> (5.88)
		S <sub>As</sub> (5.87);
InP	7.14	7.14
InSb	0.6	Te <sub>Sb</sub> (0.6)
CdTe	11.6	In <sub>Cd</sub> (14); Al <sub>Cd</sub> (14)
		Al <sub>Zn</sub> (26.3); Ga <sub>Zn</sub> (27.9)
ZnSe	25.7	F <sub>Se</sub> (29.3); Cl <sub>Se</sub> (26.9)

表 3.1 水素原子的不純物に対する有効質量近似と実験値

表 3.1 は、このような等方的有効質量のドナーについて、(3.17) が与える値と実験値を比較したもので、満足すべき一致が得られている。

では、Si のように、有効質量に異方性があり、かつ伝導帯の谷が 6 個ある場合はどうだろうか。有効質量近似は、(0,0,1) 方向を向いた谷で考えると、回転楕円体の方程式は

$$E_1(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{k_x^2 + k_y^2}{m_t} + \frac{(k_z - k_0)^2}{m_l} \right] \quad (3.19)$$

であり、これから、有効質量方程式は

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_t} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_l} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r} \right] F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}) \quad (3.20)$$

である。この方程式は、異方的な指数関数を仮定して変分法で近似解を得ることができる。試行関数として、 $a, b$  をパラメーターに取り、

$$F_{1s}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a^2 b}} \exp\left(-\sqrt{\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}}\right) \quad (3.21)$$

として、停留条件から数値解を得ると、 $a = 2.5$  nm,  $b = 1.42$  nm,  $E = 29$  meV が得られる。ところが、実験値は、最も浅い Li で 33 meV, P で 45 meV と大きく違っており、近似が不十分であることを示している。このような場合に、どのような計算が必要か、については、付録 3B をご覧いただきたい。

### 3.3 不純物半導体のキャリア統計

ドーパされる側の半導体を母体、ホスト、などと呼ぶ。ドナーを一様濃度  $N_D$  でドーパした場合を考える。絶対零度では基底状態でドナーからの放出電子はすべてドナー自身に束縛されているが、有限温度では一部伝導帯へ励起されている。その濃度を  $n$ , ドナーに束縛された電子濃度を  $n_D$ , とすると、電気的中性条件より  $n + n_D = N_D$  である。ヘルムホルツ自由エネルギー  $F = U - TS$  は、 $n_D$  個の電子を  $N_D$  の状態に割り振る場合の数  $W$  を考え、 $S = k_B \ln W$  より

$$F = E_D n_D - k_B T \ln \left[ 2^{n_D} \frac{N_D!}{n_D!(N_D - n_D)!} \right].$$

$E_D$  は伝導帯から測定したドナーの束縛準位位置、 $2^{n_D}$  はスピン自由度の縮退によるものである。局在電子間のクーロン反発により、2 個の電子が縮退状態を占めることはないとした。スターリングの近似  $\ln N! \sim N \ln N - N$  を用いると化学ポテンシャル (フェルミ準位) は

$$\mu = E_F = \frac{\partial F}{\partial n_D} = E_D - k_B T \ln \left[ \frac{2(N_D - n_D)}{n_D} \right] \quad (3.22)$$

で与えられるから、

$$n_D = N_D \left[ 1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (3.23)$$

が得られる。指数関数前の係数  $1/2$  はスピン縮退のためについた。同様に、一様なアクセプター濃度  $N_A$  が存在する場合のアクセプターに束縛されている電子濃度  $n_A$  は

$$n_A = N_A \left[ 1 + 2 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (3.24)$$

となって係数は  $1/2$  の代わりに  $2$  となるが、アクセプターを正孔が占有する濃度  $p_A = N_A - n_A$  は  $n_D$  と対称形で係数も  $1/2$  である。

(3.22) より、ドナーだけをドーピングした場合、 $T \rightarrow 0$  で  $E_F$  は  $E_D$  の位置に来る。前節の有効質量近似が成立する浅いドナーの場合、 $E_D$  はバンドギャップ  $E_g$  に比べてずっと小さい。従って (3.23) より、有限温度では真性半導体の場合に比べて電子濃度  $n$  が遙かに大きくなる。このような半導体を **n 型半導体** と呼ぶ。同様に、アクセプターをドーピングした場合、正孔濃度  $p$  が上昇する。これを **p 型半導体** と呼ぶ。ドナー、アクセプターが同時に存在する場合、 $N_D \gg N_A$  であれば電子が優勢で n 型、 $N_D \ll N_A$  なら p 型となる。この場合、n 型であれば、ドナーから供給した電子の一部はアクセプターに捉えられ、ほぼすべてのアクセプターはイオン化する。p 型では逆が生じ、このような状態を「補償されている」と言う。

ドナー、アクセプターが存在する場合でも式 (3.10a), (3.10b) は成立するので、これらを連立させることで  $n$ ,  $p$  と  $E_F$  とを求めることができる。また、 $n$ ,  $p$  が求められた後で、 $E_F$  を得るための便利な近似式として

$$E_F \approx E_C + k_B T \left[ \ln\left(\frac{n}{N_C}\right) + 2^{-3/2} \left(\frac{n}{N_C}\right) \right], \quad (3.25a)$$

$$E_F \approx E_V - k_B T \left[ \ln\left(\frac{p}{N_V}\right) + 2^{-3/2} \left(\frac{p}{N_V}\right) \right] \quad (3.25b)$$

が与えられている。(3.23), (3.24) が成立する領域では、最後の項は省略できる。

補償のある n 型半導体の場合、 $p$ ,  $n_A$  は無視できるので電気的中性条件は

$$n + N_A = N_D - n_D \quad (3.26)$$

となる。式 (3.23) を代入すると、

$$\frac{n + N_A}{N_D - N_A - n} = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) \quad (3.27)$$

となる。式 (3.12) はドーピングがある場合でも ( $E_F$  が移動するだけで) 成立するので上式に辺々かけると、

$$\frac{n(n + N_A)}{N_D - N_A - n} = \frac{1}{2} N_c \exp\left(-\frac{\Delta E_D}{k_B T}\right), \quad \Delta E_D \equiv E_c - E_D \quad (3.28)$$

が得られる。

式 (3.28) で表される  $n$  の温度依存性は、大きく以下の 4 つの領域に分けて考えることができる。

I. 不純物領域 I: 温度が非常に低い領域で、 $n \ll N_A \ll N_D$  の場合、

$$n \approx \frac{N_D N_c}{2 N_A} \exp\left(-\frac{\Delta E_D}{k_B T}\right). \quad (3.29)$$

すなわち、 $\Delta E_D$  を活性化エネルギーとする活性化型でキャリア濃度は減少する。

II. 不純物領域 II: やや温度が上がって  $N_A \ll n \ll N_D$  の場合、

$$n \approx \left(\frac{N_c N_D}{2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\Delta E_D}{2 k_B T}\right). \quad (3.30)$$

すなわち、活性化エネルギーが不純物領域 I の半分になる。

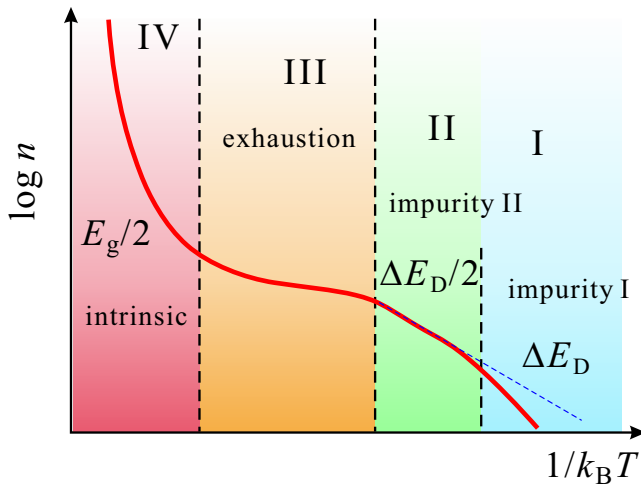


図 3.5 補償のある n 型半導体の電子濃度  $n$  の 4 つの特徴的な温度領域の温度依存性を模式的に示したもの。

III. 出払い領域:  $k_B T > \Delta E_D$  まで温度が上昇すると、式 (3.28) の指数関数部分がほぼ定数 ( $\sim 1$ ) となり、

$$n \approx N_D - N_A \quad (3.31)$$

で、ドナーからは電子がほとんどすべて「出払い」、補償された分を除いて伝導帯にキャリアとして分布する。

IV. 真性領域: 更に高温となり、価電子帯から伝導帯への励起が  $N_D$  に比べて無視できなくなると、キャリア濃度が式 (3.12) で表される真性半導体に漸近する。

図 3.5 にその様子を概略示した。デバイスとして動作させる場合は、III の出払い領域が一般には使用しやすい。

## 付録 2B：ワニエ関数を使った有効質量方程式の導出

2.3.1 節と全く同じであるが、ワニエ関数 (Wannier function) による展開を使う導き方もある。ワニエ関数には様々な特徴があり、今後使用する可能性がある。その際には別途導入する予定であるが、一応付録としてどのようなものなのかざっと見ておくことにしよう。

### 2B.1 ワニエ関数

ワニエ関数は、次のようにブロッホ関数の (逆) フーリエ変換として定義される。

$$w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2B.1)$$

ブロッホ関数も座標表示で与えられているが、これを、座標はパラメーターで、波数  $\mathbf{k}$  の関数と読み替えたものである。  $\mathbf{k}$  空間としては、ブリュアンゾーン内で足し上げていることになる。ブロッホ関数が、周期関数と平面波関数の積で空間的に広がっていたのに対して、ワニエ関数は格子点  $\mathbf{R}_j$  への局在性が強いことは、ブロッホ関数の周期関数部分を定数にすると完全に  $\mathbf{R}_j$  に局在することから理解される。(2B.1) は、ワニエ関数のブロッホ関数による展開になっており、逆にブロッホ関数を

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (2B.2)$$

とワニエ関数で展開できる。

ワニエ関数の便利な点は、直交系であること

$$\langle w_{n'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) | w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle = \delta_{jj'} \delta_{nn'} \quad (2B.3)$$

である。以上の性質の証明はしないが、格子-逆格子の和の関係を用いて容易に行うことができる。その他、(2B.1)のように定義すれば規格化されており、完備系でもある。

## 2B.2 有効質量方程式の導出

問題は、結晶のハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  に対して空間的に緩やかな摂動ポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  が加わった状況

$$[\mathcal{H}_0 + U(\mathbf{r})]\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}) \quad (2B.4)$$

を扱うことであった。有効質量方程式の導出は、ブロッホ関数の場合と全く同様に進めることができる。まず、波動関数をワニエ関数で

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{n,j'} F_n(\mathbf{R}_{j'}) w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) \quad (2B.5)$$

と展開する。 $\mathcal{H}_1$  にはバンド間の行列要素がない (バンド間遷移を引き起こすほど大きくない) とし、以降  $n$  は略す。また、ワニエ関数  $w(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  を簡潔に  $|j\rangle$  と記す。(2B.5) を (2B.4) へ代入し、 $\langle j|$  との内積を取ると、(2B.3) の直交性により

$$\sum_{j'} \langle j | \mathcal{H}_0 | j' \rangle F(\mathbf{R}_{j'}) + \sum_{j'} \langle j | U(\mathbf{r}) | j' \rangle F(\mathbf{R}_{j'}) = EF(\mathbf{R}_j). \quad (2B.6)$$

上で見たように、 $|j\rangle$  は  $\mathbf{R}_j$  への局在性が強い関数であり、 $U(\mathbf{r})$  は格子定数に比べて緩やかに変化するポテンシャルであったから、

$$\sum_{j'} \langle j | U(\mathbf{r}) | j' \rangle \approx \sum_{j'} U(\mathbf{R}_{j'}) \langle j | j' \rangle = U(\mathbf{R}_j) \quad (2B.7)$$

と近似できる。

結晶ハミルトニアンの項は、空間座標原点を取り直すことで次のように書ける。

$$\langle j | \mathcal{H}_0 | j' \rangle = \langle w(\mathbf{r}) | \mathcal{H}_0 | w(\mathbf{r} - (-\mathbf{R}_{j'} + \mathbf{R}_j)) \rangle \equiv h_0(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}). \quad (2B.8)$$

ブロッホ関数  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は、 $\mathcal{H}_0$  の固有関数であり、その固有エネルギーに対して有効質量近似を適用し、

$$\langle \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | \mathcal{H}_0 | \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rangle = E_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (2B.9)$$

とする。 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は、(2B.2) のように展開できるので、

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N} \sum_{j,j'} \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})] \langle j | \mathcal{H}_0 | j' \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j,j'} \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})] h_0(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}) \\ &= \sum_j \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) h_0(\mathbf{R}_j) \end{aligned} \quad (2B.10)$$

となる。これを逆変換すると、

$$h_0(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} E_0(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \quad (2B.11)$$

である。

$F(\mathbf{R}_j)$  は (2B.5) では格子点でしか定義されていないが、 $U(\mathbf{r})$  の変化が緩やかであることから、隣接格子点間の変化は小さく、適当に滑らかにつないで連続変数引数の関数とする。 $\mathbf{a}$  だけ空間推進させる演算子が  $\exp(-\mathbf{a} \cdot \nabla)$  であることから\*3、

$$F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \exp(-\mathbf{R}_j \cdot \nabla) F(\mathbf{r})$$

\*3 これは、例えばテーラー展開により確認できる。

と書けるので,

$$\sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_{j'}) F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) = \sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_{j'}) \exp(-\mathbf{R}_{j'} \cdot \nabla) F(\mathbf{r}). \quad (2B.12)$$

一方, (2B.10) より,

$$E_0(\mathbf{k}) F(\mathbf{r}) = \sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_{j'}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j'}) F(\mathbf{r}). \quad (2B.13)$$

(2B.12), (2B.13) を形式的に捉え, 逆フーリエ変換することを考えると,  $\mathbf{k} \rightarrow -\nabla$  として右辺が一致することから,

$$\sum_{j'} h_0(\mathbf{R}_{j'}) F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j'}) = E_0(-i\nabla) F(\mathbf{r}) \quad (2B.14)$$

と書ける.

以上の結果すべてを (2B.6) に書き戻し, また,  $\mathbf{R}_j$  を連続変数  $\mathbf{r}$  で置き換えることで,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}) \quad (2B.15)$$

を得る. ここでは, [1] に出ている方法を紹介した. が, (2B.13)→(2B.14) の詳しい証明は略され,  $\mathbf{R}_j \rightarrow \mathbf{r}$  の件も曖昧に書かれている. [2] に出ているやり方はもっと丁寧だが, 相当な紙幅を取る.  $\mathbf{R}_j \rightarrow \mathbf{r}$  については, 「厳密には変分でやるべきである」と明記されている.

## 付録 3A : 不純物ドーピングの手法

不純物ドーピングのために様々な手法が開発されてきた. その一端を紹介する. ドープする不純物をドーパント, 母材結晶をホストと称する.

### 3A.1 原材料への混入

半導体結晶成長法を紹介したが, 特に材料融液からバルク結晶を成長する方法においては, 原材料中に予め不純物を混入させておくと比較的一様性良くドーピングが行われる可能性がある. 多くの場合, 例えばチョクラルスキー法などにおいても偏析によって結晶成長方向に濃度勾配を生じる. このため, 均一なドーピング濃度を得るために融液坩堝中にドーパントを追加投入するなど様々な成長の工夫が行われる. また, 両性を持っている不純物の場合, 成長条件により補償の多いものを生じる可能性がある.

エピタキシャル薄膜成長においては, ドーパントを制御して成長表面上に照射することで階段的な分布を始め, 非平衡性が高い様々な濃度分布を結晶性を保ったまま作り出すことができる. この変調ドーピング (modulation doping) 法は, 半導体薄膜が半導体工業の中でも極めて重要な地位を占める上で大きな役割を果たしている.

### 3A.2 熱拡散法

ドーパントがホスト表面に高濃度に存在する状態で, ホストを高温に保ち, 熱拡散により内部に混入させる方法. 表面を高濃度にする方法として, ドーパントの蒸気に接触させる, ドーパントの薄膜を予めホスト表面に蒸着しておく, などがある. 上の図は, ドーパントとホストのウェハを石英管中に同時に封入し, 一緒に加熱してドーパントの蒸気が高温のウェハ表面へ流れ込むようにしたものである. 流れを作らず, 封入して全体を炉に入れてしまうこともある. また, ホストの構成元素に蒸気圧が高いものがある場合, この元素の蒸気も混ぜることで表面からの離脱を抑える必要がある.

熱拡散法では, 表面近くが高濃度で内部へ行くほどに低濃度となる. 通常は表面付近にデバイスを形成するのに使用される. 蒸気を当てる際に, ウェハをマスクすることで, ドーピング領域をパターン形成することができるため, 集積回路形成に使用される.



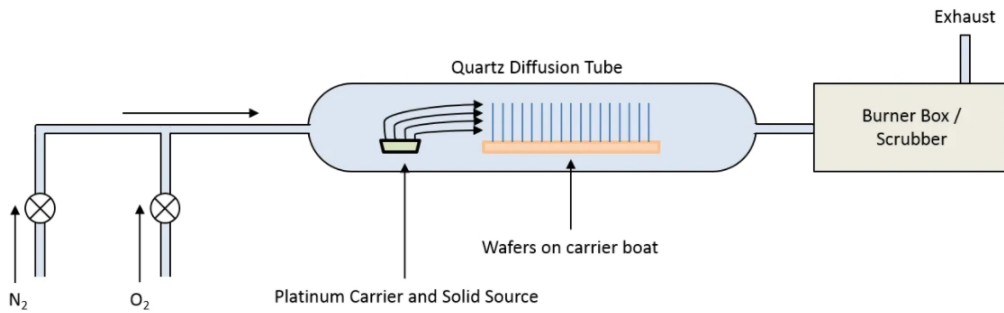


図 3A.1 熱拡散ドーピングの模式図.

### 3A.3 イオン打ち込み法

イオン打ち込み (ion implantation) 法は、ドーピングばかりではなく、切削加工や内部層の酸化などにも使用される。図 3A.2(a) のように、ソースから入ったイオンは磁場によって曲げられ、絞りを通すことで質量分析にかかり、その後レンズで絞られてウェハーに照射、XY 電圧によってスキャンする。

(b) の想像図のように、表面に達したイオンは、高い運動エネルギーを持っているため、結晶内に非平衡的に侵入し、平均運動エネルギーに応じた深さのところまでストップする。イオンの衝突によって通過領域の結晶性は低下し、ドーパントも安定位置に入っているとは限らないため、打ち込み後にアニールをすることが多い。ドーパントの分布は、アニール後は一般にガウス分布等で表される。

ドーパだけでなく、上述の様に酸素イオンを打ち込んでアニールすることで内部に酸化膜を形成する Silicon on Insulator (SOI) 技術の一つとして一時は盛んに使用された。現在では、表面酸化の後に貼り合わせるという一見原始的な方法が主に使用されている。

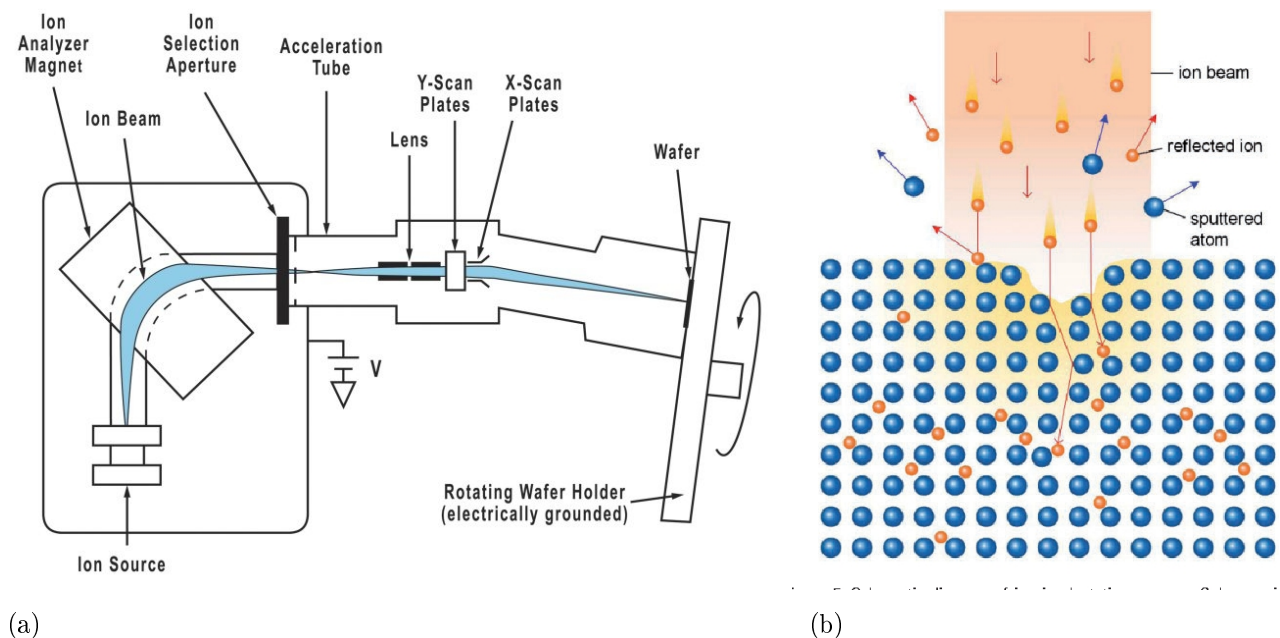
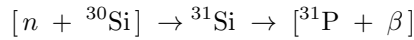


図 3A.2 (a) イオン打ち込みドーピングの模式図。ソースから出てきたイオンを磁場による質量分析にかけ選別したのち絞ったビームをウェハー上にスキャンする。(b) イオン打ち込み法でのホスト表面付近の想像図。

### 3A.4 中性子照射法

現在はほとんど利用がないが、面白いドーピング法として中性子を使ったものがある。これには次のような核反応を用いる。



原子炉中性子を用いると、極めて均一性の良いドーピングを結晶性を損なうことなく行うことができる。が、やはりスループットなどの問題があり、研究レベルにとどまっている。

### 付録 3B : Si 中の浅いドナー状態

Si 中の浅いドナーの波動関数として、6 個の谷を考慮することが考えられる。不純物ポテンシャルも中心付近では一定の大きさと急峻さを持つため、縮退している谷付属の固有関数間の行列要素を持つことが考えられる。そこで、包絡関数  $F(\mathbf{r})$ 、ブロッホ関数  $\psi(\mathbf{r})$  によって与えられるドナー波動関数  $\chi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$  を、各谷について考え、最終的なドナー波動関数として

$$\phi^{(i)}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^6 \alpha_j^{(i)} \chi_j \quad (3B.1)$$

とそれらの線形結合で近似する。  $j$  は谷の指数、  $i$  は下記対称性指数である。谷付属の固有関数でも量子数の異なる固有関数間の混じりはしないとする。

不純物の近傍ではポテンシャルを等方的とする近似が成立しなくなる一方、線形結合を取る際、不純物イオンの周囲の原子が作る結晶場 (crystal field) の空間対称性を考慮しなければならない。その議論には点群を使用するのが便利であり、ここでも使用させてもらう。点群については、また余裕があれば、講義ノートの付録などで最低限の知識を補充するようにしたい [3, 4]。さて、Si の場合、最近接原子は不純物イオンを含む正四面体の頂点にある。その対称性を表す点群は、  $T_d$  という記号で表される。点群の要素 (元) は対称操作を表す「表現」と対応を付けることができ、独立な元は「規約」表現と対応している。  $T_d$  群の規約表現は、  $A_1$ 、  $E$ 、  $T_1$  の 3 つがあるが、それぞれ 1 重、 2 重、 3 重に縮退しているため全部で 6 個の元が存在する。式 (3B.1) の指数  $i$  は、これら 6 個の元に対応する。詳細は略すが、これらの元に対応して、各係数は次の表のようになる。

	$j$							規約表現
	規格化係数	1	2	3	4	5	6	
$\alpha_j^{(1)}$	$1/\sqrt{6}$	1	1	1	1	1	1	$A_1$
$\alpha_j^{(2)}$	$1/2$	1	1	-1	-1	0	0	$E$
$\alpha_j^{(3)}$	$1/2$	1	1	0	0	-1	-1	$E$
$\alpha_j^{(4)}$	$1/\sqrt{2}$	1	-1	0	0	0	0	$T_1$
$\alpha_j^{(5)}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	1	-1	0	0	$T_1$
$\alpha_j^{(6)}$	$1/\sqrt{2}$	0	0	0	0	1	-1	$T_1$

表 3.2 Si 伝導帯の不純物状態を表す 1 次結合係数。

そこで、(3B.1) の固有エネルギー準位 (状態) に対し、谷の波動関数  $\chi_j$  の量子数 (水素原子と同様、主量子数  $n$ 、方位量子数  $l$ 、磁気量子数  $m$ 。ただし、すでに谷の時点で異方性があり、軌道角運動量がある状態の指定は水素原子とは異なる) と、上の表の規約表現を量子数として使用する。  $1s(A_1)$ 、  $1s(E)$  など。表 3.2 より、各谷に付属の波動関数の合成法を見ると、  $A_1$  以外は対向波動関数が逆位相で合成されているため、中心原子核付近の振幅は小さい。  $A_1$  はすべてが同位相で合成され、原子核付近の振幅が大きくなる。このため、  $A_1$  については有効質量近似からは大きく外れ、一般にエネルギーは低くなる。エネルギーの下がり方は原子核の持つ正電荷が大きいほど大きくなる。このエネルギーの分離を谷・軌道分裂 (valley-orbit splitting) と呼ぶ。

有効質量近似	Li	P	As	Sb	Bi
32	32.5	45	53.7	43	70.6

表 3.3 Si 中のドナー束縛エネルギー (meV)

表 3.3 のように、そのような傾向が実際現れていることがわかる。この谷・軌道分裂については、Pantelides, Sah が、実験を良く再現する理論計算を行っている [5]。

## 参考文献

- [1] 浜口智尋「半導体物理」(朝倉書店, 2001).
- [2] P. Yu and M. Cardona, "Fundamentals of Semiconductors", (4th ed. Springer, 2010).
- [3] 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝「応用群論」(裳華房, 1980).
- [4] M. Tinkham, "Group Theory and Quantum Mechanics" (Dover, 2003).
- [5] S. Pantelides and C. T. Sah, Phys. Rev. B 10, 621-637 (1974); *ibid.* 638-658 (1974).

# 講義ノート 半導体 第4回

2021年5月7日 勝本信吾 東京大学物性研究所(理学系研究科物理学専攻)

## 3.3.1 縮退半導体

以上は、ドーピングした不純物状態が半導体中で孤立しているとして考えてきた。図 3.2 に見るように、低温側でキャリアがなくなってしまうため、最低温度では電気伝導がなくなり絶縁体になる。不純物濃度を増やして、不純物の間隔が縮まってくると不純物の局在波動関数間に重なりが生じ、トンネルによる不純物間の移動が可能になる。このような移動経路のネットワークが全結晶内に広がるまで不純物濃度を増やすと、ある濃度で電気伝導が金属的(絶対零度でも有限の電気伝導度を持つ)に転移する。この金属絶縁体転移(metal-insulator transition)の問題は、凝縮系物理学の中でも最重要問題の一つとされ、長い間に多くの研究努力がなされてきた。この問題は、このような不純物ドーピングに限らず、固体物理の様々な現象に様々な形で顔を出す。非常に多くの知識が積み上げられている一方、基本的な解決には至っていないと考えられる。非常に多数の書物が書かれており、ごく一部、私が読んだことのあるもののみ挙げておく([1]~[5])。

上では、フェルミ準位の実空間での波動関数の広がりによって金属絶縁体転移を眺めた(それが本来の定義)が、これをエネルギー空間で見ると、隣接する不純物波動関数が空間的にオーバーラップするようになると、波動関数の混じりによってエネルギー準位は広がり、一定濃度を境にバンドが形成される。これを不純物バンドと呼ぶ。不純物バンドが形成されてエネルギー準位が連続的になっても必ずしも波動関数が母体全体に広がるわけではなく、ポテンシャル乱れに起因するアンダーソン局在によって波動関数は空間的に局在している。

多くの母体結晶とドーピングする不純物(ドーパント)において、 $n_c$  と有効ボーア半径  $a_B^*$  との間には図 3.6 に示したように、

$$n_c^{1/3} a_B^* = 0.26 \quad (3.32)$$

という関係が成立する。この式(3.32)自身はキャリア束縛ポテンシャルの遮蔽によって束縛状態ができなくなる条件として Mott によって導入された(Mott の境界、Mott's criterion)が、現実の不純物半導体の条件下ではこの議論には無理があるとされている。しかし、何故か図 3.6 のように実験には良く合うことから、異なった方向からの理

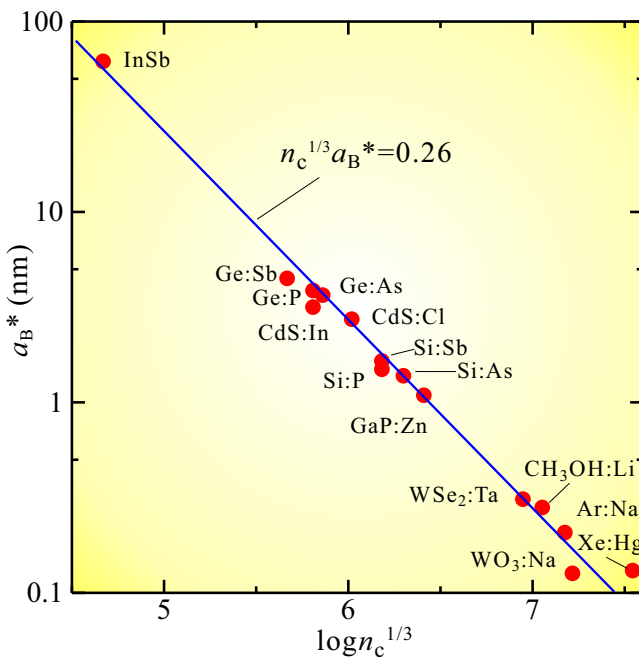


図 3.6 様々な母体半導体とドーパント(コロン後に記した元素記号)に対する有効ボーア半径と金属絶縁体転移の臨界濃度の関係を対数プロットで示した。 $n_c$  の単位は  $\text{cm}^{-3}$ 。直線は式(3.32)の関係。データは、P. Edwards and M. Sienko, Phys. Rev. B **17**, 2575 (1978) より。

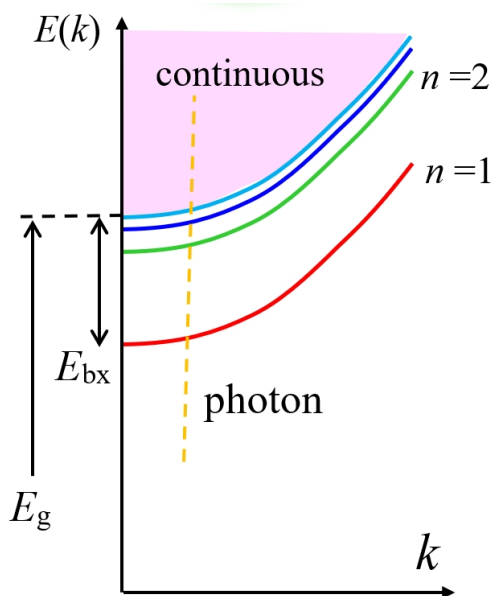
論的説明も試みられている。なお、本来の Mott の議論が成立するかもしれない電子正孔液滴状態については、励起子の BEC とも絡んで最近再び理論的な考察が行われている。

この問題の難しさは、何と言ってもバンド理論の非常な簡単化の源である散乱のコヒーレンスが、乱雑さのために使用できない、あるいは乱雑さそのものを相手にしなければならない点にある。この問題を扱うために様々な概念が開発され、ランダム系に関する人類の知識は大いに拡大した。これらは例えば、有機半導体を扱う際などにも広く使用されている。なお、金属絶縁体転移は規則系の問題としても、特に強相関係の場合には極めて大きく困難な課題である。四半世紀前のものであるが、レビュー論文を挙げておく [6]。本講義では、これ以上この問題には踏み込まない。

縮退半導体を使用する半導体回路素子も存在し、代表はエサキダイオード (トンネルダイオード) である。発明当時は高速演算素子として注目され、高エネルギー実験のイベントカウンターなどにも使用された。最近では、多接合太陽電池の接合間インターフェイスにも使用されている。太陽電池そのものも、表層側には高濃度ドープの縮退半導体を使用していることが多い。また、高周波素子のインパット (IMPATT) ダイオード、*p-i-n* 型のフォトダイオードなどでも高濃度ドープを多く使用する。

### 3.3.2 励起子

キャリア統計としてはやや「番外」的なテーマであるが、有効質量近似の応用例として励起子を導入しておこう。励起子は、古くから光物性の中心テーマであったが [7]、現在も励起子ポラリトンの BEC など、更に幅広い研究が進められている。固体中で、正負反対符号の電荷を持つ状態がクーロン力によって束縛状態を作っている状態を**励起子 (exciton)**と呼ぶ。「電荷を持つ状態」が、数格子以上に広がっている電子、正孔状態の場合、ワニエ型 (Wannier type) 励起子、格子点を占める分子的状態の内部に正負の電荷偏在状態が生じているような励起子をフレンケル型 (Frenkel type) 励起子という。後者は特に格子点の独立性の高い有機物半導体などによく見られる。ここでは、ワニエ型励起子について見ておく。



伝導帯に励起された電子、価電子帯に励起された正孔の励起子を考える。これらは数格子以上の結晶空間に広がり、有効質量近似の適用が可能である。電子、正孔ともに自由な状態をベースに考えると、これらが束縛状態を作ったとしても、重心運動の自由度が残り、これによる「波数」、運動エネルギーが存在する。この波数は、正孔を考えた際に波数の保存を考えたことから、全体の波数保存から導かれるはずである。励起子の「質量」に相当するものも、運動エネルギーから単純に電子正孔の有効質量の和を取り  $m_e + m_h$  とできるはずである。「はず」というのは、運動方程式を考える際、最も具体的な力として考えられるクーロン力は電子正孔に逆向きに働くことを始め、有効質量の異なる2つの「粒子」に同じ加速度がかかることが状況として考えにくいことがある。

とにかく、有効質量近似が成立すると考え、電子-正孔対が存在しない状況からの励起子の生成エネルギーを考えると、励起にエネルギーギャップ分のエネルギーが必要であることも考慮し、

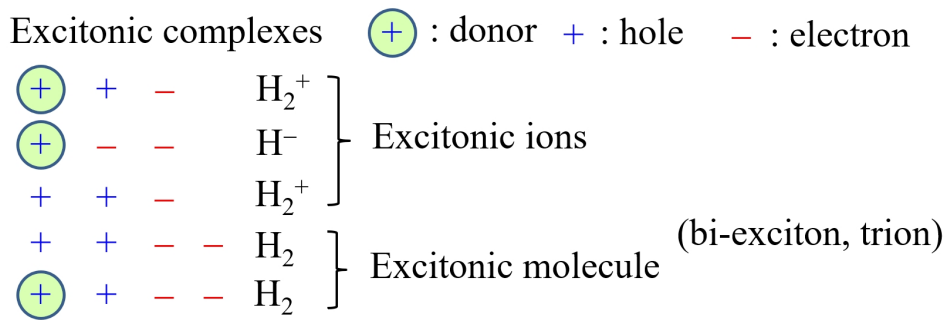
$$E_{\text{ex}}^{(n)}(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{e^4 m_r^*}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.33)$$

が生成エネルギーとなる。第3項は電子-正孔の束縛エネルギーで、等方的で水素原子的であることを仮定した。 $m_r^*$  は換算有効質量

$$\frac{1}{m_r^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad (3.34)$$

である。第2項が並進運動エネルギーである。式(3.33)を模式的に描くと、前ページの図のようになる。

このような束縛状態が、実際に結晶中に生成されることは、例えば光吸収を調べることで確認できる。これについては次章で触れる。ただし、例えば光吸収実験では、式(3.33)のように解釈可能なもの以外に多くの類似の励起の吸収スペクトルが得られる。これらは、自由な単独の励起子に対して、励起子が不純物ポテンシャルにトラップされた束縛励起子や、2つ以上の励起子が結合した励起子分子などの複雑な励起状態によるものと考えられている。下に不純物が関与しない場合、あるいはドナーが1個だけ関与し、ドナーも含めた「電荷」の数が3~4個の場合(水素分子、あるいはその荷電状態に相当)について、可能な場合をリストアップした。このような励起状態を複合励起子(exciton complex)と呼ぶ。



本章では、伝導帯に励起された電子、価電子帯に励起された正孔、そしてこれらの束縛状態である励起子を導入した。いずれも、本来多電子の状態であるが、あたかもこのような粒子が結晶という全くの真空とは異なる空間内で自由に運動していると考えて取り扱うことができる。このような「粒子のように見え、扱える多体状態」のことを準粒子(quasi-particle)と呼ぶ。



## 第4章 半導体の光応答(バルク)

「半導体」と呼ばれる物質の多くは電磁波の中でも「光」と呼ばれるエネルギー帯付近にバンドギャップを持つものが多く、特徴的な光応答をする。半導体物理でも電気伝導と並んで重要なテーマである。また、発光・受光のいずれの素子にも多くの場合半導体が使用されている。本章では光吸収や発光など、半導体バルクの基本的な性質について述べる。

### 4.1 二準位系の光応答

半導体バルクの光応答を考えるには、これまで見てきた価電子帯、伝導帯の広がった電子状態間の遷移と光との関係を調べるべきであるが、その前に、より簡単化された二準位の系の応答を考えよう。ここでこのような基礎事項にページを割くのは、特に電磁場のゼロ点振動や光子の状態について確認をしておきたいからであり、この辺りは良くわかっているので飛ばしたい、と言う方は、4.1.3節より読んでいただいで問題ない。更に二準位系も良くご存知の方は、次節4.2節まで飛ばしても良い。

#### 4.1.1 電磁場の量子化

光子の状態を考えるため、電磁場の量子化についてごく簡単に見ておく [8]。その基本は、量子力学を学び始めてすぐに調べた1次元の調和振動子である。その問題は、Schrödinger 方程式

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_h^2 x^2}{2} \right] \phi = E\phi \quad (4.1)$$

で表される。左辺括弧内第2項が調和振動子の特徴的ポテンシャルを表している。無次元変数  $q$  を

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_h m}} q \quad (4.2)$$

として導入すると、(4.1) は

$$\frac{\hbar\omega_h}{2} \left( -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right) \phi = E\phi \quad (4.3)$$

となる。これは、下降および上昇演算子

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dq} + q \right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{d}{dq} + q \right), \quad [a, a^\dagger] = 1, \quad (\text{others}) = 0 \quad (4.4)$$

を導入することで(最後の交換関係は定義より直ちに導かれる), 更に,

$$\hbar\omega_h \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \phi (\equiv \hat{H}\phi) = E\phi \quad (4.5)$$

と変形することができる。

$$\hat{n} \equiv a^\dagger a \quad (4.6)$$

と定義すると  $\hat{n}$  と  $\hat{H}$  は交換する ( $[\hat{n}, \hat{H}] = [\hat{H}, \hat{n}] = 0$ ) ので、共通する固有関数(同時固有関数)が存在し得る。今、 $|w\rangle$  が、 $\hat{H}$  の固有値  $\epsilon$ ,  $\hat{n}$  の固有値  $\gamma$  の同時固有関数だったとする。(4.4)の交換関係より

$$\hat{H}(a^\dagger|w\rangle) = (\gamma + \hbar\omega_h)(a^\dagger|w\rangle), \quad \hat{H}(a|w\rangle) = (\gamma - \hbar\omega_h)(a|w\rangle), \quad (4.7)$$

すなわち,  $a^\dagger|w\rangle, a|w\rangle$  もこのような同時固有関数であり, そのエネルギー固有値は,  $\hbar\omega_h$  だけそれぞれ増加, 減少している. このような同時固有関数の中で最も低いエネルギー固有値  $\epsilon_0$  を持つものを  $|0\rangle$  と書く. 上式より  $\epsilon_0 - \hbar\omega_h$  の固有値を持つ固有関数は存在しないので,  $a|0\rangle = 0$  でなければならない. これより更に,  $\epsilon_0 = \hbar\omega_h/2$  も結論される.  $\epsilon_0$  より高いエネルギー固有値は,  $|0\rangle$  に  $a^\dagger$  を次々と作用されることで得られ,

$$E_n = \hbar\omega_h \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (4.8)$$

となる. また, 交換関係より,  $a^n(a^\dagger)^n$  がこのような同時固有関数に対して  $n!$  を乗ずる作用をすることから,  $|0\rangle$  が規格化されているとすると,  $E_n$  に対応する規格化固有関数は,

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (4.9)$$

と書くことができる. また,  $a|0\rangle = 0$ , すなわち,  $|0\rangle$  を  $\varphi_0(q)$  と書くと,

$$\frac{d\varphi_0}{dq} + q^2\varphi_0 = 0 \quad \therefore \varphi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{q^2}{2}\right) \quad (4.10)$$

が得られる.

以上を思い出したところで, 電磁場を取り扱う. 出発点は電磁場が調和振動子の集団として記述できる, ということである\*1[9, 10]. Coulomb ゲージ ( $\text{div}\mathbf{A} = \vec{0}$ ) を取り, ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  を平面波の重ね合わせで

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}, \lambda} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}\lambda}t)} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}\lambda}t)}), \\ (\omega_{\mathbf{k}} &= c|\mathbf{k}|, \quad \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^* = \mathbf{A}_{-\mathbf{k}\lambda}) \end{aligned} \quad (4.11)$$

と展開する.  $\lambda$  は偏光の自由度で, Coulomb ゲージより横波であることから 2 次元である. Maxwell 方程式  $\mathbf{E} = \partial\mathbf{A}/\partial t$ ,  $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$  より, 体積  $V$  内の電磁場のエネルギー  $\mathcal{E}$  は  $\exp(\pm 2i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$  の項が空間積分により落ち,

$$\mathcal{E} = \int_V [\epsilon_0 \mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + \mu_0^{-1} \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t)] \frac{d^3\mathbf{r}}{2} = 2\epsilon_0 V \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \omega_{\mathbf{k}\lambda} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^*) \quad (4.12)$$

と書ける. ここで, 変数 (ベクトル)  $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}\lambda}$ ,  $\mathbf{P}_{\mathbf{k}\lambda}$  を

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k}\lambda} = \sqrt{\epsilon_0 V} (\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}\lambda}t} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}\lambda}t}), \quad \mathbf{P}_{\mathbf{k}\lambda} = d\mathbf{Q}_{\mathbf{k}\lambda}/dt = i\omega_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\epsilon_0 V} (-\mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}\lambda}t} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}\lambda}t}) \quad (4.13)$$

と導入すると,

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} (\mathbf{P}_{\mathbf{k}\lambda}^2 + \omega_{\mathbf{k}\lambda}^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\lambda}^2) \quad (4.14)$$

と書け, 電磁場が  $\mathbf{Q}$  空間の調和振動子の和で書かれることがわかる. そこで,  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Q}$  を演算子とし, 次の交換関係を要請することで電磁場を量子化する.

$$[\hat{Q}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (\text{others}) = 0. \quad (4.15)$$

ハミルトニアンは, 次のようになり, (4.3) と同形である.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} (\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}^2). \quad (4.16)$$

1 次元調和振動子の上昇/下降演算子に対応する, **生成消滅演算子** (creation-annihilation operators) を

$$a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} (\omega_{\mathbf{k}} \hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} - i\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}), \quad a_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} (\omega_{\mathbf{k}} \hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} + i\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}) \quad (4.17)$$

\*1 文献 [10] によると, これをジーンズの定理と呼ぶそうであり, 実際 [9] にはそれと等価なことが書かれている. これはレイリー・ジーンズの法則につながる議論である. ただし, 「ジーンズの定理」というと, 天文学で重力相互作用する多体系の分布に関するものがあり有名で, この電磁場の方をこう呼ぶ例は他ではほとんど見かけない.



のように導入する。交換関係は、(4.15) より

$$[a_{\mathbf{k}\lambda}, a_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}, \quad (\text{others}) = 0 \quad (4.18)$$

のようになる。以上を使って、(4.16) のハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left( a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.19)$$

と書くことができる。また、ベクトルポテンシャル等も演算子を使って

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\mathbf{k}}V}} e_{\mathbf{k}\lambda} \left[ a_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} + a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right] \quad (4.20)$$

のように書くことができる。

## 4.1.2 光子の状態

式(4.6)に対応して、

$$\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} \equiv a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} \quad (4.21)$$

が、モード  $(\mathbf{k}, \lambda)$  について基底状態  $|0\rangle_{\mathbf{k}\lambda}$  からの励起のレベルを表す演算子になっている。励起1レベルのエネルギーが  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$  であること、光量子に関する Einstein の関係式で1光子あたりのエネルギーが  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$  であることから、(4.21) の  $\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}$  をモード  $(\mathbf{k}, \lambda)$  の光子数演算子 (photon number operator) と考えることができる。

(4.9) に対応して、モード  $(\mathbf{k}, \lambda)$  の光子数が  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  であるような (4.19) の固有関数が存在する。  $\{\dots_\alpha\}$  という記号で、 $\alpha$  という指数に対応する要素の集合を表すことにすると、このような状態は  $|\{n_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle$  と表される。(4.9) より、

数状態

$$|\{n_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle = \left[ \prod_{\mathbf{k}\lambda} \frac{(a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger)^{n_{\mathbf{k}\lambda}}}{\sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}!}} \right] |0\rangle \quad (4.22)$$

と書くことができるこのような状態を数状態 (number state) と呼ぶ。

数状態のエネルギー期待値は

$$\langle \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} | \hat{H} | \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left( n_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.23)$$

である。ただし、多モードの状態については、異なる固有値を持つ固有状態の重ね合わせであるため、全体として固有状態ではなくなっている。一方、電場の期待値を取ると、(4.20) より、

$$\langle \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} | \hat{\mathbf{E}} | \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle = -\langle \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} | (\partial \hat{\mathbf{A}} / \partial t) | \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle = 0 \quad (4.24)$$

となり、電場の期待値はゼロとなる。これは時間平均でゼロになった、というわけではない、どのような短時間の測定であっても、多数回の測定平均はゼロになる。これは、磁場も同様である。一方、電場のゆらぎの方は

$$\langle \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} | \hat{\mathbf{E}}^2 | \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{\epsilon_0 V} \left( n_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\epsilon_0 V} \langle \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} | H | \{n_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle \quad (4.25)$$

となり、ゼロではない。更に、光子数がゼロであっても各モードに、 $\hbar\omega_{\mathbf{k}}/(2\epsilon_0 V)$  だけのゆらぎが残っている。これを電磁場の**ゼロ点振動** (zero-point motion) という。これはもちろん、(4.23) のエネルギーの表式での 1/2 の定数に対応している。後述の光子の自然放出には極めて重要な性質であり、自由な電磁場について紙数を割いているのも主にこれを明記するためである。

以上の数状態の性質は、光子数が決まったエネルギー固有状態において、複数光子の振動電磁場をコヒーレントに重ね合わせて古典的な描像にあるような振動電磁場を得ることが困難であることを示している。

これに対して、数状態を重ね合わせることで、有限な電磁場期待値を持つ状態を作り出すことができる。例えば、単一モードに対する数状態 (モード指数を略して  $|n\rangle$  のように書く) を複素数  $\alpha$  をパラメーターとするガウス分布の重みで足し上げると、次のようになる。

コヒーレント状態

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \exp(\alpha a^\dagger) |0\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (4.26)$$

(4.26) はコヒーレント状態 (coherent state) と呼ばれる。  $\alpha$  はコヒーレント状態を指定する複素数である。消滅演算子を作用させると、  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  より、

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (4.27)$$

であり、コヒーレント状態はこの  $\alpha$  を固有値とする消滅演算子の固有状態である。コヒーレント状態が、無限の数状態の重ね合わせであり、その中の単光子に対して量子力学的な「測定」を行っても全体の状態が収縮して変化することがないと解釈することができる。この状態に対して光子数測定を行ったとすると、  $n$  個の光子を検出する確率は、

$$P(n) = \langle n|\alpha\rangle = \frac{e^{-|\alpha|^2} |\alpha|^{2n}}{n!} \quad (4.28)$$

で、ポアソン分布となる。この複素数  $\alpha$  を  $\alpha = |\alpha|e^{i\phi}$  と振幅と位相に分けて書き、電場、磁場の期待値を取ると、

$$\langle \alpha | \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) | \alpha \rangle = -\sqrt{\frac{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{\epsilon_0 V}} |\alpha| e_{\mathbf{k}\lambda} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi), \quad (4.29a)$$

$$\langle \alpha | \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) | \alpha \rangle = -\sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega_{\mathbf{k}} V}} |\alpha| \mathbf{k} \times e_{\mathbf{k}\lambda} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t + \phi) \quad (4.29b)$$

となって、古典的な振動電磁場が実現していることがわかる。

### 4.1.3 二準位系の代表的光学プロセス

2つの量子状態から成る二準位系 (two-level system) は、量子情報では量子ビット (qubit) と呼ばれ、最も基本的な量子系である。図 4.1 のように、  $(|a\rangle, |b\rangle)$  というエネルギー固有値 ( $E_a, E_b$ ) を持つ 2 状態から成る二準位系を考える。基底としてこれらの固有状態

$$\mathcal{H}_0|a\rangle = E_a|a\rangle, \quad \mathcal{H}_0|b\rangle = E_b|b\rangle \quad (4.30)$$

を使って、一般的な 2 準位系の状態を

$$\psi(t) = c_a(t)e^{-E_a t/\hbar}|a\rangle + c_b(t)e^{-E_b t/\hbar}|b\rangle \quad (4.31)$$

と表すことができる。

図 4.1 は、この二準位系と電磁場との相互作用の代表的な 3 つの過程について示した。(a) は光子のエネルギーを電子が吸収して  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  の遷移を起こす、光吸収 (optical absorption)、(b) は、  $|b\rangle$  に励起された電子が  $|b\rangle \rightarrow |a\rangle$

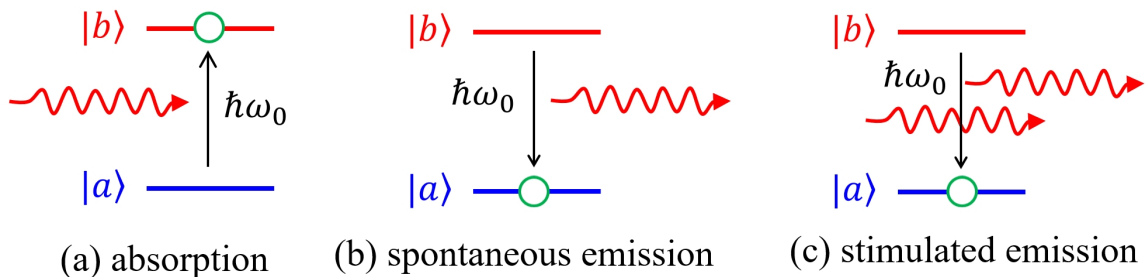


図 4.1 二準位系の光応答における 3 つの基本的プロセス。(a) 光吸収、(b) 光子自然放出、(c) 光子誘導放出

の遷移を起こして、電磁場へ光子を放出する自然放出 (spontaneous emission), (c) は、二準位のエネルギー差に相当する光子が存在する状態で、 $|b\rangle$  に励起された電子が  $|b\rangle \rightarrow |a\rangle$  の遷移を起こし、飛来した光子とコヒーレントな光子を放出する誘導放出 (stimulated emission) である。電磁場を含む系のハミルトニアンをベクトルポテンシャルを  $\mathbf{A}$  として非相対論近似で

$$\mathcal{H}_{\text{op}} = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (4.32)$$

と書く。 $\mathbf{A}^2$  の項は小さいとして落とし、摂動ハミルトニアン  $\mathcal{H}'$  を

$$\mathcal{H}_{\text{op}} \approx \mathcal{H}_0 + \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \equiv \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' \quad (4.33)$$

と定義する。また、簡単のため摂動ハミルトニアンに対角項はない

$$\langle a | \mathcal{H}' | a \rangle = \langle b | \mathcal{H}' | b \rangle = 0 \quad (4.34)$$

とする。

平面波的な電磁場がこの二準位系に印可されている場合を考え、Coulomb ゲージで

$$\mathbf{A} = A_0 \mathbf{e}_p \cos(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (4.35)$$

と書くと、これは、前節で、(4.29) で見たように、コヒーレント状態の光子が二準位系に飛来している状況を考えていることになる。摂動ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}' = \frac{eA_0}{m} \mathbf{e}_p \cdot \hat{\mathbf{p}} \cos(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (4.36)$$

となる。この近似が、双極子近似 (dipole approximation) と呼ばれるものであることを見ておこう。 $\mathcal{H}'$  による  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  の遷移要素  $\langle b | \mathcal{H}' | a \rangle$  は  $\mathbf{A} = A \mathbf{e}_p$  と書いて

$$\frac{eA}{m} \mathbf{e}_p \cdot \langle b | \hat{\mathbf{p}} | a \rangle = \frac{eA}{m} \langle b | \mathbf{e}_p \cdot \frac{m}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \mathcal{H}_0] | a \rangle = \frac{iA}{\hbar} (E_b - E_a) \mathbf{e}_p \cdot \langle b | (-e)\hat{\mathbf{r}} | a \rangle \quad (4.37)$$

となり、最後の項が、電気双極子モーメント演算子による遷移行列要素であることから、このような摂動ハミルトニアンによる遷移を双極子遷移と呼んでいる。

(4.30) を時間発展を記述する Schrödinger 方程式  $i\hbar \partial \psi / \partial t = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}') \psi$  へ代入すると、

$$i\hbar \left[ \frac{dc_a}{dt} |a\rangle e^{-iE_a t/\hbar} + \frac{dc_b}{dt} |b\rangle e^{-iE_b t/\hbar} \right] = c_a \mathcal{H}' |a\rangle e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \mathcal{H}' |b\rangle e^{-iE_b t/\hbar} \quad (4.38)$$

である。左から、 $\langle a |$  および  $\langle b |$  を作用させることで次の  $(c_a, c_b)$  に対する連立微分方程式になる。

$$\begin{cases} \frac{dc_a}{dt} = -\frac{i}{\hbar} c_b \langle a | \mathcal{H}' | b \rangle e^{-i\omega_0 t}, \\ \frac{dc_b}{dt} = -\frac{i}{\hbar} c_a \langle b | \mathcal{H}' | a \rangle e^{i\omega_0 t}, \end{cases} \quad \omega_0 \equiv \frac{E_b - E_a}{\hbar}. \quad (4.39)$$

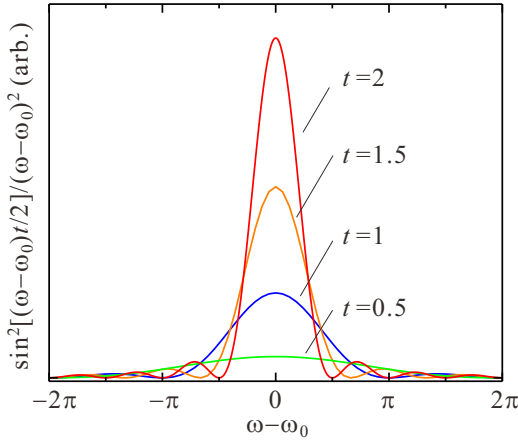
#### 4.1.4 光吸収・放出

まず (a) の光吸収過程を考える。初期条件として基底状態に電子がいる  $c_a(0) = 1$ ,  $c_b(0) = 0$  を考え、最初の近似解として最も粗い  $c_a^{(1)}(t) = 1$  を出発点として逐次代入することで近似解を得ることができる。

$$c_a^{(1)}(t) = 1, \quad c_b^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle b | \mathcal{H}' | a \rangle (t') e^{i\omega_0 t'} dt', \quad (4.40a)$$

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \langle a | \mathcal{H}' | b \rangle (t') e^{-i\omega_0 t'} \left[ \int_0^{t'} dt'' \langle b | \mathcal{H}' | a \rangle (t'') e^{i\omega_0 t''} \right]. \quad (4.40b)$$

$\langle b | \mathcal{H}' | a \rangle (t)$  は、 $\langle b | \mathcal{H}' | a \rangle$  が時間  $t$  の関数であることを明記したものである。



$\langle b | \mathcal{H}' | a \rangle(t)$  を考える上で、摂動ハミルトニアン (4.36) より光子の波数  $k_p$  の項を落とす。これは、以下のような考察による。電子波数が  $0 \rightarrow k_e$  と変化して運動エネルギーが  $\hbar^2 k_e^2 / 2m_0$  増加する過程を考え、このエネルギー増加と光子のエネルギー  $\hbar\omega_p$  が等しかったとすると、これを与える光子波数を  $k_p$  として、 $k_e = \sqrt{2k_{ec}k_p}$  である。ここで、 $k_{ec} = m_0c/\hbar$  で、これは、電子静止質量  $m_0$  と光速  $c$  の積で、非常に大きな運動量を表しており、 $k_e \gg k_p$  となり、光子の運動量の寄与は無視して良い事を示している。

そこで、

$$V_{ba} \equiv \langle b | \frac{eA_0}{m} \mathbf{e}_p \cdot \hat{\mathbf{p}} | a \rangle \quad (4.41)$$

とすると、(4.40a) を使って

$$\begin{aligned} c_b(t) &\simeq -\frac{i}{\hbar} V_{ba} \int_0^t dt' \cos \omega t' e^{i\omega_0 t'} = -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \left[ \frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right] \\ &\simeq -i \frac{V_{ba}}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} e^{i(\omega_0 - \omega)t/2} \end{aligned} \quad (4.42)$$

であるから、時刻  $t = 0$  から振動電磁場を加えて、時刻  $t$  に  $|a\rangle$  から  $|b\rangle$  へ励起されている確率は、

$$P_b(t) = |c_b(t)|^2 \simeq \frac{|V_{ba}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2 (t/2)^2} t \quad (4.43)$$

となる。最後の  $t/2$  の前についている因子  $\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]/(\omega_0 - \omega)^2 (t/2)^2$  が、 $t \rightarrow \infty$  で  $\pi\delta(\omega - \omega_0)$  になることは良く知られており、実際、被積分部分をプロットしてみると、上の図のように、 $t$  の増加に伴い、 $\omega - \omega_0 = 0$  に高く鋭いピークが成長する様子がわかる。この因子はすなわち光吸収に伴うエネルギー保存を表している。

以上の光吸収過程に対して、初期条件を  $c_b(0) = 1$ ,  $c_a(0) = 0$  すなわち  $|b\rangle$  に励起された状態を出発点に取り、 $\omega$  の光子が飛来している状況を考えて、光吸収とは全く逆の過程で  $|b\rangle \rightarrow |a\rangle$  の遷移が生じ、電磁場に光子が放出されることがわかる。またこの放出光子は、すでに存在しているコヒーレント状態にコヒーレントな光子を付け加える形で行われる [11]。これが、(c) の誘導放出過程である。

では、光子が存在しない電磁場の環境での過程である、(b) の自然放出はどう考えれば良いか？ 4.1.1 節で見たように、光子数がゼロの真空状態でも、各モードに対して電磁場の量子揺らぎが存在する。自然放出では、この電磁場のゼロ点揺らぎによって「誘導」され、光子が放出される。多くの電子機器からの半導体の (レーザー光以外の) 発光は、この自然放出によるものであり、そういう意味では、ディスプレイなどに向かっている時、我々はまさにゼロ点量子揺らぎによる光を目にしていることになる。

#### 4.1.5 ラビ振動

摂動項  $V_{ba} \cos(\omega t)$  は、 $\cos$  部分を  $(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})/2$  と複素平面上で  $\pm\omega$  の角振動数で回転する項にわけることができる。このうち、前節でも見たように、状態遷移に関係するのは、 $\omega \sim \omega_0$  の成分であり、 $-\omega$  で回転している項は、 $\omega_0$  とは大きく周波数が違うため無視できる。すなわち、

$$\langle a | \mathcal{H}' | b \rangle = \frac{V_{ab}}{2} e^{i\omega t} \quad (4.44)$$

と近似する。このような近似を回転波近似 (rotation wave approximation) と呼ぶ。この場合は、連立微分方程式は、

$$\begin{cases} \frac{dc_a}{dt} = -\frac{i}{2\hbar} c_b V_{ab} e^{-i(\omega_0 - \omega)t}, \\ \frac{dc_b}{dt} = -\frac{i}{2\hbar} c_a V_{ba} e^{i(\omega_0 - \omega)t}. \end{cases} \quad (4.45)$$

となり、これは、

$$\frac{d^2 c_b}{dt^2} + i(\omega - \omega_0) \frac{dc_a}{dt} + \frac{|V_{ab}|^2}{(2\hbar)^2} = 0 \quad (4.46)$$

という単変数微分方程式にできるため、容易に解くことができ、解として

$$c_b(t) = c_+ e^{i\lambda_+ t} + c_- e^{i\lambda_- t}, \quad \lambda_{\pm} \equiv \frac{1}{2}(\delta \pm \sqrt{\delta^2 + |V_{ab}|^2/\hbar^2}), \quad \delta \equiv \omega_0 - \omega \quad (4.47)$$

が得られる。初期条件  $|c_a(0)| = 1$ ,  $c_b(0) = 0$  を与えると、

$$\begin{cases} c_b(t) = \frac{i|V_{ab}|}{\omega_R \hbar} e^{i\delta t/2} \sin(\omega_R t/2), \\ c_a(t) = e^{i\delta t/2} \left[ \cos\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) - i \frac{\delta}{\omega_R} \sin\left(\frac{\omega_R t}{2}\right) \right] \end{cases} \quad (4.48a)$$

$$(4.48b)$$

が得られる。ただし、

$$\omega_R \equiv \sqrt{\delta^2 + |V_{ab}|^2/\hbar^2} \quad (4.49)$$

である。

このように、二準位のエネルギー差に近い電磁波の照射によって二準位間に生じる振動現象をラビ振動 (Rabi oscillation), (4.49) はラビ振動数 (Rabi frequency) と呼ばれる。エネルギー差に同調させた場合、 $\delta = 0$  としてみればわかるように、ラビ振動の周波数は照射電磁波の振幅に比例する。固体中の様々な情報を得るための各種共鳴現象や、量子情報操作など多くの場面で広く使用されている現象である。

#### 4.1.6 振動子強度, 選択則

本章冒頭で考えた 1 次元調和振動子では、(4.2), (4.4) より

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_h}} (a + a^\dagger) \quad (4.50)$$

と書くことができる。これより、今、 $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$  の遷移に相当する (4.37) の双極子遷移確率要素部分は

$$\langle 1|(-e)\hat{x}|0\rangle = -e\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_h}} \equiv \mu_{10} \quad (4.51)$$

である。 $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  の双極子遷移の起こりやすさを示すのは、この遷移双極子モーメント

$$\boldsymbol{\mu}_{ba} \equiv \langle b|(-e)\hat{\mathbf{r}}|a\rangle \quad (4.52)$$

である。そこで、その大きさを表すための「単位」として、上記 1 次元調和振動子で  $\omega_h = (E_b - E_a)/\hbar$  と取ってエネルギー差をそろえ、その時の  $\mu_{10}$  を使うことにする。遷移確率は絶対値の 2 乗となることから、振動子強度 (oscillator strength) を、

$$f_{ba} = \frac{|\mu_{ba}|^2}{|\mu_{10}|^2} = \frac{2m\omega_{ba}}{e^2\hbar} |\mu_{ba}|^2 \quad (4.53)$$

と定義する。慣習的に  $f$  という文字を使うことが多く、 $f$  値とも呼ばれる。

終状態  $b$  が複数ある場合、系の可能なすべての状態を、この  $b$  を状態の指数に転用すると、 $f$  値には、

$$\sum_b f_{ba} = 1 \quad (4.54)$$

という総和則 (sum rule) が存在する。 $N$  個の電子系であれば、右辺は  $N$  になる。

また、系が多数の 1 次元的な方向性を持つ振動子型で、その向きがランダムになっている場合、有効な遷移双極子モーメント  $\langle \mu_{\text{eff}} \rangle$  は平均を取り、 $\mu_{ba}/3$  となる。この時は、振動子強度を

$$f'_{ba} = \frac{2m\omega_{ba}}{3e^2\hbar} |\mu_{ba}|^2 \quad (4.55)$$

とする。

系が空間反転対称性を持っているとすると、この系のハミルトニアン固有関数は空間反転操作に対する偶奇性(パリティ)を持つ。すなわち、 $\phi_n(\mathbf{r})$  が固有関数であるとすると、

$$\phi_n(-\mathbf{r}) = \pm\phi_n(\mathbf{r}) \quad (4.56)$$

である。+ が偶パリティ、- が奇パリティである。この時、(4.52) は  $\mathbf{r}$  が奇パリティであることから、 $|a\rangle, |b\rangle$  が同一のパリティを持っている場合、積分によって  $\mu_{ba}$  はゼロになり、双極子遷移は禁止される。このように、対称性や量子数などの条件により、遷移の可・不可を決めるルールを選択則 (selection rule) という。

## 4.2 光応答とバンド間遷移

最も簡単な2準位系で見てきた光応答現象について、基底状態も励起状態も結晶空間に広がった状態であるような、固体の電子状態の光応答へ議論を進展させよう。

### 4.2.1 バンド間光吸収

物質は様々な形で電磁波を吸収する。自由キャリア吸収、不純物吸収、格子振動吸収など多くの種類があるが、半導体光デバイス等で使用されているものは主にバンド間の吸収である。そこでバンド間吸収について基礎的なことを見ておこう。

簡単のため  $z$  方向に進む直線偏光平面電磁波をベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  を使って

$$\mathbf{A} = A_0 \mathbf{e} \cos(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (4.57)$$

と表す。波数  $\mathbf{k}_p$  は  $(0, 0, k_p)$ 、 $\mathbf{e}$  は偏光ベクトルで  $\mathbf{e}_x = (1, 0, 0)$  と置く。電場  $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ 、磁場  $\mathbf{H} = \mu^{-1}\text{rot}\mathbf{A}$  ( $\mu$  は媒質透磁率) より、エネルギー密度流 (Poynting ベクトル) は

$$\mathbf{I} = \langle \mathbf{E} \times \mathbf{H} \rangle = \frac{\epsilon_0 c \bar{n} \omega^2 A_0^2}{2} \mathbf{e}_z \quad (4.58)$$

となる。 $\bar{n}$  は屈折率(媒質中光速を  $c' = 1/\sqrt{\epsilon_1\epsilon_0\mu_1\mu_0}$  ( $\epsilon_1, \mu_1$ : 媒質の比誘電率, 比透磁率) として  $\bar{n} = c/c' = \sqrt{\epsilon_1\mu_1}$ )、 $\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)$  である。物質の光吸収により  $|\mathbf{I}|$  は  $I(z) = I_0 \exp(-\alpha z)$  と指数関数的に減衰し、この  $\alpha$  が吸収係数で

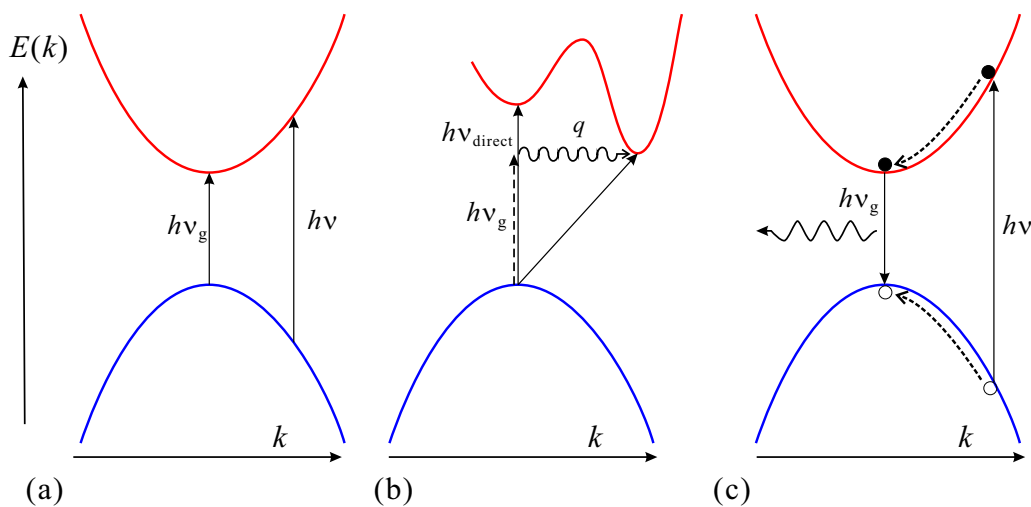


図 4.2 電子のバンド間遷移に伴う光応答現象の例を示した。(a) 直接遷移光吸収、(b) 間接遷移光吸収、(c) 光で励起された電子正孔対が再結合により発光するフォトルミネッセンス。

ある。この定義より、 $\alpha = -dI/Idz = -dI/Ic'dt$ ，そこで光子の単位時間単位体積あたりの平均吸収個数を  $W$  とすると  $I$  の減少割合は  $\hbar\omega W$  であるから、

$$\alpha = \frac{\hbar\omega W}{I} = \frac{2\hbar\omega W}{\epsilon_0 c \bar{n} \omega^2 A_0^2}. \quad (4.59)$$

光吸収機構の内、価電子帯の電子が光子を吸収して伝導帯に励起されるものを基礎吸収と呼び、ちょうどバンドギャップに相当するエネルギーより上で吸収が生じる。このバンドギャップ直上の吸収をバンド端吸収という。ハミルトニアン  $\mathcal{H} = (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2/2m_0 + V(\mathbf{r})$  で、 $\mathbf{A}$  を摂動として扱い  $\mathbf{A}^2$  の項を無視して、 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + (e/m_0)\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$  とする。伝導帯と価電子帯のプロッホ関数をそれぞれ  $|c\mathbf{k}\rangle = u_{c\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ ， $|v\mathbf{k}\rangle = u_{v\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  書くと、摂動項による価電子-伝導電子の単位体積当たり遷移確率  $W_{vc}$  はフェルミの黄金則近似で

$$W_{vc} = \frac{2\pi e}{\hbar m_0} |\langle c\mathbf{k} | \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} | v\mathbf{k}' \rangle|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}') - \hbar\omega) = \frac{\pi e^2}{2\hbar m_0^2} A_0^2 |M|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}') - \hbar\omega), \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} M &= \int_V \frac{d^3r}{V} e^{i(\mathbf{k}_p + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_{c\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}') u_{v\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \frac{\sum_l e^{i(\mathbf{k}_p + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_l}}{V} \int_{\Omega} d^3r u_{c\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}') u_{v\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{N}{V} \delta_{\mathbf{k}_p + \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{K}} \int_{\Omega} d^3r u_{c\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}') u_{v\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.61)$$

となる。 $l$  は格子点の指数、 $V$  は系の、 $\Omega$  は単位胞の体積であり、 $\mathbf{K}$  は逆格子ベクトル、 $\mathbf{k}_p$  は光子運動量、 $N$  は系中の格子点数で  $N\Omega = V$  である。

(4.61) では、光子の電磁場による電子の直接的励起を考えた。このような遷移を直接遷移と呼ぶ。直接遷移による基礎吸収が生じる条件は  $\mathbf{k}_p + \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}$  であるが、バンドギャップ、有効質量、格子定数の一般的な値から、 $\mathbf{K} = \mathbf{0}$  である。また、ここで考える双極子遷移の範囲内では  $\mathbf{k}_p$  を無視して  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  として差し支えない。 $u_{c\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ， $u_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は異なる固有値に属し直交しているから、(4.61) の  $\hbar\mathbf{k}'$  の項は消え、

$$M = \int_{\Omega} \frac{d^3r}{\Omega} u_{c\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} u_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (4.62)$$

(4.59)，(4.62) より、 $M$  の  $\mathbf{k}$  依存性が小さいとすると、直接遷移による吸収係数の表式

$$\alpha_{da} = \frac{\pi e^2}{\bar{n} \epsilon_0 \omega c m_0^2} |M|^2 \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \quad (4.63)$$

が得られる。項の後半の  $\mathbf{k}$  の和の部分を結合状態密度という。これを  $J_{cv}(\hbar\omega)$ ， $E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k})$  を  $E_{cv}(\mathbf{k})$  と書くと、 $\mathbf{k}$  の和を積分にして

$$J_{cv}(\hbar\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E_{cv}(\mathbf{k}) - \hbar\omega) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E_{cv}(\mathbf{k}) - \hbar\omega). \quad (4.64)$$

$\mathbf{k}$  空間での積分を等エネルギー面上での面積要素  $dS$  とエネルギー  $E_{cv}$  での積分に変数変換する。等エネルギー面に垂直な  $k$  成分を  $k_{\perp}$  と書くと、

$$\begin{aligned} d^3k &= dS dk_{\perp} = dS \frac{dk_{\perp}}{dE_{cv}} dE_{cv} = dS |\nabla_{\mathbf{k}} E_{cv}|^{-1} dE_{cv}, \\ \therefore J_{cv}(\hbar\omega) &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E_{cv}(\mathbf{k})|_{E_{cv}=\hbar\omega}}. \end{aligned} \quad (4.65)$$

以上より (4.65) の被積分関数分母が 0 となる点は吸収の特異点となる。今、図??(a) のような直接ギャップ型と呼ばれる半導体を考え、 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  で  $E_{cv} = E_g$ ， $\nabla_{\mathbf{k}} E_{cv} = \mathbf{0}$  とする。 $E_{cv}$  を  $\mathbf{k}_0$  の周りで展開し、1 次の項がゼロであるから、2 次まで取ると、

$$E_{cv}(\mathbf{k}) = E_g + \sum_i \frac{\hbar^2}{2\xi_i} (k_i - k_{i0})^2. \quad (4.66)$$

簡単のため、 $\xi_i > 0 (i = 1, 2, 3)$  とする。変数変換  $(\hbar/(2\xi_i)^{1/2})(k_i - k_{i0}) = s_i$  を行くと、

$$E_{cv} = E_g + \sum_i s_i^2 \equiv E_g + s^2, \quad d^3k = \frac{\sqrt{8\xi_1\xi_2\xi_3}}{\hbar^3} ds_1 ds_2 ds_3,$$

また、 $|\nabla_{\mathbf{s}} E_{cv}| = 2s$  であるから、 $\mathbf{s}$  空間でも同様に等エネルギー面上の積分を考え、

$$J_{cv} = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{\sqrt{8\xi_1\xi_2\xi_3}}{\hbar^3} \int \frac{dS}{2s} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\sqrt{8\xi_1\xi_2\xi_3}}{\hbar^3} \sqrt{\hbar\omega - E_g} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{m_r^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\hbar\omega - E_g}. \quad (4.67)$$

最後の変形は、図??(a) のような直接遷移型で電子、正孔のバンド端有効質量が等方的 (球対称) な場合を考え、等方的  $\xi_i$  を  $m_r$  と置いたもので、 $m_r^{-1} = m_e^{*-1} + m_h^{*-1}$  よりこれは換算質量である。(4.67) は結局、3次元  $\mathbf{k}$  空間で状態を数え上げたもので (2.14) の3次元状態密度を再計算したに過ぎない。この場合は、直接遷移による吸収係数の表式 (4.63) より、次が得られる。

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{e^2(2m_r)^{3/2}|M|^2}{2\pi\epsilon_0 m_0^2 \bar{n}\omega \hbar^3} \sqrt{\hbar\omega - E_g}. \quad (4.68)$$

この内、結合状態密度を除いて遷移の強さを表す  $|M|^2/\omega$  を無次元化した

$$f_{vc} = \frac{2|M|^2}{m_0\hbar\omega} \quad (4.69)$$

が、(4.53) の振動子強度に相当するものである。

## 付録 4A : 誘導放出, 自然放出のレート

多数の状態  $a, b$  (これらは、すべて同一とする) の二準位系が、振動数  $\omega$  に対するエネルギー密度スペクトル  $U(\omega)$  の電磁場中にあるとする。各二準位系間の直接の相互作用はなく、電磁場と二準位系は熱平衡にあるとする。電磁場としては、Planck の輻射公式で表されるようなエネルギー分布を持ち、全方位に運動量が分布しているものを考えることになる。光の吸収レート (単位時間に対する頻度) は、電場振幅が  $E_0 = \omega A_0$  として、(4.37) より、 $\omega \sim \omega_0$  とすると、

$$|\langle b|\mathcal{H}'|a\rangle| = |E_0 \mathbf{e}_p \cdot \langle b|(-e)\hat{\mathbf{r}}|a\rangle| = |E_0 \mathbf{e}_p \cdot \boldsymbol{\mu}_{ba}|. \quad (4A.1)$$

(4.43) より、光子の吸収確率は、上式の2乗に比例する。これは、 $E_0^2$ 、したがってスペクトル  $U$  に比例すると考えられるから、吸収レート  $W_{ba}$  はその係数を  $B_{ba}$  として

$$W_{ba} = B_{ba}U(\omega) \quad (4A.2)$$

と書ける。これに対して、光子の放出レートを、 $U$  に依存しない自然放出と、 $U$  に比例する誘導放出があるため、

$$W_{ab} = A + B_{ab}U(\omega) \quad (4A.3)$$

と書いてみる。4.1.4 節で述べたように、光吸収と誘導放出は逆過程の関係にあるため、

$$B_{ba} = B_{ab} \equiv B \quad (4A.4)$$

とする。 $E_b - E_a = \hbar\omega$  と置き、 $a, b$  状態の二準位系の数をそれぞれ  $N_a, N_b$  と置くと、

$$N_b = N_a \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (4A.5)$$

である。また、全体が平衡であることから、放出・吸収の時間当たりイベント数は等しい。

$$BUN_a = (A + BU)N_b \quad (4A.6)$$

以上から、次の  $U(\omega)$  の表式が得られる。

$$U(\omega) = \frac{A}{B} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (4A.7)$$

これと、Planck の輻射公式

$$U(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (4A.8)$$



が一致することを要請すると,

$$\frac{A}{B} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \quad (4A.9)$$

である。これらの係数  $A$ ,  $B$  を **Einstein** の **A** 係数, **B** 係数 と呼ぶ。

遷移確率 (4.43) を考えた際, 単一のエネルギー  $\hbar\omega$  を持つ光子を考えたが<sup>3</sup>, 今度は, 電磁波が<sup>3</sup>  $\omega_0$  の周りに  $\delta\omega$  の幅で分布していると考ええる. (4A.8) のように分布を持つ光子場を考える.  $\omega_0$  付近の電場の振幅を  $E_0$  とし, エネルギー密度を  $\epsilon_0 E_0^2/2$  とすると\*2,

$$\epsilon_0 \frac{E_0^2}{2} = \int_{\omega_0 - \delta\omega/2}^{\omega_0 + \delta\omega/2} U(\omega) d\omega. \quad (4A.10)$$

また, 方向での平均を考えると,

$$\langle |\boldsymbol{\mu}_{ab} \cdot \mathbf{e}_p|^2 \rangle = \langle \mu_{12}^2 \cos^2 \theta \rangle = \frac{\mu_{12}^2}{3}. \quad (4A.11)$$

改めて, 遷移確率 (4.43) を

$$|c_b(t)|^2 \simeq \frac{|\boldsymbol{\mu}_{ab}|^2}{3\hbar^2} \frac{1}{\epsilon_0} \int_{\omega_0 - \delta\omega/2}^{\omega_0 + \delta\omega/2} U(\omega) \frac{\sin^2[(\omega - \omega_0)t/2]}{(\omega - \omega_0)^2} d\omega \approx \frac{\pi\mu_{ab}^2}{3\epsilon_0\hbar^2} U(\omega_0)t \quad (4A.12)$$

と近似する. 最後の積分は,  $U$  が緩やかな分布だとして積分の外に出し,  $\delta\omega$  区間の積分を無限積分で代用している. また,  $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \sin^2 \lambda x / \lambda x^2 = \pi \delta(x)$  を用いた. 単位時間当たりの遷移確率は,  $|c_b(t)|^2/t$  で求められるので, 以上から, B 係数が

$$B = \frac{\pi\mu_{ab}^2}{3\epsilon_0\hbar^2} = \frac{\pi e^2}{6\epsilon_0 m \hbar \omega_0} f_{ba} \quad (4A.13)$$

と求められる\*3.

## 参考文献

- [1] N. F. Mott, “Metal-Insulator Transitions” (CRC Press, 1990); 和訳 「金属と非金属の物理」小野嘉之, 大槻東巳 (丸善, 1996).
- [2] 小野嘉之 「金属絶縁体転移」(朝倉書店, 2002).
- [3] 大槻東巳 「不規則電子系の金属-絶縁体転移」(現代物理最前線 (2) 共立出版, 2000).
- [4] 米沢富美子 「金属-非金属転移の物理」(朝倉書店, 2012).
- [5] D. Stauffer and A. Aharony, “Introduction to Percolation Theory” (2nd ed., Taylor & Francis, 2018); 和訳 「パーコレーションの基本原理解」小田垣 孝 (吉岡書店, 2001).
- [6] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
- [7] D. C. Reynolds, “Excitons: Their Properties and Uses” (Academic Press, 1981).
- [8] 本格的に学ぶには例えば, R. Loudon, “The Quantum Theory of Light” (3rd ed., Oxford, 2000); P. Meystre and M. Sargent III, “Elements of Quantum Optics” (Springer, 1990); 松岡正浩 「量子光学」(裳華房, 2000) など.
- [9] J. H. Jeans, Phil. Mag. **10**, 91 (1905).
- [10] 太田浩一 「マクスウェル理論の基礎」(東京大学出版会, 2002).
- [11] 霜田光一 「レーザー物理入門」(岩波書店, 1983).

\*2 振動電磁場のエネルギーは, (4.12) より,  $\langle (\epsilon_0 E^2 + B^2/\mu_0)/2 \rangle = \epsilon_0 \langle (E^2) \rangle$  であり, 時間平均により  $\epsilon_0 E_0^2/2$  となる.

\*3 定義の際に角振動数スペクトル  $U(\omega)$  ではなく, 周波数スペクトル  $\rho(\nu)$  ( $2\pi\nu = \omega$ ) を使うと, 当然見かけ上  $2\pi$  の違いが生じる.

# 講義ノート 半導体 第6回

2021年5月18日 勝本信吾 東京大学物性研究所 (理学系研究科物理学専攻)



## 第5章 電気伝導の半古典論

電気伝導は光応答と並ぶ重要な応答現象である。何らかの摂動，あるいは外力に対する応答であるから，その度合はともかくとして必然的に非平衡を扱うことになる。ただし，一般に電気伝導現象においてやり取りされるエネルギーはバンド間遷移に伴う光学応答 ( $\sim E_g$ ) に比較すると，桁違いに小さくなる。ここでは線形応答のしかも古典的な場合の非常に基礎的な部分を眺めておく。量子輸送に関しては更に後の講義で述べる。

### 5.1 古典的電気伝導

半導体の電気伝導現象で物理的に興味深いのは何と云っても量子ホール効果を始めとする量子輸送現象である。しかし一方，地球上に溢れている半導体デバイスの多くで重要なのは古典的な伝導である\*1。半導体中の伝導が常温では古典的になる理由はそのキャリア密度の低さにある。まず，半導体中の電気伝導としてバルク (3次元) のものを考えると，通常フェルミ準位はバンドギャップ中に存在し，フェルミ準位付近には状態密度がない。このため，例えば電子のエネルギー分布を考えると，フェルミ分布の裾の方を見ていることになり，温度を固定して見ればマックスウエル分布で近似できる。

半導体を材料にしたものでも，大量にドープしたりヘテロ接合を使って空間的に電子が移動して溜まる場所を作ったりすると，フェルミ準位付近に有限の状態密度を持つ金属状態を作り出すことができる。しかし，そのような場合でも室温付近では多くの場合古典近似が成立する。密度  $n$ ，質量  $m$  のフェルミ粒子系のフェルミ縮退温度は

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_B} (3\pi^2 n)^{2/3} : 3 \text{次元}, \quad \frac{\hbar^2}{16\pi mk_B} n : 2 \text{次元} \quad (5.1)$$

であり，半導体に典型的な値を入れてみると，比較的大きなフェルミエネルギーを持つ GaAs の2次元電子系でも70K程度で室温の電子運動エネルギー分布はマックスウエル分布で記述される。また，フェルミエネルギーに比べて分布の広がりが大きく電子を量子力学的波動と見た場合の波数のばらつきが大きいため電子集団としては量子干渉効果が現れにくくなっている。ということで，本節では古典的な伝導でどのような現象が現れるか見ていきたい。

#### 5.1.1 輸送現象と輸送係数

輸送現象とは何らかの物理量の実空間内の移動を意味する。多くの場合は粒子系に問題をマップし，その粒子の移動で輸送現象を考えることができる。例えば，びんと張った弦の上に何らかの方法でその張った直線からのずれを発生させれば「ずれ」は波動として弦上を伝導していく。この時，この「ずれ」を粒子とみなせば「ずれ」の輸送現象が考えられる。固体中では，音波，スピン波 (マグノン) など，様々な素励起が存在しこれらの輸送現象が存在し得る。半導体中の代表的輸送現象である電気伝導では，移動物理量である電荷を運ぶ担い手の粒子をキャリア\*2と呼び，ほとんどの場合すでに導入した電子，及び正孔 (ホール) と呼ばれる多体状態がその実体である。

\*1 伝導の次元は低いものも多く使用されており，そのためには量子閉じ込め効果が使用されている。それでも伝導自身は古典的に理解されるものである。

\*2 「担い手」そのものだが，かたかな単語を使用する。

等方的な空間で通常の熱平衡状態にある粒子系の輸送現象を考えるに際して、無摂動状態での重心は静止しているとする。ここに外部から何らかの摂動を加えた時に応答として生じる物理量の移動が輸送である\*3。特にオームの法則の電圧と電流のように線形応答の場合、その係数を輸送係数 (transport coefficient) と呼ぶ。

半導体系の電気伝導には強い非線形性が現れることが多いが、まずは、線形応答について考えていくことにする。代表格の電場-電流応答では、電流密度  $\mathbf{j}$ 、電場  $\mathbf{E}$  の間に

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \rho \mathbf{j} = \sigma^{-1} \mathbf{j} \quad (5.2)$$

の線形関係が考えられる。 $\sigma$  が伝導率テンソル (conductivity tensor)、 $\rho$  が抵抗率テンソル (resistivity tensor) で、これらは互いに逆テンソルの関係にある。

### 5.1.2 ボルツマン方程式

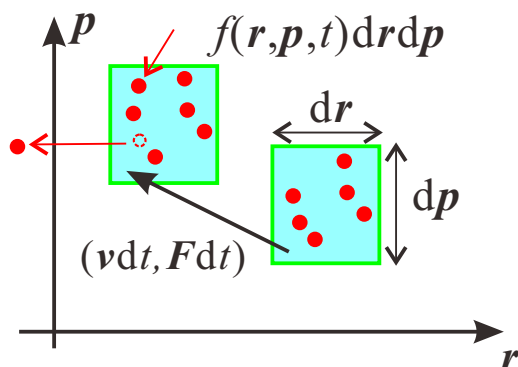


図 5.1 位相空間中の微小体積  $drdp$  中の粒子が  $dt$  間の時間発展で移動し、散乱により入れ替わる様子を模式的に描いたもの。

空間座標  $\mathbf{r}$  と運動量  $\mathbf{p}$  の 6 次元空間 (位相空間) 内の粒子系の分布関数  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  を考える。 $f$  は点  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  の周辺の微小体積  $drdp$  の中に時刻  $t$  に存在する粒子の全体に対する割合が  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) dr dp$  であることを意味する。

散乱がない場合は、粒子に働く力を  $\mathbf{F}$  として、古典力学的運動は、

$$d\mathbf{r}/dt = \mathbf{v} = \mathbf{p}/m^*, \quad d\mathbf{p}/dt = \mathbf{F} \quad (5.3)$$

で与えられる。 $drdp$  に含まれる粒子の力学的状態はほぼ同じであるから、図 5.1 のように微小時間  $dt$  の間に一斉に上式により時間発展し、

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{p} + \mathbf{F}dt, t + dt) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

となる。散乱があると、図 5.1 に模式的に示したようにこれによる  $f$  の変化が生じる。これを  $(\partial f / \partial t)_c$  と表すと

$$f(\mathbf{r} + (\mathbf{p}/m^*)dt, \mathbf{p} + \mathbf{F}dt, t + dt) + (\partial f / \partial t)_c dt = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

である。 $f$  を  $dt$  の 1 次まで展開することで、

ボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = - \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (5.4)$$

が得られる。式 (5.4) はボルツマン方程式 (Boltzmann equation)、右辺の散乱による  $f$  の変化項は衝突項と呼ばれる。

衝突項の最も簡単な近似は定緩和時間近似 (constant relaxation time approximation) であり、エネルギーに依存しない定数の緩和時間  $\tau$  を考え、

\*3 超伝導電流や量子ホール端状態の反磁性電流はこの基準から外れるが、通常は輸送現象に含める。

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (5.5)$$

とする。\$f\_0\$ は \$\mathbf{F} = \mathbf{0}\$ の熱平衡分布関数で、\$\tau\$ は非平衡状態からの回復に要する時間である。一様な系を考えると \$\partial f / \partial \mathbf{r} = \mathbf{0}\$ より、(5.5) の近似の下ではより一般的な緩和時間近似として \$\tau\$ の運動量 \$\mathbf{p}\$ (あるいは運動エネルギー) 依存を考えるものがある。以下、\$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}\$ や量子統計など量子論を半古典的に使用する。

### 5.1.3 ドリフト電流・拡散電流

粒子として電荷キャリアを考える。粒子流はすなわち電流である。粒子流は分布関数 \$f\$ が \$\mathbf{p}\$ 空間内で非等方性を生じることで現れる。式 (5.4) で \$\mathbf{p}\$ 以外で摂動として考えられるのは、\$\mathbf{F} (= -e\mathbf{E})\$、および \$\partial / \partial \mathbf{r}\$ である。前者による摂動、すなわち、外部電場などの加速により分布関数 \$f(\mathbf{r}, \hbar \mathbf{k}, t)\$ に \$\mathbf{k}\$ 空間で偏り (非対称) が生じることで実空間でキャリア全体の流れ—ドリフト電流 (drift current)—が生じるのに対し、後者の実空間 (\$\mathbf{r}\$) での偏りによって生じるキャリア移動を拡散電流 (diffusion current) と呼ぶ。

空間的に一様な電子系に一様電場 \$\mathbf{E}\$ がかった定常状態を考える。衝突項は残し、\$\mathbf{r}, t\$ 依存を略して \$\mathbf{p}\$ のみを変数とする。式 (5.4) に \$\mathbf{p}\$ に依存する緩和時間近似を適用すると、

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{p})} \quad \therefore f(\mathbf{p}) = f_0(\mathbf{p}) + e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}$$

\$\mathbf{E}\$ を摂動と考え、右辺第2項の \$f\$ を \$f\_0\$ として \$\mathbf{E}\$ の1次、この \$f\$ を再度右辺に代入して \$\mathbf{E}\$ の2次と逐次代入で \$\mathbf{E}\$ のべき展開が得られる。1次では

$$f(\mathbf{p}) \simeq f_0(\mathbf{p}) + e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E} \cdot (\partial f_0 / \partial \mathbf{p}) \quad (5.6)$$

であるが、\$f(\mathbf{p}) \simeq f\_0(\mathbf{p} + e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E})\$ を \$\mathbf{E}\$ について展開したのと同じ形をしており、分布が \$\mathbf{p}\$ 空間で \$-e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E}\$ だけシフトした、と見ることもできる。\$\tau\$ が \$\mathbf{p}\$ に対して一定であれば一様なシフトとなる。

電流を求めるためには \$\mathbf{k}\$ 空間内で \$\mathbf{v}(\mathbf{k})f(\mathbf{k})\$ を積分することになる。\$\mathbf{E} = (\mathcal{E}\_x, 0, 0)\$ とすると、上の近似ではこれは、\$x\$ 成分以外は奇関数の対称積分により消えるため

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \left( f_0 + e\tau\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\hbar \partial \mathbf{k}} \right) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k_x}{m} e\tau\mathcal{E}_x \frac{\partial f_0}{\hbar \partial k_x} = \frac{e\mathcal{E}_x}{m} \int \mathcal{D}(E)\tau(E) \frac{\hbar^2 k_x^2}{m} \frac{\partial f_0}{\partial E} dE \quad (5.7)$$

である。ここで、多くの場合にそうであるように、緩和時間 \$\tau\$ にエネルギー依存性があるとした (1次近似であれば OK)。\$\hbar^2 k\_x^2 / 2m\$ は \$x\$ 方向の運動エネルギーで、等分配則より \$E/3\$ である。

(5.7) で系が金属的でフェルミ縮退していると、\$\partial f\_0 / \partial E\$ は \$-\delta(E - E\_F)\$ で近似される。\$\mathcal{D}(E) = A\sqrt{E}\$ とすると (バンド端をエネルギーの原点とする)、(5.7) は

$$\langle v_x \rangle = -A \frac{e\mathcal{E}_x}{m} \frac{2\tau(E_F)}{3} E_F^{3/2}$$

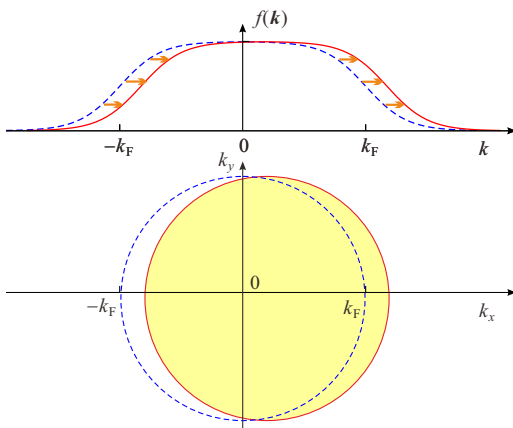


図 5.2 フェルミ縮退した電子気体が、電場等により加速され波数空間において分布 \$f(\mathbf{k})\$ が平衡位置 (破線) から小さな矢印のようにシフトしている様子を模式的に示したもの。下図は2次元波数空間で「フェルミ円」がずれる様子。現実の系に対してずれ等が強調されている。

ここで、全粒子濃度  $n$  は

$$n = \int_0^{E_F} \mathcal{D}(E) dE = A \frac{2}{3} E_F^{3/2}$$

であるから、電気伝導度  $\sigma = j/E = -e\langle v_x \rangle / \mathcal{E}_x$  に対して

ドルーデの電気伝導度

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau(E_F)}{m} \quad (5.8)$$

という、良く知られたドルーデの電気伝導度 (Drude conductivity) の表式が得られた。

一方、粒子密度が低く温度が高くてマックスウェル近似が成立する場合、 $f_0 \approx A \exp(-E/k_B T)$  であるから、

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{A}{k_B T} \exp\left[-\frac{E}{k_B T}\right] = -\frac{f_0}{k_B T} = -\frac{f_0}{(2\langle E \rangle / 3n)}$$

最後の変形は、1粒子当りの1自由度平均運動エネルギーが  $k_B T / 2$  であることを用いている。電気伝導度は

$$\sigma = e^2 \int \tau(E) \mathcal{D}(E) \frac{2E}{3m} \frac{3n f_0}{2\langle E \rangle} dE = \frac{ne^2 \langle \tau \rangle_E}{m} \quad (5.9)$$

と再びドルーデ型になる。ここで、 $\langle E \rangle_E$  は、エネルギーの重みを付けた平均

$$\langle \tau \rangle_E = \frac{\langle \tau E \rangle}{\langle E \rangle} = \frac{\int_0^\infty \tau(E) E^{3/2} f_0 dE}{\int_0^\infty E^{3/2} f_0 dE} \quad (5.10)$$

を表す。

次に  $f$  の実空間分布の偏りによって生じる拡散電流を考える。ボルツマン方程式 (5.4) で  $\mathbf{F} = 0$  の場合に定緩和時間近似 (5.5) を  $f = f_0 + f_1$  の空間分布に適用して

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f = -f_1 / \tau, \quad f_1 \text{ の 1 次まで取って } f_1 = -\tau \mathbf{v} \cdot \nabla f_0. \quad (5.11)$$

空間中にある体積  $V$  を考え、一定の拡散電流  $\mathbf{J}$  が流れているとすると、

$$\mathbf{J} = (-e) \int_V \tau \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \nabla f_0) d\mathbf{r}.$$

$\nabla f_0$  の向きは一定としこれを  $x$  軸にとると、 $\mathbf{v}$  の内、 $v_x$  以外の成分は積分の際対称性により消える。 $\langle v_x^2 \rangle = \langle v^2 \rangle / 3$  であり、温度は一様で  $\langle v^2 \rangle$  等も空間変化していないとすると、単位体積に直して

$$j_x \text{ (電流密度)} = -e \int_{\text{単位体積}} \tau v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial x} d\mathbf{r} = -e \left\langle \frac{\tau v^2}{3} \right\rangle \frac{\partial n}{\partial x}.$$

すなわち、

$$\mathbf{j} = (-e) D \nabla n, \quad D = \langle \tau v^2 / 3 \rangle. \quad (5.12)$$

$D$  は拡散係数 (diffusion constant) と呼ばれ定緩和時間近似では、

アインシュタインの関係式

$$D = \frac{\tau}{3} \langle v^2 \rangle = \frac{\tau k_B T}{m^*} = \frac{\mu}{e} k_B T \quad (5.13)$$

である。式 (5.13) はアインシュタインの関係式 (Einstein relation) と呼ばれる。最右辺の  $\mu$  は、後出 (5.20) で定義される移動度である。

### 5.1.4 ホール効果

電流に対する外部磁場の影響 (Galvano-Magnetic 効果, GM 効果) について取り扱う. ボルツマン方程式において電子に働く力としてローレンツ力を考える. 磁束密度  $\mathbf{B}$  の磁場が印加された電子系に対して,  $z$  軸を磁場に平行方向にとると, 速度  $\mathbf{v}$  の電子に加わるローレンツ力は,  $\mathbf{F} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  で  $xy$  面内成分のみ持つ. 有効質量が等方的な場合, 伝導率テンソル (5.2) は, ローレンツ力の対称性によって

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m^*} \begin{pmatrix} A_l & -A_t & 0 \\ A_t & A_l & 0 \\ 0 & 0 & A_z \end{pmatrix} \mathbf{E} \quad (5.14)$$

という形になる. 簡単に図 5.3 にあるように,  $y$  方向が有限で  $x$  方向に帯状に伸びた試料に電場  $\mathbf{E} = (\mathcal{E}_x, 0, 0)$  を加えた場合を考える.  $j_y$  によって運ばれたキャリアは図 5.3 のように試料の端にたまって試料内部に電場  $\mathbf{E}_{\text{int}} = (0, \mathcal{E}_y, 0)$  を形成し, 定常状態では  $j_y = 0$  である.

このように電流と磁場に垂直な電場を生ずる効果をホール効果 (Hall effect),

$$R_H = \frac{\mathcal{E}_y}{J_x B_z} \quad (5.15)$$

に相当する比例係数をホール係数 (Hall coefficient) と呼ぶ. ホール電場  $\mathcal{E}_y$  は  $j_y = 0$  より,

$$\mathcal{E}_y = -(A_t/A_l)\mathcal{E}_x \quad (5.16)$$

であるから,  $\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E}$  で定義される伝導度テンソルは

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2}{m^*} A_l = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E, \quad \sigma_{xy} = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c\tau^2}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E, \quad (5.17)$$

$$R_H = -\frac{1}{ne} \frac{A_t}{\omega_c(A_l^2 + A_t^2)} \quad (5.18)$$

などと求まる. 磁場が弱く,  $\omega_c\tau \ll 1$  であれば,

$$R_H = -\frac{1}{ne} \frac{\langle \tau^2 \rangle_E}{\langle \tau \rangle_E^2} = \frac{1}{n(-e)} \frac{\Gamma(2s+5/2)\Gamma(5/2)}{(\Gamma(s+5/2))^2} = \frac{r_H}{n(-e)} \quad (5.19)$$

となり,  $s$  がわかればホール係数の測定からキャリア濃度とキャリアの符号を知ることができる (正孔の場合は  $-e$  が  $e$  で置換される).  $r_H$  はホール因子 (Hall factor) と呼ばれ, 高温では散乱機構に依存するが, 多くの場合 1 前後の値を取り, 一定緩和時間近似 ( $s = 0$ ) の範囲や低温でフェルミ縮退している場合などは 1 となる (表 5.1 参照).  $\tau$  が定数 ( $s = 0$ ) の近似を行うと, マックスウェル分布でなくても (5.19) は成立し, 括弧内に示した良く知られた表式となる.

電場  $\mathcal{E}$  に対して, 電子が平均して獲得する速さを  $v$  とすると, 移動度 (mobility) は  $v/|\mathcal{E}|$  で定義され, 緩和時間近似では,

$$\mu = \frac{v}{|\mathcal{E}|} = \frac{nev}{ne|\mathcal{E}|} = \frac{j}{ne|\mathcal{E}|} = \frac{\sigma}{ne} = \sigma|R_H| = \frac{e\tau}{m^*} \quad (5.20)$$

のように書かれる.

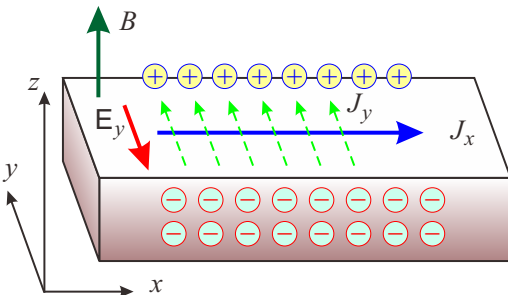


図 5.3 磁場が  $z$  方向にかかっている時,  $x$  方向に電流を流すと, ローレンツ力により  $y$  方向の電流  $J_y$  が流れるが, 試料の端にたまった電荷による電場 (ホール電場) によって打ち消され, 定常状態ではゼロになる.

散乱機構	$E$ 指数	$T$ 指数	ホール因子
音響フォノン	-1/2	-3/2	1.18
イオン化不純物 (弱遮蔽)	+3/2	+3/2	1.93
イオン化不純物 (強遮蔽)	+1/2	+1/2	1.18
中性不純物	0		1.00
圧電フォノン	+1/2		1.10

表 5.1 様々な散乱機構のホール因子.  $E, T$  は散乱時間エネルギー依存指数であるが, ここでは解説を略す. 文献 [1] などを見よ.

### 5.1.5 様々な散乱

ボルツマン方程式を緩和時間近似で考えてきたが, 緩和にはフォノンその他の固体内自由度との散乱など様々な機構が寄与する. 各緩和機構に対してそれぞれ緩和時間近似を考え, 各緩和時間を  $\tau_\alpha$  のように指数付けすると, 各緩和の頻度 ( $\propto \tau_\alpha^{-1}$ ) が全体の緩和に加算的に働くと考えて得られるマティーンセンの規則

$$\tau^{-1} = \sum_{\alpha} \tau_{\alpha}^{-1} \quad (5.21)$$

が良く成立する. 緩和時間近似で古典的な電気伝導を扱う場合, キャリアの散乱は各種の散乱の平均時間間隔 (散乱時間) とマティーンセンの規則 (5.21) を通して緩和時間に繰り込まれる. 従って, それぞれの散乱過程の物理的性格は, 例えばある系のパラメーターに対する散乱時間の依存性が異なれば, このパラメーターに対する電気伝導度の依存性を見ることでどのような散乱機構が主に電気伝導を制限しているかがわかる. バンド電子 (正孔) の散乱現象は, バンド電子の様々な特徴, また散乱の要因により極めて多岐にわたる (図 5.4). 本節では, 代表的な散乱機構とその特徴を, 更にごく一部について列挙する.

**フォノン散乱**: 格子振動を量子化したものがフォノンである. フォノンは波数  $k_p \rightarrow 0$  で運動エネルギー  $E(k_p) \rightarrow 0$  となる分散を持つ音響フォノンと,  $E(k_p \rightarrow 0)$  が有限となる光学フォノンに大別できる. これは, ごく平たくには隣接する振動ユニット (構造の簡単な結晶では構成原子) の振動位相が同位相 (音響) か逆位相 (光学) かの違いによる. 格子振動は, バンド電子から見れば周期ポテンシャルの歪みであり, これにより散乱を生じる. 散乱の際に反跳によって原子核の位置にも変化が生じ, フォノン側にも散乱となる. フォノン散乱は, 一般には電子系から見るとエネルギーのやり取りを伴う非弾性散乱である.

音響フォノン散乱による緩和時間のエネルギー依存性は一般に  $\tau(E) = a_{ph} E^{-1/2}$  である. エネルギー重み付き平均散乱時間  $\langle \tau_{ph} \rangle_E$  は,

$$\langle \tau_{ph} \rangle_E = a_{ph} (k_B T)^{-1/2} \frac{\Gamma(2)}{\Gamma(5/2)} = \frac{8\sqrt{\pi} a_{ph}}{3\sqrt{k_B T}} \quad (5.22)$$

となる. 高温近似ではフォノンのエネルギー分布により  $a_{ph} \propto (k_B T)^{-1}$  であるから, 音響フォノン散乱によって制限される移動度  $\mu_{ph}$  の温度依存性は

$$\mu_{ph} \propto \langle \tau \rangle_E \propto (k_B T)^{-3/2} \quad (5.23)$$

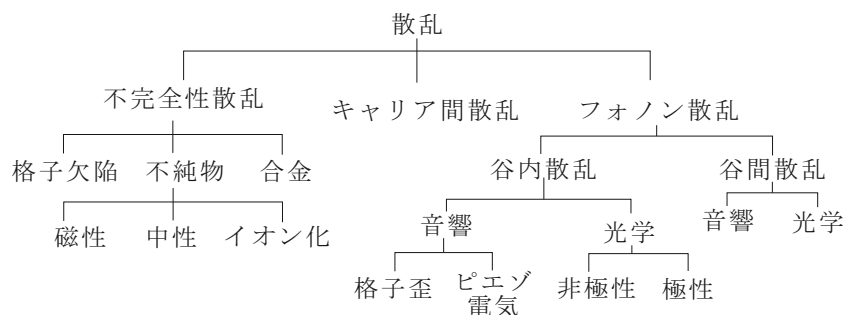


図 5.4 要因等による散乱の分類. 要因, 形態, エネルギーのやり取りなどにより様々な分類法がある.

のようになる。一方、光学フォノンは  $k \approx 0$  でもエネルギーが大きく、弱い電場に対する伝導には影響しない。一方、強い電場で電子が熱平衡から大きく外れて運動するような、ホットエレクトロン伝導においては光学フォノン散乱は大きな影響を及ぼす。

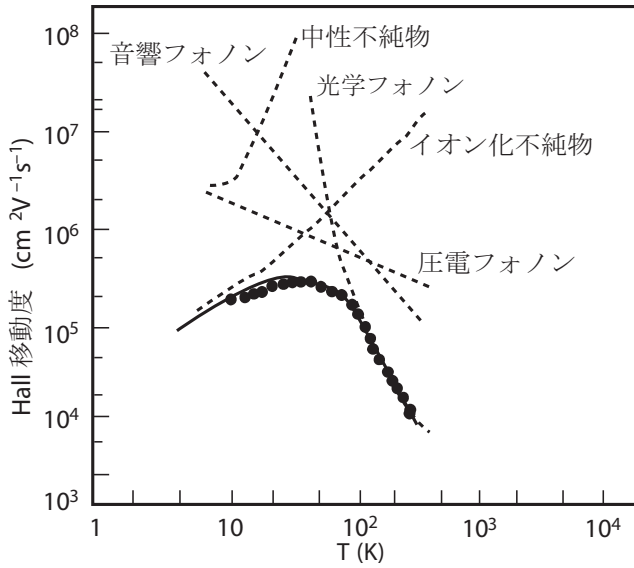


図 5.5 GaAs の Hall 効果から求めた移動度 (実験値, 黒丸) と, (5.21) に様々な散乱機構とその温度依存性を考え, 実験値にフィットした結果 (実線). 破線は, 各散乱機構による温度依存性. [?]

**イオン化不純物散乱**: 固体中の不純物原子はしばしば電子を放出して正イオン, あるいは捕獲して負イオンとなり, バンド電子に対してクーロンポテンシャルを形成し, 散乱を引き起こす。ただし, 大抵は周辺の電荷キャリアにより遮蔽されるため, 距離  $r$  に対して  $1/r$  のクーロン型ではなく,  $e^{-r/L_D}/r$  の湯川型として働く。イオン化不純物がスピン由来の磁気モーメントを持つ場合は, 磁性不純物散乱の側面も持ち, 内部自由度により近藤効果のような特異な現象が生じる。内部自由度がない場合は, 単純ポテンシャル散乱で弾性散乱である。

湯川ポテンシャルによるキャリアの散乱に関しては, 遮蔽が弱く  $L_D$  が長い場合は, キャリアがマックスウェル分布の場合

$$\tau_{\text{ion}} \propto T^{3/2}, \quad \mu_{\text{ion}} \propto \frac{T^{3/2}}{\ln(1+x) - \frac{x}{1+x}}, \quad x \equiv \frac{24m^* \lambda k_B T}{\hbar^2} \quad (5.24)$$

となる寄与を与える。遮蔽が強く,  $L_D$  が非常に短い場合, 散乱はデルタ関数ポテンシャル的になり,

$$\tau_{\text{ion}} \propto T^{1/2}, \quad \mu_{\text{ion}} \propto T^{1/2} \quad (5.25)$$

である。

GaAs の Hall 効果と電気伝導度から求めた移動度に対して, 式 (5.21) に様々な散乱機構とその温度依存性を考えてフィットした結果を図 5.5 に示した。破線が, 夫々個別の散乱機構による移動度への制限を示しており, これらで制限された結果として移動度が決まっていることがわかる。

## 5.2 熱伝導と電気伝導

ボルツマン方程式の中で位相空間内の勾配に起因する左辺 2 項について, それぞれがドリフト電流, 拡散電流を生じることを見たが, 両者がゼロでない場合を考える必要がある現象もある。それが本副節のテーマ熱電効果である。半導体内に温度勾配があると, これに応じて熱の流れ, 熱流 (heat current, thermal flux) が生じる。熱の運び手には, 電荷と異なり, 電荷キャリア以外に格子振動 (フォノン phonon) が存在し, 後者はフォノン・ドラッグ (phonon drag) 効果と呼ばれる。が, ここではキャリアによる熱流のみを考える。また, 以下の議論ではしばらく, ジュール発熱 (Joule heating) は考えない。

### 5.2.1 熱伝導度

濃度  $n$  のキャリアによる  $x$  方向の熱流密度 (thermal flux density)  $j_{qx}$  を

$$j_{qx} = \langle n v_x (E - \mu) \rangle = \int_0^\infty v_x (E - \mu) f(E) \mathcal{D}(E) dE \quad (5.26)$$

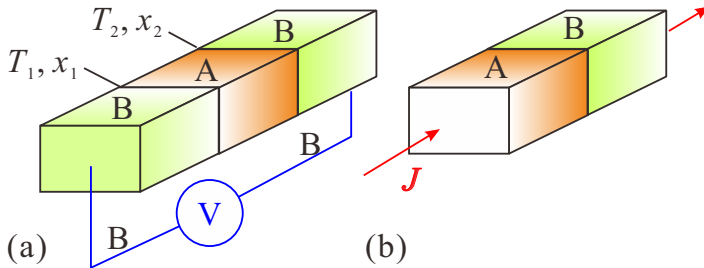


で定義する。すなわち、温度勾配 (temperature gradient)  $\nabla T$  がある時、キャリア熱伝導度  $\kappa_n$  (thermal conductivity) を

$$\kappa_n = -\frac{j_{qx}}{\partial T/\partial x} \quad (5.27)$$

で定義する。ベクトル表記では、 $j_q = -\hat{\kappa}\nabla T$ 。

## 5.2.2 熱電効果



(5.27) のようにキャリアによる熱流が生じているとき、何らかの形で電気的な効果が生じていると考えられる。このような、温度勾配と電気効果の複合効果を熱電効果 (thermoelectric effect) という。

左図 (a) のように、有限幅の伝導体 A の端の温度をそれぞれ  $T_1, T_2$  として、ここに別の伝導体 B をつなぎ、これを  $T_1, T_2$  の間の一定温度のところまで引っ張り、入力抵抗無限大の電圧計をつなぐと、定常状態では電流は流れないので、両端には温度勾配による電流の導体 A, B による差を補償して流れなくするための電圧  $V_{AB}$  が立つ。これをゼーベック効果 (Seebeck effect), この電圧対温度差 ( $\Delta T = T_1 - T_2$ ) の比

$$S_{AB} = \frac{V_{AB}}{\Delta T} \quad (5.28)$$

をゼーベック係数 (Seebeck coefficient) という。一方、(b) のように、A, B の接合を考え両端を同じ温度にした状態で外部から電流  $J$  を流すとこれによる熱流  $Q$  が生じる。接合面に電荷がたまらないとすると、 $J$  は両導体で共通であるが、その熱流との比は異なるため、接合面では熱流が不連続となりこのため発熱あるいは吸熱現象が生じる。これをペルチエ効果 (Peltier effect) といい、発熱速度  $Q_{AB}$  と  $J$  の比

$$\Pi_{AB} = \frac{Q_{AB}}{J} \quad (5.29)$$

をペルチエ係数 (Peltier coefficient) という。これを (a) のような BAB の接合で行えば、同じ電流が2つの接合で反対方向に流れることになるので、一方の接合で吸熱が起これば、他方では同じだけの発熱が生じることになる。

また、異種伝導体の接合でなく一様な導体であっても、電流  $J$  と温度勾配 ( $x$  方向とする)  $\partial T/\partial x$  (temperature gradient) が存在すると吸熱または発熱が生じる。これらの積と単位長さ当りの発熱  $\partial Q/\partial x$  とは比例関係にあり、これをトムソン効果 (Thomson effect), その係数

$$\tau = \frac{\partial Q/\partial x}{J(\partial T/\partial x)} \quad (5.30)$$

をトムソン係数 (Thomson coefficient) と呼ぶ。

これらの間には、

$$\Pi_{AB} = S_{AB}T, \quad \tau_A - \tau_B = T \frac{dS_{AB}}{dT} \quad (5.31)$$

という簡単な関係が成立し、ケルビンの関係式 (あるいはトムソンの関係式, Kelvin relations or Thomson relations) (付録 5B) という。これより、

$$S_A(T) \equiv \int_0^T \frac{\tau_A(T')}{T'} dT' \quad (5.32)$$

などとすると、

$$S_{AB} = S_A - S_B \quad (5.33)$$

であり，組み合わせによらない物質固有のゼーベック係数  $S$  が定義できることになる。

以上から，結局，ゼーベック効果とはいわゆる熱起電力のことであり，温度差  $\Delta T$  がある時にこの温度差領域に  $V$  だけの電位差が生じているとすると， $V$  は  $\Delta T$  に比例し，その比例係数がゼーベック係数である。ただし，実際に測定するとなると，電位差を測定するにはリードを付けて電圧計まで引っ張ってこなくてはならないが，リードにも熱起電力が存在するから，電圧計に現れる電圧は，リードの熱起電力を差し引いたものになる。(5.33)はその事を示しており，熱電対 (thermocouple) は逆に2種類の物質のゼーベック係数を知ることによって温度差  $\Delta T$  を得るためのセンサーである。

### 5.2.3 ボルツマン方程式と熱電係数

熱電効果を考えるため，ボルツマン方程式の緩和時間近似 (3.20), (3.21) を考える。定常状態を考えるため， $\partial f/\partial t = 0$  とし，再度方程式を書いておくと便宜のため変数を少し書き換え，

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_v f = -\frac{f - f_0}{\tau(E)}. \quad (5.34)$$

熱平衡からのずれは小さいとし，左辺の被微分分布関数  $f$  を2項とも熱平衡分布関数  $f_0$  で置き換える近似をする。

温度勾配  $\nabla T$  がある場合に  $\nabla f_0$  を次のように変形する。まず，

$$\nabla f_0 = \nabla T \frac{\partial f_0}{\partial T}.$$

ここで， $f_0$  には， $E$  と  $T$  は常に  $-(E - E_F)/k_B T$  という組み合わせで現れるから，これを形式的に  $a$  と置くと，

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} (-k_B T) \frac{E - E_F}{k_B T^2} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{E_F - E}{T} \quad \text{より}$$

$$\nabla f_0 = \nabla T \frac{E_F - E}{T} \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5.35a)$$

$$\text{また } \nabla_v f_0 = \nabla_v E \frac{\partial f_0}{\partial E} = m \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5.35b)$$

電場  $\mathbf{E}$  と温度勾配  $\nabla T$  が存在する場合に，(5.34) を (5.35) を使って書き換えると，

$$f = f_0 - \tau(E) \mathbf{v} \cdot \left[ -e \mathbf{E} + \frac{E_F - E}{T} \nabla T \right] \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5.36)$$

ゼーベック係数に適用してみる。 $x$  方向に電場  $\mathcal{E}_x$  がかかっているとす。  $x$  方向の電流は，

$$j_x = -e \langle n v_x \rangle = -e \int_0^\infty v_x f(E) \mathcal{D}(E) dE = e \int_0^\infty v_x^2 \tau \left[ -e \mathcal{E}_x + \frac{E_F - E}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE.$$

ゼーベック係数は  $j_x = 0$  の場合に測定されるから，上記を0と置くと，

$$\begin{aligned} S = \frac{\mathcal{E}_x}{\partial T / \partial x} &= \int_0^\infty v_x^2 \tau \frac{E_F - E}{eT} \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \Big/ \int_0^\infty v_x^2 \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \\ &= \frac{1}{eT} \left[ E_F - \int_0^\infty \tau E^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \Big/ \int_0^\infty \tau E \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \right] \end{aligned} \quad (5.37)$$

となる。ここで， $v_x^2$  を  $2E/3m$  で置き換えている。

以上の扱いを物理的に見ると，(5.36) で右辺の被積分項の内，前節で見たように，第1項は電場によるドリフト電流を表し，第2項は温度分布による拡散電流を表している。これらをキャンセルすることでゼーベック係数が得られるわけであるが，従ってゼーベック効果とは拡散電流によって試料内に電荷分布が生じ，これによって発生した電場によるドリフト電流が拡散電流をちょうどキャンセルして定常状態を生じたものと見ることが出来る。

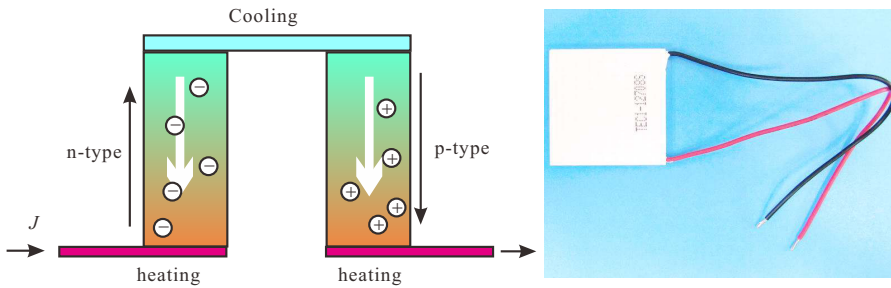


図 5.6 左：ペルチエ素子の概念図．p 型半導体と n 型半導体を交互に貼りあわせて電流を流し，キャリアの流れは一方方向として片方の端から反対方向へ熱を移動する．右：ペルチエ素子の写真．秋月電子通商通販サイトより．

マックスウェル分布近似をして， $\partial f_0/\partial E = -f_0/k_B T$  とし，更に  $\tau \propto E^s$  のような依存性を持つとすると，

$$S = -\frac{1}{eT} \left[ \frac{\langle \tau E \rangle_E}{\langle \tau \rangle_E} - E_F \right] = -\frac{1}{eT} \left[ \left( \frac{5}{2} + s \right) k_B T - E_F \right]. \quad (5.38)$$

これから， $S$  の温度依存性を測定することで， $E_F$  および  $s$  を測定できる．また，上記は電子の場合についての計算であるが，正孔については， $-e$  が  $+e$  に変化することから， $S$  の測定からキャリアの電荷符号もわかる．このマックスウェル分布近似の結果が，キャリア濃度その他の物質定数にほとんどよらず，主要な緩和機構に依存する  $\tau$  の  $E$  に対するべきと  $E_F$  で決まっていることに違和感を感じる方もいるかもしれない．が，上記のように，拡散電流とドリフト電流のバランスであると考えれば，両者の中に入っている物質定数を代表するパラメーターである拡散定数と移動度との間にはアインシュタインの関係 (5.13) が成立するから，これら物質定数が温度を残して両辺でキャンセルアウトすることが自然に理解される．キャリア濃度も両辺に入ってキャンセルし，これが「電流」がバランスの一方に入っているためにキャリア濃度が物理量として残るホール係数との違いになっている．また，ペルチエ効果，トムソン効果についても，境界条件が異なるだけで物理的起源は同じであり，ケルビンの関係式が成立することも当然である．

## 5.2.4 ペルチエ素子

ケルビンの関係式により，ペルチエ係数もキャリアの電荷符号によってその符号が変わる．これを利用して，n 型半導体，p 型半導体を伝導体として交互に貼り合わせ，片方で吸熱，反対側で発熱を起こすように，すなわち，一方的な熱流を生じさせるようにしたものをペルチエ素子と言う．

ペルチエ素子は，PC の CPU の冷却にファンと組み合わせて一時は良く使用された．また，古くから，寝室用の冷蔵庫など，騒音を極力抑えたい場所での冷却にも使用されている．

## 付録 4C：半導体の格子振動 (続き)

前回に続いて，3 次元結晶格子振動の例として，閃亜鉛鉱型結晶の格子振動について簡単に見ておく．

### 4C.2 閃亜鉛鉱型結晶の格子振動

単位胞内に 2 種類の原子がいる 3 次元的な結晶の例として閃亜鉛鉱型 (ZB) 結晶を取り上げ，格子振動を考える．ブラベー格子は fcc であるが，ZB 結晶構造は，fcc の「格子点」に 1 個の原子を置いた「fcc 結晶」を 2 種類の原子について，すなわち 2 つの格子定数  $a$  を共通とする結晶を考え，これを  $a(1/4, 1/4, 1/4)$  だけずらすことで得ることができる．この結晶の原子の変位ベクトルを  $\mathbf{u}_{\alpha, \mathbf{R}}$  で表す．ここで， $\alpha$  は，上記 fcc 結晶をそれぞれ「副格子」と考え，そのインデックス， $\mathbf{R}$  は格子点で，煩雑を避けるため格子点のインデックスは略している．格子運動エネルギーは

$$E_K = \sum_{\alpha, \mathbf{R}} \frac{1}{2} M_{\alpha} \dot{\mathbf{u}}_{\alpha, \mathbf{R}}^2 \quad (4C.6)$$

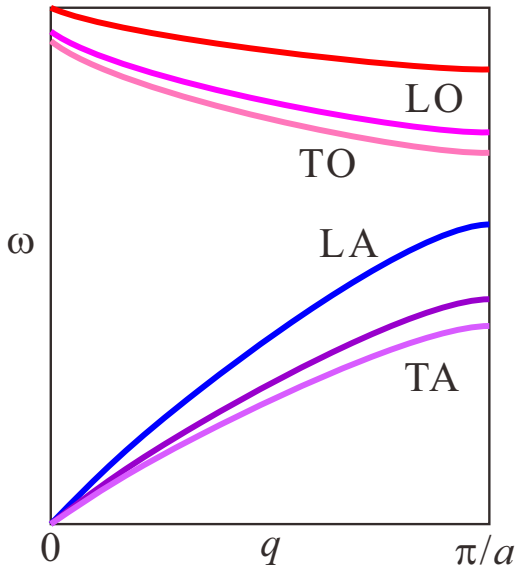


図 4C.3 閃亜鉛鉱型結晶の格子振動モードの分散模式図.

である．一方，ポテンシャルエネルギーは，各ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  を 2 次まで展開して

$$E_P = \sum_{\alpha\alpha', \mathbf{R}\mathbf{R}', jj'} u_{\alpha, \mathbf{R}}^j u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'} \frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha, \mathbf{R}}^j \partial u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'}}, \quad j = x, y, z \quad (4C.7)$$

とする．運動方程式は，例えば，ラグランジアン  $\mathcal{L} \equiv E_K - E_P$ ，一般座標  $q_k \equiv u_{\alpha, \mathbf{R}}^j$  を定義し，ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0$$

から得ることができ，(4C.6)，(4C.7) より，

$$M_\alpha \ddot{u}_{\alpha, \mathbf{R}}^j = - \sum_{\alpha', \mathbf{R}', j'} \frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha, \mathbf{R}}^j \partial u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'}} u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'} \equiv - \sum_{\alpha', \mathbf{R}'} \mathbf{C}_{\alpha\alpha', \mathbf{R}\mathbf{R}'} \mathbf{u}_{\alpha', \mathbf{R}'} \quad (4C.8)$$

となる．最右辺はテンソル-ベクトル形式で書いたものである．テンソル  $\mathbf{C}$  は「力の定数」に相当するもので，原子の組み合わせ  $\alpha\alpha'$ ，単位胞の相対位置  $\mathbf{R}'' = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$  だけによるため， $\mathbf{C}_{\alpha\alpha', \mathbf{R}\mathbf{R}} = \mathbf{C}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}'')$  とし，

$$M_\alpha \ddot{u}_{\alpha, \mathbf{R}}^j = - \sum_{\alpha, \mathbf{R}''} \mathbf{C}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}'') \mathbf{u}_{\alpha', \mathbf{R}+\mathbf{R}''} \quad (4C.9)$$

と変形できる．この方程式は， $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}'$  という格子点間シフトに対して不変であるから，Bloch 関数

$$\mathbf{u}_{\alpha, \mathbf{R}}(t) = \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q}, t) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\alpha) \quad (4C.10)$$

の形に解を書くことができる．時間依存性として， $\omega$  での振動を考え，

$$\mathbf{u}_{\alpha, \mathbf{r}}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q}, \omega) \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\alpha - \omega t)] \quad (4C.11)$$

と置く．これを (4C.9) へ代入して，

$$\omega^2 \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\alpha'} \left[ \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{C}_{\alpha\alpha'}^{jj'}(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \right] \mathbf{u}_{\alpha'}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \sum_{\alpha'} \mathbf{D}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \mathbf{u}_{\alpha'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (4C.12)$$

となる．

(4C.12) がトリビアルでない解を持つために，

$$|D_{\alpha\alpha'}^{jj'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{jj'}| = 0 \quad (4C.13)$$

である．分散関係は，これを数値的に解いて得られることになる．6 次方程式であり 6 個のモードを持つが，音響モード，光学モードがそれぞれ 3 個ずつになる．更にこれら 3 個はそれぞれ横波 (transverse) 2 個と縦波 (longitudinal) 1 個に分けることができる．名前付けとして，TA, LA, TO, LO の 4 つの命名が可能である．

## 付録 5A : 電流磁気効果

ドリフト電流に戻り, 磁束密度  $\mathbf{B}$  に対する応答を考える. 外力を, ローレンツ力  $\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$  とし, 式 (5.4) の緩和時間近似 (5.5) を考え,  $f_1 \equiv f - f_0$  とすると,

$$-\frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f_1}{\tau} \quad (\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}) \quad (5A.1)$$

である. 左辺第1項にかかる  $\partial f / \partial \mathbf{k}$  の  $f$  は  $f_0$  で近似しよう. 第2項は,  $dE = \mathbf{v} \cdot d\mathbf{p}$  より  $\partial f_0 / \partial \mathbf{k} = \hbar(\partial f_0 / \partial E)\mathbf{v}$  で,  $f_0$  の項は  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  と直交し, 消える. (磁場による力は  $\mathbf{v}$  と直交し, 仕事をしない.) 第2項は  $f_1$  の項まで拾うと

$$-e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial E} - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f_1}{\tau} \quad (5A.2)$$

を得る. ここで, 電場の次元を持つベクトル  $\mathbf{E}_a$  を

$$f_1 = e\tau(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_a) \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (5A.3)$$

を満たすもの, として導入する. これは, 図 3.3 に模式的に示したようにローレンツ力によってフェルミ球がシフトすると考え, シフト原因を電場の形で代表させたものである.

$$-\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_a + \frac{e\tau}{m}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{E}_a, \quad \therefore \mathbf{E} = \mathbf{E}_a - \frac{e\tau}{m^*} \mathbf{B} \times \mathbf{E}_a \quad (5A.4)$$

である. 方程式 (5A.4) の解は次で与えられる.

$$\mathbf{E}_a = \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \left[ \mathbf{E} + \frac{e\tau}{m^*} \mathbf{B} \times \mathbf{E} + \left( \frac{e\tau}{m^*} \right)^2 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{B} \right], \quad (5A.5)$$

$$\omega_c = \frac{e|\mathbf{B}|}{m^*} \quad (5A.6)$$

はサイクロトロン周波数である. 以上より,  $f_1$  は次のように与えられる.

$$f_1 = \frac{e\tau \mathbf{E}}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \cdot \left[ \mathbf{v} + \frac{e\tau}{m^*} \mathbf{v} \times \mathbf{B} + \left( \frac{e\tau}{m^*} \right)^2 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{B} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5A.7)$$

$\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ ,  $\mathbf{E} = (\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, 0)$  と与えられる場合を考える.  $v_z = 0$  より (5A.7) を使って  $f_1$  が

$$f_1 = e \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ v_x \left( \frac{\tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_x - \frac{\omega_c \tau^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_y \right) + v_y \left( \frac{\omega_c \tau^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_x + \frac{\tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_y \right) \right] \quad (5A.8)$$

と計算される. これから, 例えば  $j_x = -en\langle v_x \rangle$  を求めるには,  $f = f_0 + f_1$  で  $v_x$  の期待値を取る.  $f_0$  での期待値はゼロ, また  $v$  の奇関数成分は  $\mathbf{k}$  の積分により落ちるから,

$$j_x = 2 \int (-e)v_x f(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \frac{\tau v_x^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} (\mathcal{E}_x - (\omega_c \tau) \mathcal{E}_y) \frac{\partial f_0}{\partial E} d\mathbf{k}. \quad (5A.9)$$

(5A.9) の被積分関数は,  $v_x^2$  以外の部分は熱平衡時と同じで, 運動エネルギー  $E$  の関数である. 一般に関数  $\xi(E)$  に対して, 当分配則より

$$\int v_x^2 \xi(E) d\mathbf{k} = \frac{2}{3m^*} \int E \xi(E) d\mathbf{k}. \quad (5A.10)$$

半導体で高温域のマックスウェル近似  $f_0 = A \exp(-E/k_B T)$  を使い, 状態密度  $\mathcal{D}(E) = A_D E^{1/2}$  として, (5A.10) を使い,

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{f_0}{-k_B T}, \quad n = A_D \int_0^\infty f_0 E^{1/2} dE = \frac{2A_D}{3k_B T} \int_0^\infty E^{3/2} f_0 dE$$

である。これらを (5A.9) に適用すると、

$$j_x = \frac{ne^2}{m^*} \left[ \left\langle \frac{\tau}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E \mathcal{E}_x - \left\langle \frac{\omega_c\tau^2}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E \mathcal{E}_y \right], \quad (5A.11a)$$

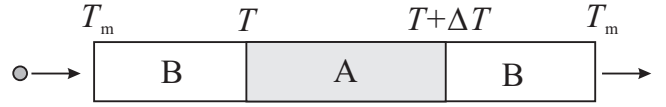
$$\equiv (ne^2/m^*)(A_l\mathcal{E}_x - A_t\mathcal{E}_y) \quad (A_l \text{ と } A_t \text{ の定義}) \quad (5A.11b)$$

が得られる。 $\langle \dots \rangle_E$  の意味は、(5.10) と同じである。  $j_y$  も同様に得られ、  $xy$  面内の伝導度テンソルが次のように求まる。

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m^*} \begin{pmatrix} A_l & -A_t \\ A_t & A_l \end{pmatrix} \mathbf{E}. \quad (5A.12)$$

## 付録 5B : ケルビンの関係式

右図のように、2種の金属 A, B の BAB 接合を考える。金属 B の両端を温度  $T_m$  に保ち、単位電荷を一方の端から他方の端へと準静的に移動する。2つの接合の温度を図のように  $T, T + \Delta T$  とする。また、両端の間の電圧を  $V_{AB}$  とする。



準静的仮定であることから熱力学第1, 第2法則より

$$V_{BA} + \Pi_{BA}(T) - \Pi_{BA}(T + \Delta T) + (\tau_B - \tau_A)\Delta T = 0$$

$$\frac{\Pi_{BA}(T)}{T} - \frac{\Pi_{BA}(T + \Delta T)}{T + \Delta T} + \frac{\tau_B - \tau_A}{T} \Delta T = 0$$

である。微分形として、

$$\frac{dV_{BA}}{dT} - \frac{d\Pi_{BA}}{dT} + \tau_B - \tau_A = 0, \quad \frac{d}{dT} \left( \frac{\Pi_{BA}}{T} \right) = \frac{\tau_B - \tau_A}{T}.$$

2番目の式より

$$\tau_B - \tau_A = T \frac{d}{dT} \left( \frac{\Pi_{BA}}{T} \right) = \frac{d\Pi_{BA}}{dT} - \frac{\Pi_{BA}}{T}$$

であるから、A, B の順番を入れ替えれば、

$$\therefore S_{AB} = \frac{\Pi_{AB}}{T}, \quad \frac{dS_{AB}}{dT} = \frac{\tau_A - \tau_B}{T} \quad (5B.1)$$

が得られる。

## 参考文献

- [1] M. Lundstrom “Fundamentals of carrier transport” 2nd ed. (Cambridge, 2000).
- [2] K. Fletcher, P.N. Butcher, J. Phys. C **5**, 212- 224 (1972).



## 第6章 ホモ・ヘテロ接合

以上、半導体の一般的なバルクの性質について見てきた。以下では空間構造を持つ半導体中の物理現象，素子としての動作などについて見ていこう。

### 6.1 pn ホモ接合の電気・光学特性

pn 接合は，半導体がデバイスとして電子回路中で機能を発揮できる，嚆矢となったものである。なぜこのようなものが考えられたのか，については，[1] などをご覧いただきたい (例により絶版であるが)。

#### 6.1.1 平衡状態

文字通り p 型半導体と n 型半導体を接合したものが pn 接合で，ここでは p 型と n 型に同種の半導体を使うホモ接合のみを考える。n 型半導体には電子が多量に存在し，p 型は正孔がそうであるから，エントロピー  $S$  を増加させよう，という変化の動力から，電子が p 型へ，正孔が n 型へ，という拡散が考えられる。ところが，拡散により p 型半導体が負に，n 型半導体が正に帯電して接合界面に正負の電気二重層 (電荷空乏層) が生じ，電場が発生するため，拡散は内部エネルギー  $U$  を増加させる。平衡状態では自由エネルギー  $U - TS$  が極小値を取るように二重層幅が決まる。

急峻接合 (図 6.1) で，空乏層中のキャリアは非常に少ない ( $n_i$  程度)，という簡単なモデルを考える。空乏層によって pn 半導体間にかかる電圧を  $V_{bi}$  とすると，n 層から p 層に電子 1 個が移動する際のエネルギー増加は  $eV_{bi}$  である。式 (3.19) で見たように，n 層中の電子濃度は  $n_n \sim N_D$ ，p 層中では半導体方程式より  $n_p \sim n_i^2/N_A$  である。今，サイト数  $N$  の箱 2 個に  $N_{1,2}$  個の電子をそれぞれ入れた場合の場合の数は  $W = {}_N C_{N_1} {}_N C_{N_2}$  で，数の変化は箱間の電子のやり取りのみ考えると， $dN_1 = -dN_2$  で， $N \gg N_{1,2}$  の場合， $d(\ln W) \approx \ln(N_2/N_1)dN_1$  である (気体の混合エントロピー)。これを上記 n 層，p 層に適用し ( $dN_1 = -1$ ， $N_1 = n_n$ ， $N_2 = n_p$ ，平衡状態で自由エネルギーが極値を取る条件  $d(U - TS)/dn_n = 0$  より，

$$eV_{bi} = k_B T \ln \frac{n_n}{n_p} \sim k_B T \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2} = E_g - k_B T \ln \frac{N_c N_v}{N_D N_A} \quad (6.1)$$

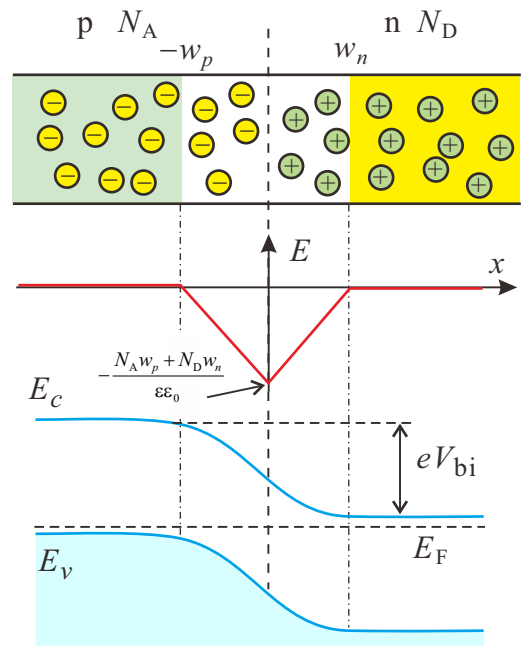


図 6.1 (a) 急峻な pn 接合の模式図. (b) 空乏層領域にかかる電場  $E(x)$ .  $x$  の正方向を電場の正の向きに取った. (c) pn 接合のバンドダイアグラム.

が得られる ( $n_n \sim N_D$ ,  $p_p \sim N_A$  とした).

平衡状態で化学ポテンシャル (フェルミ準位) が接合を通して一定で空間座標によらないこと, 接合より遠くでは  $p$ ,  $n$  それぞれバルクと同じ状態になっているはずであることから図 6.1(c) のようなバンド図が描ける. 空乏層厚を図のように, それぞれ  $w_p$ ,  $w_n$  とすると, 空乏層内電場  $E(x)$  は

$$-\epsilon\epsilon_0 E(x) = N_A(2x + w_p) + N_D w_n \quad (x < 0), \quad N_A w_p + N_D(w_n - 2x) \quad (x \geq 0) \quad (6.2)$$

である ( $\epsilon$  は比誘電率) から,  $V_{bi}$  は次のように表される.

$$V_{bi} = \int_{-w_p}^{w_n} (-E(x)) dx = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} (N_D + N_A) w_n w_p = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} (N_D + N_A) \frac{N_D}{N_A} w_n^2 \quad \because w_n N_D = w_p N_A. \quad (6.3)$$

式 (6.1), (6.3) よりドーブ濃度と空乏層厚の関係が得られる.

## 6.1.2 電流電圧特性

以上のように, 平衡状態の pn 接合はエントロピーと内部エネルギーとの競合によって接合を流れる電流がゼロとなっているので, このバランスを崩すことで電流が流れる状態が生じる. エントロピーを変化させる代表的手段が**少数キャリア注入** (injection of minority carriers) であり, 一方内部エネルギーは外部電圧で変化させることができる. 少数キャリア注入は, 文字通り外的要因によってダイナミックに少数キャリア数を増やすことであり, 少数キャリア注入が生じている時は, 半導体方程式  $np = n_i^2$  はそのままでは成立しなくなる. このような場合でも, 準フェルミ準位を導入することで, 電子, 正孔を準熱平衡的に扱い, 分布関数から Boltzmann 方程式を経由してキャリア流を考えることができる. 半導体方程式も変形して考えることができる. また, 「原因」として外部電圧を与えた場合でも, 電流によって少数キャリア注入が生じる. ここでは, 外部電圧を与えた場合にどのように電流が流れるかを考える.

まず外部電圧  $V$  の影響について, 以下のように簡単なモデルを考える. 空乏層以外での電圧降下を無視して  $V$  はすべて空乏層にかかるとする. また, 接合より十分離れた領域では電流は多数キャリアにより運ばれ, 多数キャリア濃度は十分高く電流が流れていても化学ポテンシャルの空間変化は無視できるものとする. 空乏層近傍では上記内部エネルギーとエントロピーの平衡が破れているため, キャリアの流れが発生する.  $V$  が  $V_{bi}$  と逆方向にかかった場合,  $p$ ,  $n$  各層の多数キャリアは, 反対側の層へ流れ込み, 空乏層端に少数キャリアの電気的な注入現象が生じる. 注入された少数キャリアは空乏層から離れる方向に拡散して行くが, 反対符号の電荷を持つ多数キャリアと再結合を起こして消滅する. 拡散再結合過程により各層中で少数キャリア濃度は指数関数的に変化する.

上記モデルで,  $x$  座標一定の (ネットな流れのない)  $yz$  平面内で各キャリア内では相互作用のため準熱平衡が成立していると考え, キャリア種と  $x$  座標に依存する準フェルミ準位,  $\mu_e(x)$  (電子),  $\mu_h(x)$  (正孔) を次のように導入する.

$$n(x) = N_c \exp[-(E_c(x) - \mu_e(x))/k_B T], \quad p(x) = N_v \exp[-(\mu_h(x) - E_v(x))/k_B T], \quad (6.4a)$$

$$i.e., \quad \mu_e(x) = E_c(x) + k_B T \ln \frac{n(x)}{N_c}, \quad \mu_h(x) = E_v(x) - k_B T \ln \frac{p(x)}{N_v}. \quad (6.4b)$$

$p$ ,  $n$  各層内での少数キャリア濃度  $n_p$ ,  $p_n$  は, 次の拡散方程式に従って変化する.

$$D_e \frac{d^2 n_p}{dx^2} = \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_e} - G(x), \quad D_h \frac{d^2 p_n}{dx^2} = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_h} - G(x). \quad (6.5)$$

$G(x)$  は光励起などによる少数キャリア生成を表すが, 今は暗状態を考え,  $G(x) = 0$  とする.  $n_{p0}$ ,  $p_{n0}$  はバルク領域での少数キャリア濃度,  $D_{e,h}$ ,  $\tau_{e,h}$  はそれぞれ電子 ( $e$ ), 正孔 ( $h$ ) の拡散係数, 拡散時間 (特徴的寿命) であり, これらにより電子, 正孔についての少数キャリア拡散長は

$$L_e = \sqrt{D_e \tau_e}, \quad L_h = \sqrt{D_h \tau_h} \quad (6.6)$$

と定義される.  $x > w_n$  で  $p_n$ ,  $x < -w_p$  で  $n_p$  について, (6.5) の境界条件  $n_p \rightarrow n_{p0}$  ( $x \rightarrow -\infty$ ),  $p_n \rightarrow p_{n0}$  ( $x \rightarrow \infty$ ) を満たす解として,

$$n_p(x) = \delta n_0 \exp\left(\frac{x + w_p}{L_e}\right) + n_{p0}, \quad p_n(x) = \delta p_0 \exp\left(-\frac{x - w_n}{L_h}\right) + p_{n0} \quad (6.7)$$



が得られる。  $\delta n_0, \delta p_0$  は、空乏層の端での少数キャリア注入濃度である。(6.4b) より、拡散領域で (6.7) で  $n_{p0}, p_{n0}$  の項が無視できる場合、準フェルミ準位は

$$\mu_e(x) = E_c + k_B T \left[ \frac{x + w_p}{L_e} + \ln \frac{\delta n_0}{N_c} \right], \quad \mu_h(x) = E_v - k_B T \left[ \frac{x - w_n}{L_h} + \ln \frac{\delta p_0}{N_v} \right] \quad (6.8)$$

と、距離に対して線形に変化する。これらは、  $x \rightarrow \pm\infty$  でそれぞれバルクの  $E_F^{(p),(n)}$  に一致し、それらに  $V$  の電圧がかかっている ( $E_F^{(p)} - E_F^{(n)} = eV$ ) ので、概形を図 6.2(a) のようにまとめることができる。

空乏層内ではキャリアの動きは速く、電子正孔の再結合はなく、各キャリアによる電流は注入少数キャリアの拡散で律速されるとする。すると、電子正孔によるそれぞれの電流の連続により、pn 接合に流れる全電流密度は空乏層のそれぞれの端での少数キャリア拡散電流密度の和で表される。式 (6.7) と図 6.2(a) の  $\mu_e(x)$  より

$$\delta n_0 + n_{p0} = n(-w_p) = n_{p0} \exp \frac{eV}{k_B T}, \quad \delta p_0 + p_{n0} = p(w_n) = p_{n0} \exp \frac{eV}{k_B T} \quad (6.9)$$

であるから、拡散過程 (6.5) における  $x = -w_p$  での電子拡散電流密度は、

$$j_e = eD_e \left. \frac{dn_p}{dx} \right|_{-w_p} = \frac{eD_e \delta n_0}{L_e} = \frac{eD_e}{L_e} n_{p0} \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right] \quad (6.10)$$

である。正孔も同様に計算でき、全電流密度は

$$j = e \left[ \frac{D_e}{L_e} n_{p0} + \frac{D_h}{L_h} p_{n0} \right] \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right] \approx en_i^2 \left[ \frac{D_e}{L_e N_A} + \frac{D_h}{L_h N_D} \right] \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right] \quad (6.11)$$

と表すことができる。

式 (6.11) は pn 接合の Shockley 理論の最も基本的なものである。現実の pn 接合は、はるかに複雑で、特に重要なのは、直列抵抗と空乏層内での再結合、ギャップ内準位を介したトンネル伝導 (並列オーミック抵抗) である。これらを考慮すると、図 6.2(b) のように Shockley 理論とはかなり異なる特性が得られる。

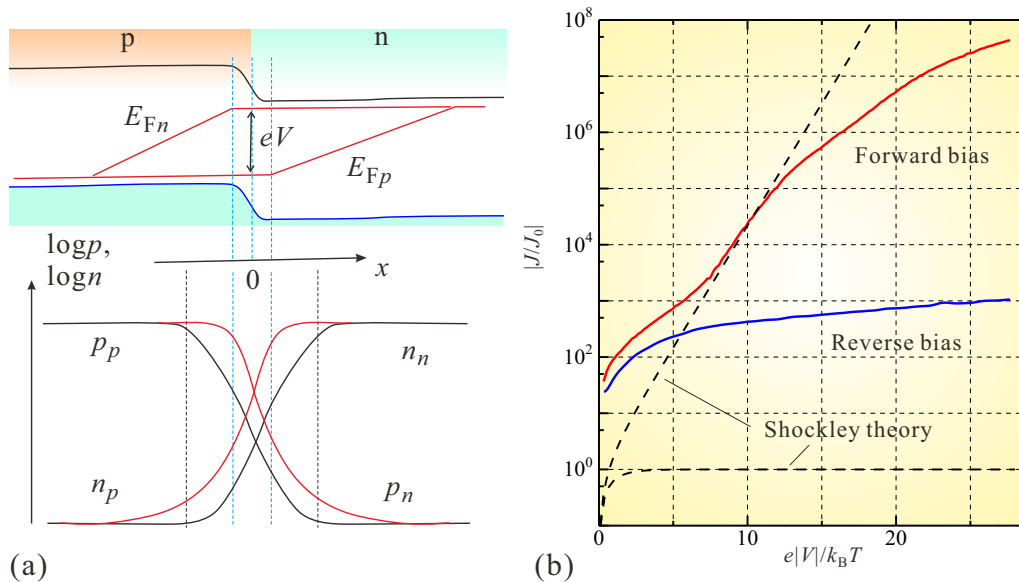


図 6.2 (a) 上: pn 接合に外部電圧  $V$  がかった場合の準フェルミ準位, 下: キャリア濃度の空間変化 (模式図). (b) 破線: Shockley 理論 (式 (6.11)) による電流電圧特性. 規格化定数  $J_0$  は、式 (6.11) の最後の括弧内以外の部分. 実線: 直列抵抗, 空乏層内再結合, 局在準位トンネルを考慮した電流電圧特性. 挿入図は (6.11) をリニアプロットしたもの.

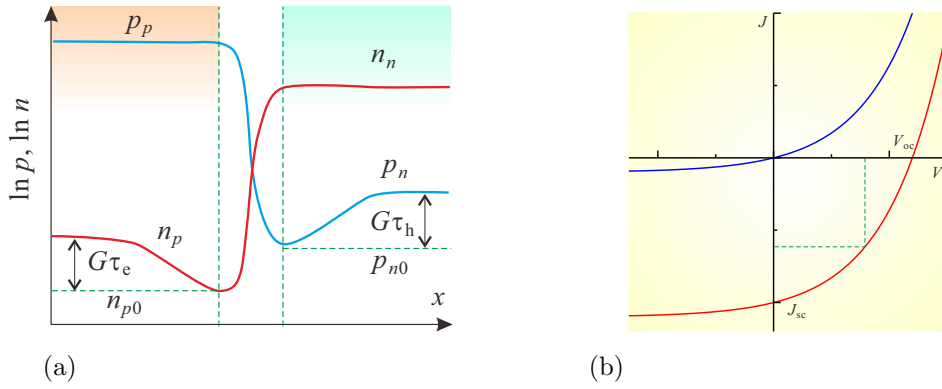


図 6.3 (a) 照射により少数キャリア生成  $G$  がある場合の pn 接合付近のキャリア濃度分布を模式的に示した。垂直の破線で挟んだ領域が空乏層。バイアス条件はほぼ短絡  $V = 0$  としている。(b) 暗状態と照射下での pn 接合の IV 特性を模式的に示したもの。

### 6.1.3 pn 接合の光応答

照射下での pn 接合を考えるために、拡散方程式 (6.5) で少数キャリア生成  $G(x)$  が  $x$  に依らず、一様 (一定値  $G$ ) であるとする。  $n_p(x)$ ,  $p_n(x)$  について、前節と同様に境界条件  $x \rightarrow -\infty$  で  $n_p \rightarrow n_{p0} + G\tau_e$ ,  $x \rightarrow \infty$  で  $p_n \rightarrow p_{n0} + G\tau_h$  を満たす解は

$$n_p(x) = n_{p0} + G\tau_e + \left[ n_{p0} \left( \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right) - G\tau_e \right] \exp\left(\frac{x + w_p}{L_e}\right), \quad (6.12a)$$

$$p_n(x) = p_{n0} + G\tau_h + \left[ p_{n0} \left( \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right) - G\tau_h \right] \exp\left(-\frac{x - w_n}{L_h}\right) \quad (6.12b)$$

と与えられる。  $V = 0$  に対するこの解の様子を図 6.3(a) に示した。

これより、暗状態の場合と同様に電流密度を求めると、(6.11) の括弧前についている係数を  $j_0$  として、

$$j = j_0 \left[ \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right] - eG(L_e + L_h), \quad (6.13)$$

すなわち、この簡単なモデルからは暗状態の特性が  $j_{sc} \equiv G(\tau_e + \tau_h)$  だけ負電流方向にシフトした特性が得られる。図 6.3(b) にその様子を示した。現実の太陽電池はこれ程簡単ではないが、照射により負電流方向に特性がシフトすることは同じである。そこで、照射によりシフトする電流  $|J_{sc}|$  を短絡光電流、電流  $J$  をゼロ (太陽電池の両端を開放状態) にした場合に素子両端に発生する電圧  $V_{oc}$  を開放端電圧と呼び、各々の素子のパラメーターとする。もちろん、これらは、照射する光強度やスペクトルに依存する。

図 6.3(b) の特性で、外部に電気エネルギーが取り出せるのは第 4 象限のバイアス条件であり、その電力は電流  $J$ , 電圧  $V$  に対して  $W = |JV|$  である。pn 接合の特性から、第 4 象限では  $|J| \leq |J_{sc}|$ ,  $|V| \leq |V_{oc}|$  であるから、 $W \leq |J_{sc}V_{oc}|$  である。そこで、第 4 象限内で最大の  $W$  を与える  $J$ ,  $V$  を  $J_{max}$ ,  $V_{max}$  として

$$FF \equiv \frac{J_{max}V_{max}}{J_{sc}V_{oc}} \leq 1 \quad (6.14)$$

を充填因子 (充填率, あるいは曲線因子 filling factor) と呼ぶ。IV 特性のスクエアネスが良いほど  $FF$  は高い。  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $FF$  は、太陽電池を現象論的に議論したり、等価回路モデルを作ったりする上で便利なパラメーターである。理想的な場合 (6.13) からは、

$$|J_{sc}| = eG(L_e + L_h), \quad V_{oc} = \frac{k_B T}{e} \ln \left[ \frac{eG(\tau_e + \tau_h)}{j_0} + 1 \right] \quad (6.15)$$

である。

以上は、太陽電池などの光電変換動作の基本になるものである。太陽電池については、講師の執筆記事 [2] などを参照のこと。

## 6.2 pn 接合トランジスタ



左から John Bardeen, William Shockley, Walter Brattain. 1948 年頃. Bell 研究所にて.

William Shockley という一人の天才が発明した 2 種類の半導体デバイスについて見ていくことにしよう. これらのデバイス, そして彼が始めた研究開発のスタイルは, 大げさでなく人類の生活を変化させ, 現在もそれは続いている.

半導体トランジスタ動作の最初の発見について「ベル研の研究者は, これが何の役に立つかなどということは考えず, ゲルマニウムの表面に針を立てて何が起るかを虚心に研究していた. そして偶然トランジスタ動作を発見した」というような書き方をした解説を見たことがあるが, これはかなり実際とは異なる. 直接の発見者である Brattain と Bardeen は, チームリーダーの Shockley の下, 明確に「固体のみで構成する増幅素子」を目指して半導体の表面準位の研究をしていた. この実験からいきなり増幅効果が現れる, とは考えていなかったようではあるが, 実験結果を見て「信号増幅効果がある」と気づいたのも, このような目的

的研究をしていたからであろうと考えられる.

この実験結果が出たときは 1947 年のクリスマス少し前 (12/16 と言われる. 特許出願は 23 日) で Shockley 自身は出張中で不在であり, そのためか, 報告を聞いても不機嫌であったそうである. また, Brattain と Bardeen が偶然に発見したトランジスタ (Transistor, Transfer と Resistor を合成した造語) は点接触型と呼ばれるもので, 極めて不安定かつ素子の再現性に乏しいもので, 実用には大きな障害があると思われた. 彼らの発見が, 発明者魂に火をつけたのか, 理論家でもあった Shockley は「再現性のある増幅素子」を目指して自ら思索に没頭し, 接合型トランジスタに関する天才的閃きを得たのは同年大晦日と言われる. 翌年の 1/23 には早くも理論を完成させ, 1 年後には実験の実現に漕ぎ着けている. 「構造敏感」と言われた半導体の性質を利用し, 人工的な構造を固体中に作り出すことで新しい機能を生み出し, また, 新しい物理学の舞台を創造する, 半導体物理学の輝かしい夜明けである [3].

### 6.2.1 接合型トランジスタの構造

最も基本的な接合型トランジスタ (バイポーラトランジスタとも呼ばれる. Bipolar Junction Transistor, BJT) は図 6.4 のように pn 接合を近接させて 2 つ並べた構造をしており, npn 型と pnp 型の 2 種類がある. 中央の層からも電極を引き出すため, 端子が 3 つある 3 端子素子である. 両端の電極をコレクタ (Collector, C), エミッタ (Emitter, E) と呼び, 中央電極をベース (Base, B) と呼ぶ. ごく初期にはベースとなる基材の両面から, 基材のドーパントの逆となるドーパント金属を合金化することで作製していた. やがてリソグラフィーと熱拡散, あるいはイオン打ち込みを組み合わせて作製するようになったが, ベースという名称はそのまま使われている.

トランジスタとしての動作をさせるには, ベースは非常に薄く作る必要がある. 少なくとも前節で見た少数キャリア拡散長より薄く作らなければならない. これは大変重要な点である.

回路図は図 6.4 のように「ベース」に 2 つの電極が接続されている様子を象形的に描いたものである. 丸囲いは省略する場合も多い. pnp と npn は矢印の向きで区別する. これはベースに少数キャリアを注入している際の電流の向きを示している. 以下, npn 型を考えることとし, 各端子の電流の向きを図のように決めておくことにする.

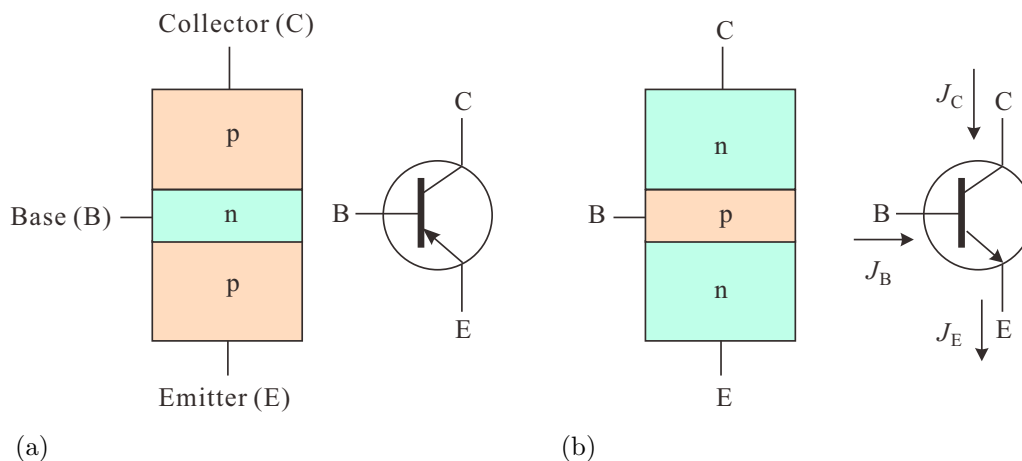


図 6.4 (a)pnp 型トランジスタの構造と回路図. 端子名. (b)nnp 型トランジスタの構造と回路図.

## 6.2.2 接合型トランジスタの電流増幅特性

B-C に定電圧電源をつないでコレクタに流れる電流  $J_C$  を見ると (都合上符号を反転した), B-C だけ取り上げれば pn ダイオードであるから, 既に見てきたような整流特性を示している ( $J_E = 0$  の場合). ここへ, エミッタに定電流電源を接続し, 電流を流し出す (電子を押し込む) と図 6.5(a) のように,  $V_{BC} - J_C$  曲線は, 負電流側へシフトする.

これは光が当たった時の太陽電池の特性図 2.3(b) とそっくりである点に注意しよう. 見た目が似ているというだけでなく, 物理的にほぼ同じ状況が作り出されている. すなわち, 太陽電池では光照射によって少数キャリアを直接生成 (注入しているのに対し, トランジスタのこの構成では, ベース-コレクタの pn 接合に対して, もうひとつの pn 接合, エミッタ-ベースを通して少数キャリア (電子) が注入されている.

再度接合系に生じている物理現象を説明すると次のようになる. 伝導帯, 価電子帯で生じていることは定性的には対称的であるので, 伝導帯での現象を中心とする. npn 接合の B(p)-C(n) 間に負の電圧 (p 側にマイナス) を印可すると逆バイアスであって接合面を超えての拡散は抑えられる. 一方, p 側の少数キャリアである電子の (逆向きの) 拡散は, ゼロバイアスでも接合に達すれば  $V_{bi}$  によって n 層へすべて流れ出たのでバイアスで増加せず, 絶対量も小さい (ゼロバイアスで n 側からの拡散と釣り合っていた量). すなわち, 逆バイアスに対して流れる電流は n 層からの拡散電流の過剰抑制分であり, 小さく, バイアス電圧の増加に対して抑制が終了することで飽和する. ここで, B-C 接合の反対側にある np 接合 (E-B 接合) に順方向電圧を加える. これはもちろん, B に金属の接合 (オーミック接合) が付いていて電位を独立に制御できることから可能になっている. 順方向電圧は拡散電流を抑えていた作り付け電圧を緩和するため電子が拡散で E から B へ流れ込む. これは E(n) 側では電子が多数キャリアであるため, 文字通り多数流れ込み接合周辺のベース側の少数キャリア (電子) 濃度を上昇させる. この濃度上昇が少数キャリアの注入 (minority carrier injection) と呼ばれるものである. 注入された少数キャリアは B 中へ拡散し, 何らかの過程を通して多数キャリアと対消滅する (全体の電流が消滅するわけではない). その距離が少数キャリア拡散長 (minority carrier diffusion length) である. B へ注入された電子は拡散流で濃度勾配によって流れているので, B 電位を与えているオーミック電極に流れていくわけではない (一部再結合して電極へ流れる). B が少数キャリア拡散長より十分薄いと拡散流は反対側の pn 接合 (B-C 接合) に到達して C に流れ出し, 逆方向電流となる. 図 6.6(a) で逆方向に流れている電流 (図の  $J_C$  の符号では正の方向) がこれであり, 注入されている少数キャリアで電流量は律速されるから  $V_{BC}$  を変化させても, 順方向電流が流れださない限りほとんど変化しない. これは, 太陽電池から流れ出す電流が光照射量 (少数キャリア注入量) で決まっているのと同じである.

以上を使って増幅回路を考える. 図 6.6(c) のように C-E 間を電圧でバイアスする. B にどれだけの少数キャリアを注入するかは E-B のバイアス,  $V_{BE}$  によって決まる. 従って,  $J_C$  は  $V_{BE}$  に対して図 6.6(a) のように非常に鋭敏に変化する. ただし, このままでは非線形性が極めて強く, 信号増幅素子としてはほとんど使い物にならない.

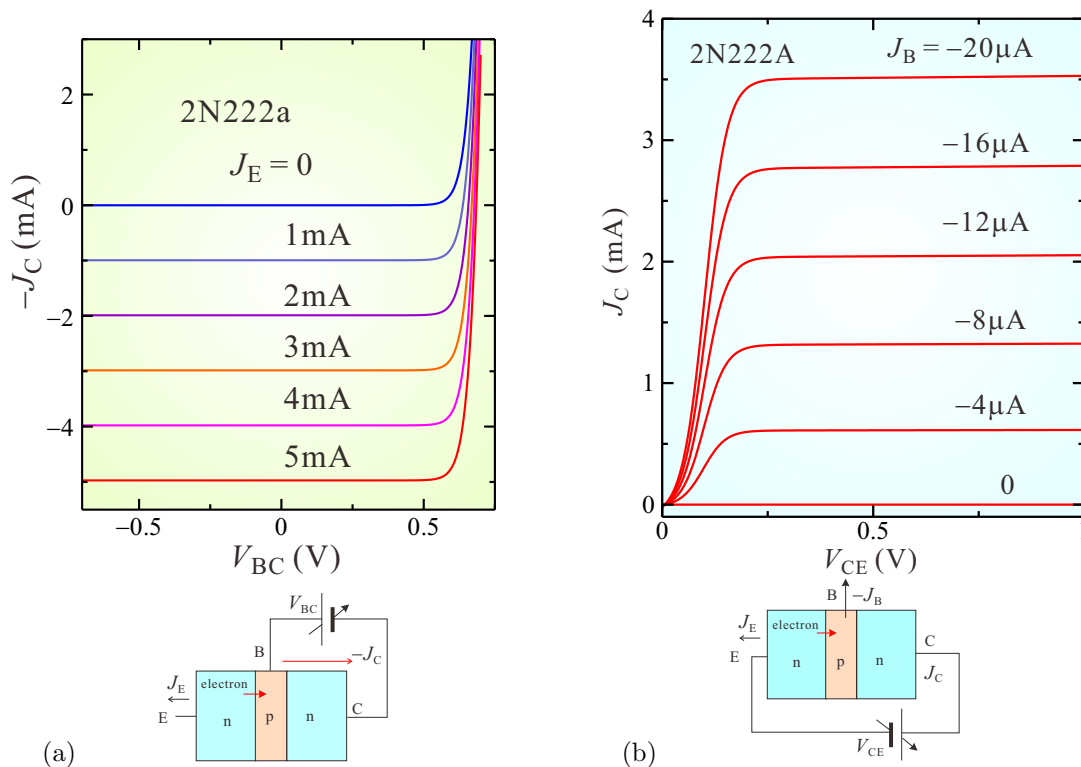


図 6.5 (a) 下図に示したような実験回路で、 $V_{BC}$  を変化させてコレクタに流れる電流 (の符号を反転したものを) を測定した。ベース-コレクタのダイオード特性。エミッタからベースへ電子を注入するに従い、太陽電池の光起電力に類似の特性となる。(b) コレクタ-エミッタに電圧  $V_{CE}$  を加えても、接合の片側が逆方向バイアスとなるため電流はほとんど流れない。が、ベースを電流バイアスすると、電流値に応じてコレクタ電流が飽和する形で電流が流れる。

注入キャリアの一部は再結合によって多数キャリア電流になり、一部は C に吸収されずに B 電極に流れ出るから、B 電流  $J_B$  は  $V_{BE}$  に対して  $J_C$  と係数が異なるが同じ特性で変化するはずである (何しろ同じ np 接合である)。すなわち、 $J_C$  は  $J_B$  に比例し、

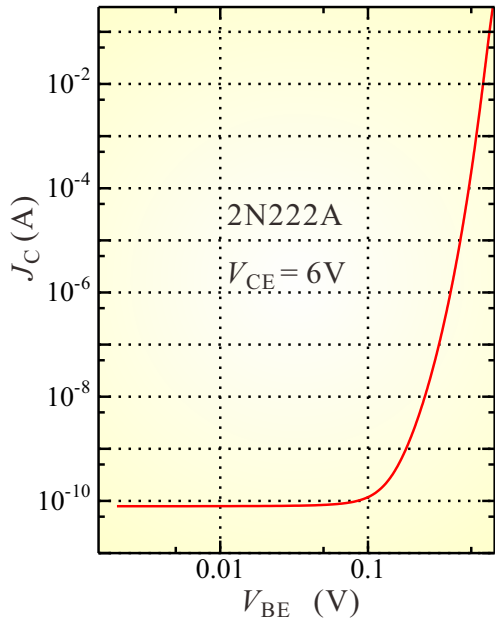
$$J_C = h_{FE} J_B \quad (6.16)$$

と書けると考えられる。回路シミュレーターの上では、図 6.6(b) のように、良い直線性を示していることがわかる。 $h_{FE}$  は電流増幅率と呼ばれ、また、このことから「バイポーラトランジスタは電流増幅デバイス」という言い方がなされる。実際、そのように扱って回路上は問題にならないが、物理的には以上のような意味であるので、「小さな電流が大きな電流を引き込む」というような因果関係はない。小さな電流をモニタしながら電圧を通して大きな電流を制御している、と見る方が物理的には実際に近い。

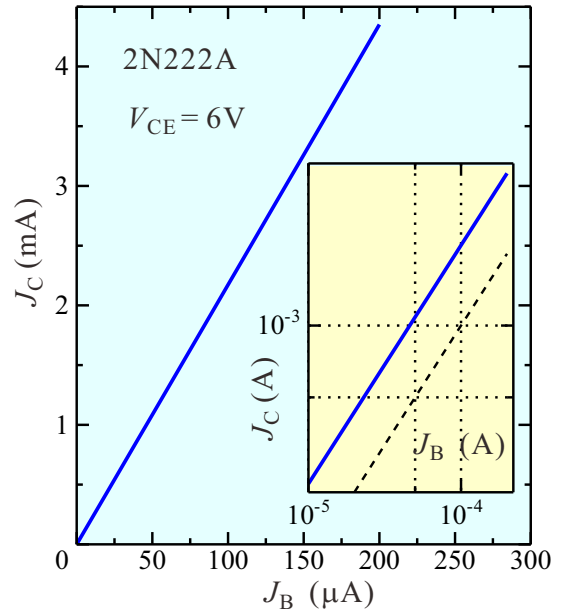
電気回路的に重要なことは、電流増幅デバイスであるため、電圧バイアスは入力インピーダンスが低くなる領域にセットされるといこうことである。特に高周波回路では伝送路の特性インピーダンスとのマッチングに注意を要する。また、バイアスの取り方にもよるが、増幅器として使用する場合は、ベース-エミッタ間の電圧は注入電流を制御しやすいダイオードの閾値付近に来ることになる。

### 6.3 電場効果トランジスタ I

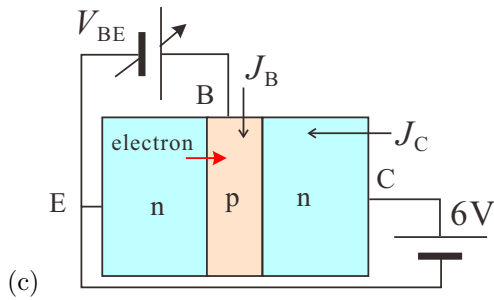
電場効果トランジスタ (Field Effect Transistor, FET) は、BJT と比べても極めて広範囲で使用されており、半導体デバイスの中でも主力と呼べるものである。動作原理は BJT と比べても簡単であり、概念的な発明は BJT よ



(a)



(b)



(c)

図 6.6 (c) のような実験回路で測定したトランジスタの特性. (a) コレクタ-エミッタをバイアスして、ベース-エミッタ間を順方向にバイアスしていくと、 $V_{BE}$  に対して非常に敏感に  $J_C$  が変化する. (b) これを  $J_B$  と  $J_C$  間の関係と考えると、(同一ダイオードの特性を見ているのと同じであるから) 線形性が良くなる. 挿入図は両対数プロットで、破線は傾き 1 を表している. LTSpice の結果であり、実際にはシミュレーターに比べて直線性は落ちる.

りも先である\*1が、FET の動作のためには BJT よりも更に高度な半導体テクノロジーを要したため、その実現は BJT よりも遅れることとなった. また、現在の中心的な構造は、金属-酸化物-半導体 (Metal-Oxide-Semiconductor, MOS) 型であるが、pn 接合を使用した接合型 FET (Junction FET, JFET) が先に実用化された.

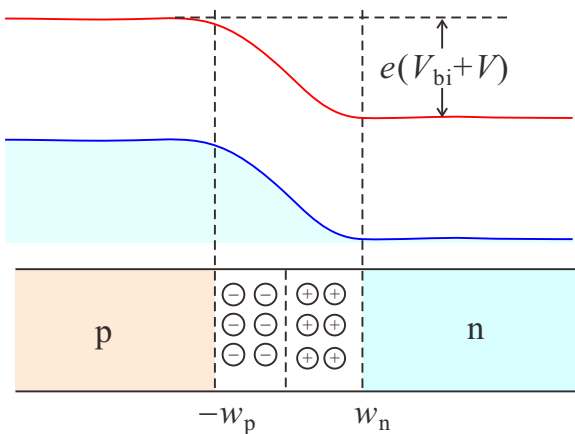


図 6.7 pn 接合の簡単なモデル

### 6.3.1 pn 接合と空乏層

JFET の動作を理解するには、pn 接合にかかる逆方向電圧と空乏領域との関係を見ておく必要がある。pn 接合を図 6.7 のように置き、 $x$  座標に依存する電位を  $\phi(x)$  とする。ポワソン方程式は

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -aq(x) \quad (a \equiv (\epsilon\epsilon_0)^{-1}) \quad (6.17)$$

と書くことができる。空乏領域の電荷分布に関して 6.1 節と同じ簡単な仮定をすると、

$$\begin{cases} q = -eN_A & (-w_p \leq x \leq 0), \\ q = eN_D & (0 \leq x \leq w_n) \end{cases} \quad (6.18)$$

である。 $\phi(-\infty) = 0$  としよう。接合に外部から逆方向電圧  $V$  がかかっているとすると空乏層の端での境界条件は

$$\begin{aligned} \phi(-w_p) = 0, \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{-w_p} &= 0, \\ \phi(w_n) = V + V_{bi}, \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{w_n} &= 0 \end{aligned} \quad (6.19)$$

である。積分すると

$$\phi(x) = \begin{cases} (aeN_A/2)(x+w_p)^2 & (-w_p \leq x \leq 0), \\ V + V_{bi} - (aeN_D/2)(x-w_n)^2 & (0 \leq x \leq w_n) \end{cases} \quad (6.20)$$

である。 $x = 0$  での接続の境界条件

$$\lim_{x \rightarrow +0} \phi = \lim_{x \rightarrow -0} \phi, \quad \lim_{x \rightarrow +0} (d\phi/dx) = \lim_{x \rightarrow -0} (d\phi/dx) \quad (6.21)$$

より、空乏領域の幅  $w_p$ ,  $w_n$  は次のように求められる。

$$w_p = \left[ \frac{2\epsilon_0\epsilon(V + V_{bi})}{eN_A} \cdot \frac{N_D}{N_D + N_A} \right]^{1/2}, \quad w_n = \left[ \frac{2\epsilon_0\epsilon(V + V_{bi})}{eN_D} \cdot \frac{N_A}{N_D + N_A} \right]^{1/2} \quad (6.22)$$

$$w_d = w_p + w_n = \left[ \frac{2\epsilon_0\epsilon(V + V_{bi})}{e} \cdot \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right]^{1/2}. \quad (6.23)$$

p<sup>+</sup>n 構造、すなわち  $N_A \gg N_D$  であれば次のように近似される。

$$w_d \approx \left[ \frac{2\epsilon_0\epsilon(V + V_{bi})}{eN_D} \right]^{1/2} \approx w_n. \quad (6.24)$$

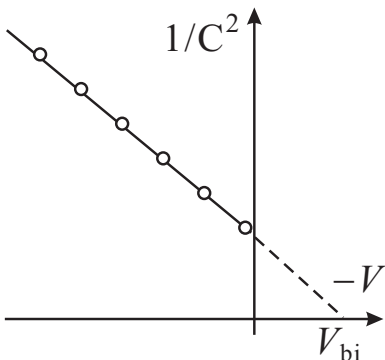
すなわち、空乏領域は加えた逆方向電圧に造り付けポテンシャルを加えた量の平方根に比例する形で広がる。

この時、空乏層内に蓄積された(両領域で相殺するので片側領域の)電荷は、単位面積当たり  $Q = eN_D w_d$  であるから、有効静電容量(微分静電容量)は

$$\frac{dQ}{dV} = eN_D \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon}{eN_D}} \frac{1}{2\sqrt{V + V_{bi}}} = \sqrt{\frac{\epsilon_0\epsilon N_D}{2}} (V + V_{bi})^{-1/2} \quad (6.25)$$

である。

この関係式は、pn 接合の評価に良く使用される。すなわち、逆方向電圧  $V$  を加えながら小振幅の高周波を pn 接合に加えて位相遅れから微分静電容量  $C(V)$  を測定して左図のようにプロットする(図では便宜のため横軸を  $-V$  とした)と、 $N_D$  が空間的に一様であるとするとデータは直線上に並ぶ。



\*1 Shockley は BJT に先立ち FET の特許を書いている。ただ、これについては類似のアイデアが多数あり、BJT ほどの独創性はない。

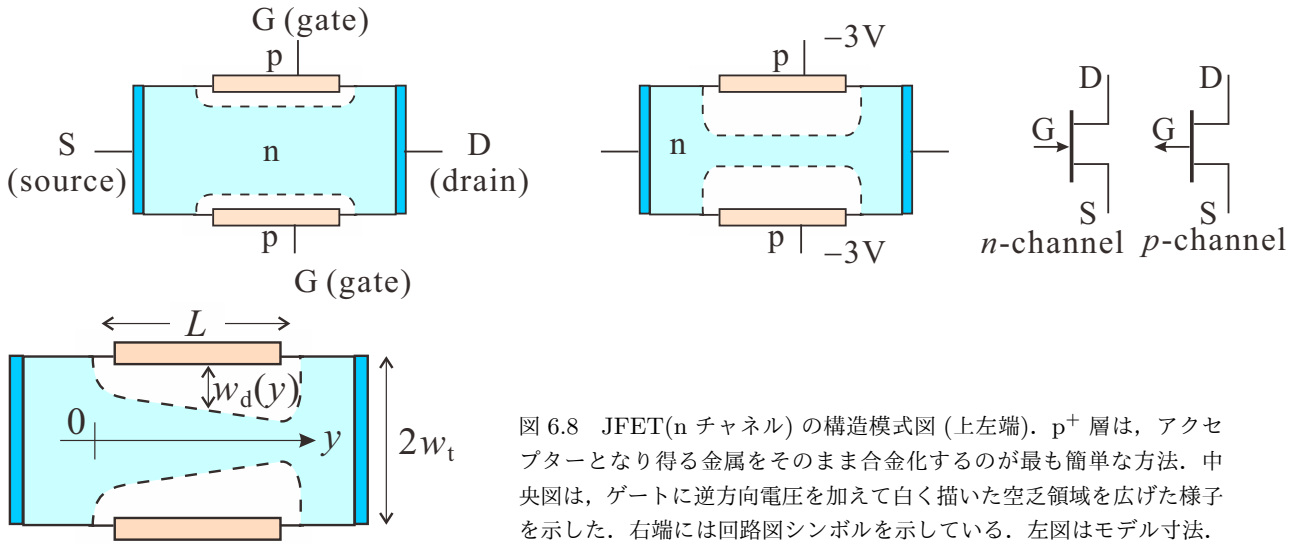


図 6.8 JFET(n チャンネル) の構造模式図 (上左端).  $p^+$  層は, アクセプターとなり得る金属をそのまま合金化するのが最も簡単な方法. 中央図は, ゲートに逆方向電圧を加えて白く描いた空乏領域を広げた様子を示した. 右端には回路図シンボルを示している. 左図はモデル寸法.

$C \rightarrow \infty$  は当然実験的には実現しないが, 逆方向側のデータを外挿することで  $1/C^2 = 0$  の点を求めると, これより  $V_{bi}$  を求めることができる.

更に,  $N_D$  が空間的に一様でない場合, 深い準位が存在する場合など, このプロットを微分することで空間分布に関する情報を得ることができる. また,  $V$  をパルス状に加えてパルス後の過渡的応答を調べたり, 光照射下で調べることで非常に多くの情報を得ることができる [4].

### 6.3.2 接合型電場効果トランジスタ

図 6.8 に JFET の構造模式図を示した. 図は n チャンネルのもので, チャンネル両端にソース (Source, S), ドレイン (Drain, D) と呼ばれる電極が取り付けられている. チャンネルはゲート (Gate, G) と呼ばれる  $p^+$  領域で挟み付けられている. 動作原理は見てわかるように極めて簡単で, 白く描いた空乏領域を, 逆方向電圧をゲートに加えることで式 (6.23) に従って広げ, 伝導に有効なチャンネル幅を狭めて伝導度を制御しようというものである. BJT が回路的には電流制御デバイスと言っても差し支えなかったのに対して, こちらは明らかに電圧制御デバイスであり, 入力抵抗も pn 接合の逆方向抵抗となるので高入力インピーダンス素子ということになる.

簡単な物理モデルを示しておこう. これまでの pn 接合の扱いにならって, 空乏層-伝導チャンネルの境目は急激であるとする. ゲート長を  $L$ , JFET の厚さを  $2w_t$  とする. チャンネルに沿った方向を  $y$  軸に取る. 空乏層幅  $w_d$  は

$$w_d(y) = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 V(y)}{eN_D}} \quad (6.26)$$

である.  $V(y)$  は  $y$  位置に接合を通して生じている電位 (差) で,  $V_{bi}$  と逆バイアスゲート電圧  $V_g$  を合わせたものから, 電流を流すためにチャンネル方向にかかっている電圧  $V_{ch}$  を引いたものである.

$$V(y) = V_g + V_{bi} - V_{ch}(y).$$

今は, 少数キャリアの注入はなく, 多数キャリアのドリフト電流を考慮すれば良い.  $y$  方向電場は  $dV/dy$  であり, チャンネルを流れるドリフト電流は, チャンネルの深さ方向幅を  $W$  として

$$J_{ch} = eN_D\mu_n \frac{dV}{dy} \cdot 2(w_t - w_d)W \quad (6.27)$$

$J_{ch}$  をチャンネル長  $L$  について積分すると,  $J_{ch}$  自体は一様で  $J_{ch}L$  になるはずであるから,

$$J_{ch}L = \int_0^L J_{ch} dy = 2eN_D\mu_n W \int_0^L (w_t - w_d) \frac{dV}{dy} dy = 2w_t eN_D\mu_n W \int_{V_0}^{V_L} \left(1 - \frac{w_d}{w_t}\right) dV. \quad (6.28)$$



$w_d = w_t$  となって  $J_{ch} = 0$  となる  $V$  を  $V_c$  と置くと、 $V_c = eN_D w_t^2 / 2\epsilon\epsilon_0$  であり、これを使って、 $w_d/w_t = \sqrt{V/V_c}$  と書き、 $J_{ch}$  を次のように表すことができる。

$$J_{ch} = \frac{2N_D e \mu_n W w_t}{L} \left[ V_L - V_0 + \frac{2}{3\sqrt{V_c}} (V(V_0)^{3/2} - V(V_L)^{3/2}) \right]. \quad (6.29)$$

式 (6.29) を全  $V_L$  領域に適用してしまうと、小さい電圧では、第 1 項の線形項が大きく電流は直線的に立ち上がるが、電圧増加と共にやがて  $3/2$  乗の項が効いて反転し電流が減少するという負性抵抗を示すことになる。現実には生じていることは、電圧増加に対して余計に流れようとする電流により電位分布が発生し、これが空乏層幅を広げてチャネル幅が狭くなる現象であり、電流が減少しながら空乏層幅が広がることはあり得ず、モデルに問題 (等電位面が平面で  $y$  軸に垂直、という仮定など) があり、電位電荷分布を正しく扱えていないことが明らかである。現実には空乏層幅増大に伴い、電流が  $V_L$  を増大してもほとんど増加しない飽和領域が生じる。飽和領域付近のもう少し現実的な電位電荷分布を表す数値モデルはもちろん立てることができるが、現在知られているものはいずれも数値計算を要し、また、良く成立する実験式もあるが物理的な意味づけに乏しいため省略する。

## 付録 6A : pn 接合トランジスタ

講師は、pn 接合トランジスタについては物理的に詳細な解析が必要になることは余りなく、「どのような原理で動作しているのか」を定性的に理解できれば十分だと考えている。また、それが理解できていれば、以下程度を展開することは容易である。が、一応、簡単な解析を見ておこう。

### 6A.1 電流-電圧特性

図 6A.1 は、nnp 型バイポーラトランジスタのバイアス状態、および素子中のキャリア濃度を模式的に描いたものである。 $x$  軸をデバイス方向に取り、図のように、ベース領域のエミッタ側の空乏層端を  $x = 0$  とする。この時、 $x = 0$  での電子 (少数キャリア) 濃度は、

$$n_p(0) = n_{p0} \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} \quad (6A.1)$$

である。これが、図のようにベース領域を拡散してコレクタ側の空乏層端  $x = W_B$  に到達する。到達した電子は空乏層内の電場により直ちにコレクタ側に掃き出されるため、 $W_B$  付近では電子濃度が非常に低くなる。

$$n_p(W_B) = n_{p0} \exp \frac{-eV_{BC}}{k_B T} \approx 0 \quad (6A.2)$$

である。 $W_B$  が少数キャリア拡散長よりもずっと短く、キャリア再結合が無視できるとすると、ベース内の電子拡散流は一定である。これは、(5.12) からわかるように、 $dn_p/dx$  に比例するから、 $n_p$  は図のようにベース内で  $x$  に対し

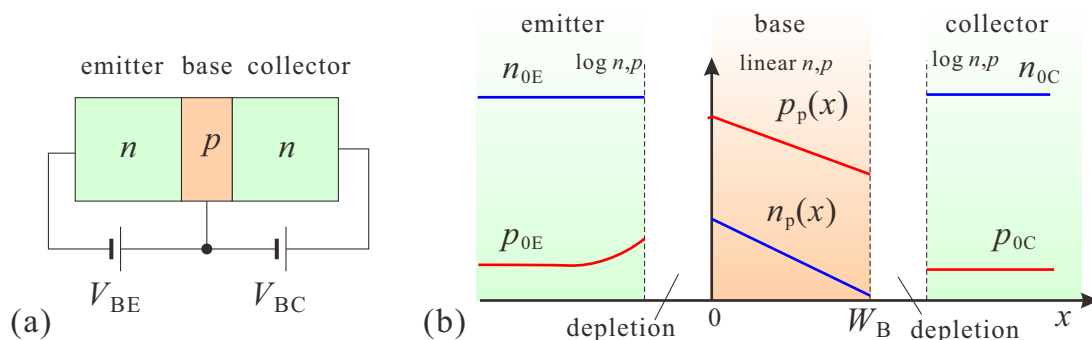


図 6A.1 (a) 考える npn トランジスタのバイアス状態、(b) npn トランジスタ中のキャリア濃度を模式的に描いたもの。

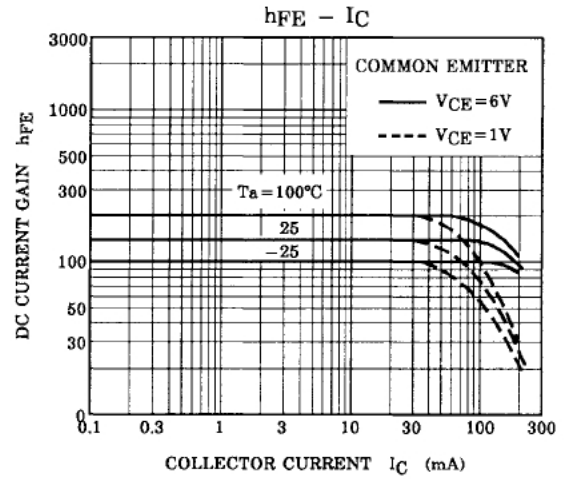
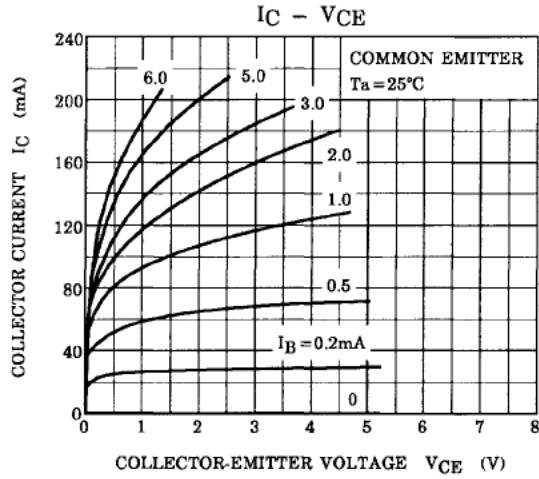


図 6A.2 小信号トランジスタ 2SC1815 の特性 (データシートより) 左: 様々なベース電流  $J_B$  に対するコレクタ-エミッタ電圧  $V_{CE}$  に対するコレクタ電流  $J_C$  の変化. 右: コレクタ電流  $J_C$  に対する電流ゲイン  $h_{FE}$  の変化.

て直線的に変化する. したがって, (6A.2) より, ベース内拡散電流密度は

$$j_{De} = -D_e \frac{dn_p}{dx} \approx eD_e \frac{n_p(0)}{W_B}. \quad (6A.3)$$

である. これがコレクタ電流の大部分を占めることから, 素子断面積を  $A$  として, コレクタ電流は

$$J_C = eAD_e \frac{n_p(0)}{W_B} \quad (6A.4)$$

となる. 更に半導体方程式  $n_{p0} \approx n_i^2/N_A$  より,

$$J_C \approx \frac{eAD_e n_{p0}}{W_B} \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} \approx \frac{eAD_e n_i^2}{W_B N_A} \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} \equiv J_S \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} \quad (6A.5)$$

となる.  $J_S = eAD_e n_i^2 / W_B N_A$  は, ベース内の単位面積当たり不純物数  $W_B N_A$  に反比例する比例係数である.

一方, ベース電流は, ベース  $\rightarrow$  エミッタが順方向, ベース  $\rightarrow$  コレクタが逆方向にバイアスされていることからほとんどエミッタ側に流れ, これは, エミッタの正孔拡散電流で決まる. 上記コレクタ電流と全く同様に計算すると,

$$J_{Br} = \frac{eAD_h}{L_h} p_{nE}(0) = \frac{eAD_h}{L_h} p_{nE0} \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} = \frac{eAD_h}{L_h} \frac{n_i^2}{N_D} \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T}. \quad (6A.6)$$

となる. また, ベース内で少数キャリアが増加していて, ベース内での電子正孔再結合電流も多少の寄与をしており, 考慮が必要な可能性もある. ベース中少数キャリア (電子) の総電荷は  $Q_e = -en_p(0)W_B A/2$  であり, 再結合までの平均時間を  $\tau_b$  とすると, 再結合電流は

$$J_{Br} = \frac{Q_e}{\tau_b} = \frac{en_p(0)AW_B}{2\tau_b} \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} \quad (6A.7)$$

と書ける. 従って, ベース電流はこれらの和で

$$J_B = eA \left( \frac{D_h}{L_h} \frac{n_i^2}{N_D} + \frac{n_{p0}W_B}{2\tau_b} \right) \exp \frac{eV_{BE}}{k_B T} \quad (6A.8)$$

となるため, (6A.5), (6A.8) より,

$$h_{FE} = \left( \frac{D_h}{D_e} \frac{W_B}{L_h} \frac{N_A}{N_D} + \frac{W_B^2}{2\tau_b D_e} \right)^{-1} \quad (6A.9)$$

が得られる.

## 6A.2 空乏層の影響

図 6A.2 に示したのは、東芝製 2SC1815 という型名のトランジスタの特性である。右図は  $J_C$  に対する  $h_{FE}$  の変化で、一定であれば線形性が良い事を示す。実際、低い  $J_C$  ではほぼ一定の  $h_{FE}$  が得られている。一方、左図は、 $V_{CE}$  に対する  $J_C$  の変化である。この図では、 $J_B$  がパラメーターであり、 $V_{CE}$  が 0 に近いところでは、ベース-コレクタ間はむしろ順方向にバイアスされており、トランジスタの電流増幅条件が満たされていない。比例領域 (増幅条件領域) に達した後、上の解析では  $J_C$  が  $V_{CE}$  に対して増加している。これは、アーリー効果 (Early effect) と呼ばれ、主には  $W_B$  が薄くなると、空乏層厚が無視できなくなり、有効ベース長が変化することに依っている。

空乏層厚の変化による有効ベース厚の変化を  $\Delta W$  と置くと、

$$J_C = eAD_e \frac{n_p(0)}{W_B - \Delta W} \approx eAD_e \frac{n_p(0)}{W_B} \left(1 + \frac{\Delta W}{W}\right) \equiv J_{C0} \left(1 + \frac{\Delta W}{W}\right) \quad (6A.10)$$

である。 $\Delta W$  は、(6.23) より、 $V_{CE}$  が小さい領域では急速に大きくなり、 $V_{CE}$  の増大と共に増加の割合は低下する。図 6A.2 にはこれを反映した特性が生じている。図 6.5(b) の特性ではアーリー効果は小さく、 $J_C$  の増加は  $V_{CE}$  に線形として近似できる。

## 付録 6B : Deep level transient spectroscopy (DLTS)

ここでは、DLTS の基本原理についてごく定性的に説明しておこう。解析法の詳細は文献 [4] などにある。逆バイアス電圧  $V$  に依存する (6.25) を考え、浅いドナー準位濃度  $N_D$  に加えて深いドナー準位  $N_P$  が生じているとする。すると、この深いドナーがバイアス電圧に応答する領域では電圧微分キャパシタンスは、逆バイアス電圧  $V$  に対して

$$w_d(V) \approx \left[ \frac{2\epsilon\epsilon_0(V + V_{bi})}{e(N_D + N_P)} \right]^{1/2} \approx w_n, \quad (6B.1)$$

$$C(V) = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 e(N_D + N_P)}{2}} (V + V_{bi})^{-1/2} \quad (6B.2)$$

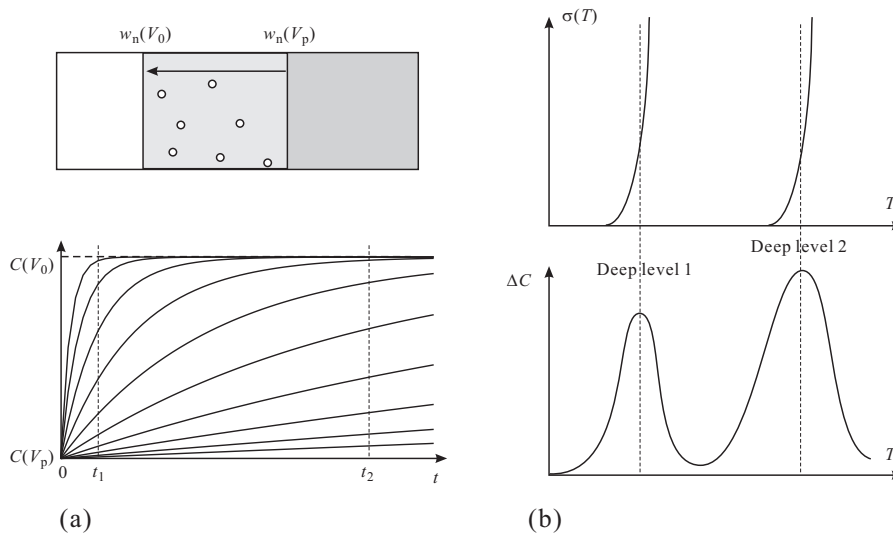


図 6B.1 (a) 上：逆バイアス  $V_p$  状態から  $V_0$  状態にすることで、浅いドナー準位、及び深いドナー準位の一部分がキャリアを捕獲できる状態となることを模式的に示した。下：キャリアの捕獲に伴い、微分キャパシタンス  $C(V)$  が時間に対して過渡応答を示す様子。(b) 上：2 種類の深い準位が存在し、その捕獲断面積  $\sigma$  が温度によって変化する様子を示した。下：上の  $\sigma(T)$  から DLTS の信号が生じる様子。

となる。今、状況を簡単化するため、逆バイアス電圧を  $V_p$  まで加え、十分に時間を置き、深い準位からも (6B.1) で、 $w_d(V_p)$  が与える空乏層領域からは電子が出払っているものとする\*2。ここで、 $V$  を急激に  $V_0 < V_p$  まで戻すと、 $w(V_0) < x \leq w(V_p)$  にあるドナー準位にキャリアが落ち込む。浅い準位の捕獲レートは大きく、ms 程度の時間スケールであれば全く遅延なく応答するが、深い準位は、一般に温度によって捕獲レートが大きく変化し、捕獲までの平均時間が ms から、s 更に、min, hour, day まで伸びることもざらではない。この場合、 $C$  が時間変化する様子が、ある温度で観測している時間窓で見えるようになり、更に低温では深い準位による  $C$  の変化が見えなくなってしまう。

この様子を深い準位が1種類の場合について、図 6B.1(a) に示した。ここで、 $V_p \rightarrow V_0$  とした時刻を  $t = 0$  として  $t_1, t_2$  で測定した微分電気容量の差  $\Delta C = |C(t_1) - C(t_2)|$  を温度に対してプロットすることを考える。今、深いドナー準位が2種類あって、捕獲断面積がそれぞれ図 6B.1(b) の上図のように変化していたとすると、 $\Delta C$  はこれに応じて、2つのピークを持つ。この温度変化を解析することで、深い準位の濃度や捕獲断面積などに関するデータが得られ、光学応答と組み合わせることで、深い準位の種類を同定したり、性質を調べたりすることができる [5]。また、 $V_0, V_p$  を変化させることで、深い準位の接合深さ方向プロファイルを調べることもできる。

## 参考文献

- [1] 菊池誠「半導体の理論と応用 (中)」(裳華房, 1963).
- [2] 勝本信吾 物性研究 電子版 Vol.3, No.3, 033209 (2014 年 8 月号)  
<http://mercury.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~bussei.kenkyu/pdf/03/3/9999-033209.pdf>
- [3] Jon Gertner, “The Idea Factory: Bell Labs and the Great Age of American Innovation”, (Penguin Press, 2012).
- [4] 国府田隆夫, 終元宏 「光物性測定技術」(東大出版会, 1983).
- [5] M. Jaros, “Deep levels in Semiconductors” (CRC Press, 1982).

\*2 低温では、深い準位の捕獲放出レートは大変小さくなり、放出に日単位の時間を要するようになることも稀ではなく、このような条件で実際に実験することはまずないが、結局ほとんど同じ結果が得られるので、ここではこのように考えておく。

# 講義ノート 半導体 第8回

2021.6.02 勝本信吾 東京大学物性研究所 (理学系研究科物理学専攻)

引き続き FET の動作を調べよう。ただし、pn 接合から離れて表面や界面を使用してトランジスタ動作をさせる FET を見ていくことにする。pn 接合はドーピングにより空間的一様性を破るものであるが、特にホモ接合の場合、ドーピングで接合面が決まっており、「界面」という意識が薄くまた、バルク中にできるものなので表面の影響は余り受けにくい。Schockley 達が、当時の工業技術で作製が容易で (とは言え、超高純度結晶の成長技術や、精密なドーピング技術など当時としては飛び抜けて困難な技術を要した) 安定で再現性が高い素子作製法として pn 接合を主役に据えた理由の 1 つもこの点である。これに対して、半導体技術、素子作製技術が飛躍的に高くなると、これまで厄介者扱いであった表面や界面を制御下に置いて素子動作をさせようという動きも広がり、やがて表面・界面はバルクを圧倒していくようになる。本節はこれら「現代の主役たち」を紹介する。

## 6.3.3 Schottky 障壁 (接合)

これまで半導体のホモ接合を考えてきた。いきなり、ではあるが、半導体と金属の接合を考えよう。接合の様子を考えるときに (安易であるが) 便利な拠り所は

1. 硬いバンド近似 (rigid band approximation) \*1
2. 接合より遠方でのバルク状態への復帰
3. 平衡状態で  $E_F$  ( $\mu$ ) が空間的に一定

であった。金属と半導体の接合の場合、2., 3. は良いとして、1. をどう考えるかが問題になる。

半導体表面には状態密度の高い表面準位が存在することが多く、金属=半導体接合はその影響を強く受ける。しかし、ここでは次のように考えよう。「硬いバンド」の基準となるのは、金属と半導体とで電子が抵抗なく行き来できる「バンド」の端を揃えることである。が、金属と半導体とでは通常結晶構成もまるで異なり、このようなバンドは見出すことが困難である。そこで、電子を真空準位まで引き出すことを考える。これに必要なエネルギーはいわゆる仕事関数である。半導体、金属の仕事関数をそれぞれ  $e\phi_S$ ,  $e\phi_M$  とする。一般に  $e\phi_M \neq e\phi_S$  である。一方、接合の条件 2. より、接合より遠方ではバルクの  $E_F$  が一致し、3. よりそれは接合付近でも一定である。

以下の手続きはもちろん物理的な過程ではなく人間が頭の中で辻褃を合わせていく様子であるが、最終的な結果は実際の接合でも同じになると考えられる (もちろん、これも大いに理想化されており、本当の現実の接合では更に状況は複雑である)。

$e\phi_M$  が  $e\phi_S$  よりも大きいとする。まず、真空準位を一致させて、界面までバルクの状態を伸ばしたとすると、図 6.9 のように半導体のフェルミ準位が金属よりも高い位置に来る。これは、半導体→金属へのキャリアの流出を生じる。流出により半導体表面付近は帯電し、面垂直方向に電場が生じる。金属側も半導体からのキャリア流入に伴い帯電するが、金属側は自由電子の濃度が桁違いに高く、遮蔽長は 1 原子層以下の長さである。従って半導体からのキャリア流入に伴うバンドの傾きは無視できる。今、半導体側は n 型にドーピングされており、ドナー濃度が  $N_D$  であるとする。金属表面に蓄積している全電荷面密度を  $-Q$  とすると、表面 ( $x=0$ ) より  $x$  の距離での電場は  $(eN_Dx - Q)/\epsilon\epsilon_0$  であり、これによる  $0 - x_d$  間の電位差は

$$\phi(x_d) = \int_0^{x_d} (eN_Dx - Q)/\epsilon\epsilon_0 dx = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \left( \frac{eN_D}{2} x_d^2 - Qx_d \right) \quad (6.30)$$

\*1 固体物理での通常の語法では、rigid band approximation は合金でバンド構造を混合として扱うことを指す。

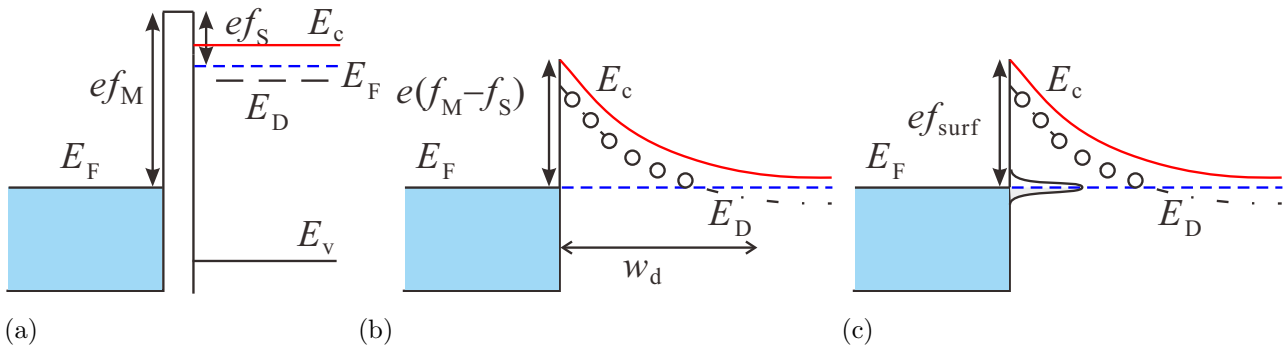


図 6.9 (a) 金属と半導体を，真空準位が一致するように接合した，と考える仮想的なバンドアラインメント．(b) 半導体表面準位がない，理想的な界面が形成された，とした場合のショットキー接合のバンド図．(c) 表面準位によるフェルミ準位のピン止めの様子を模式的に示したもの．伝導帯端  $E_c$  からのフェルミ準位の位置は，表面準位位置  $-e\phi_{surf}$  に固定される．

である．電荷が蓄積している空乏層の厚さを  $w_d$  とすると，空乏層外で電場がゼロになる条件から， $w_d = Q/eN_D$  である．条件  $e\phi(w_d) = \phi_M - \phi_S$  より  $Q$  を決めることができ，

$$Q = \sqrt{2\epsilon\epsilon_0 N_D e (\phi_M - \phi_S)}, \quad \therefore w_d = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 (\phi_M - \phi_S)}{e N_D}} \equiv \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 V_s}{e N_D}}. \quad (6.31)$$

$eV_s \equiv \phi_M - \phi_S$  とした．以上によって金属-半導体界面には，電子 (p 型の場合は正孔) にとって図 6.9(b) のような障壁が生じる．これをショットキー障壁 (Schottky barrier) と呼ぶ．

半導体側に  $V$  の電圧を加えたとするとき， $V$  はほとんど半導体側にかかると考えてよいから，半導体側から見た障壁高さは  $e(V_s - V)$  に変化し，金属側から見た高さは  $eV_s$  のままである．半導体側はフェルミ縮退していないので本来は運動エネルギー分布を考えて障壁を乗り越える電子数を数えるべきであるが，ここでは簡単のため運動エネルギーが均一であるとすると，金属に対する熱電子放出式を使用して

$$J = AT^2 \left[ \exp\left(\frac{e(V - V_s)}{k_B T}\right) - \exp\left(\frac{-eV_s}{k_B T}\right) \right] = eAT^2 \exp\left(\frac{-eV_s}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right]. \quad (6.32)$$

ここで， $A$  はリチャードソン係数と呼ばれる．1 項目は半導体側からの電流，2 項目は金属側からの電流である．結局，電流電圧特性は pn 接合と類似で閾値電圧がショットキー障壁高さで決まっていることになる．

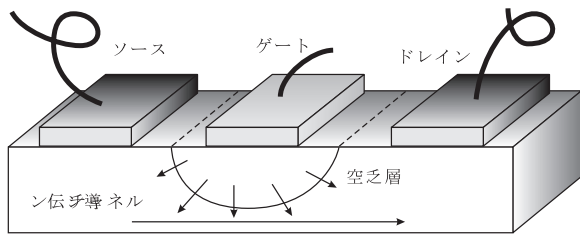
以上は半導体表面を大変に理想化した場合であったが，現実の金属-半導体接合では，やはり (6.32) と類似の電流電圧特性が得られる．ただし，(6.32) では金属を取り替えれば障壁高さに変化するはずであるが，現実には (通常の場合) 全くそのようにはならず，金属によらずほとんど常に一定の障壁高さが見られる．これは，半導体表面にエネルギー幅が狭く，非常に状態密度の高い表面準位が存在し，この状態がちょうど理想的金属-半導体界面を考えたときの金属の役割を果たして表面付近にもともと空乏層が存在するためである．このような表面に金属を接触させても，表面準位が金属の効果を遮蔽して半導体側の空乏層の様子は変化しない．この時，フェルミ準位は表面準位の位置に貼り付いた状態になる．これをフェルミ準位のピン止めという．

このように，表面準位がフェルミ準位をピン止めしてしまうと，半導体によってバンドの曲がり方が決まるため，n 型でショットキー接合ができる半導体では p 型ではできず，逆も片方しかできないことになる．実際，GaAs では p 型のショットキー接合を作ることは困難，InP では逆に n 型のショットキー接合を作るのが難しい．このような場合でも，例えば p 型の半導体のバンドを強く押し下げて n 型のチャンネルを形成する反転層が作れると両性のデバイスができるが，ショットキー接合の場合これも困難である．

### 6.3.4 MES-FET

III-V 族半導体の中でも電子デバイスに最も良く使用される GaAs は性質の良い酸化膜を形成しにくく，次節で述べる MOS 構造の作製が難しい．このため，ショットキー接合を使った金属-半導体 FET (MEtal-Semiconductor

FET, MES-FET) がかつては良く使用されていた。GaAs は電子の有効質量が軽く、移動度が大きいので、高速動作に向いており、マイクロ波の検波や増幅に使用されてきた。



MES-FET の構造は、左図のように単純で、伝導チャネルをショットキー接合へ加える逆バイアス電圧 (ゲート電圧) によって厚さを制限し、ソース・ドレイン間の電気抵抗を制御して信号を増幅する。ショットキー接合は次の MOS 構造に比べてゲートのリークが大きく、また、前節で述べたように、正負どちらかのキャリアに対する接合しかできないことが多いので、相補 (complementary) 回路が組めないため高密度集積には向かない。しかし、マイクロ波などの

高周波回路には依然、良く使用されている。

### 6.3.5 MOS 構造

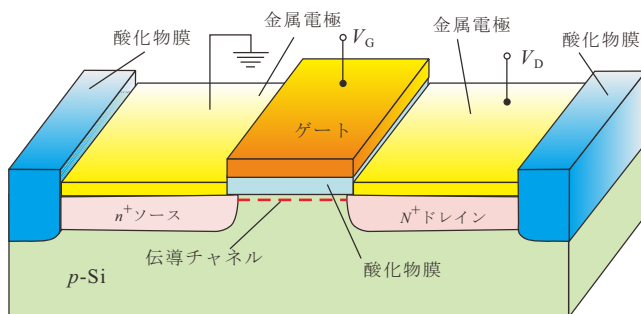


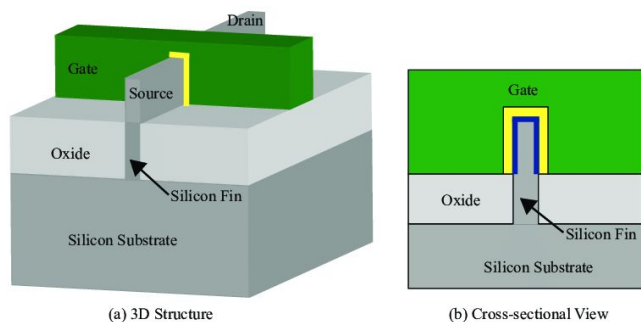
図 6.10 MOSFET 構造の概念図。熱酸化膜にリソグラフィで穴を開けて拡散させるプロセスのため、このような構造ができ上がることが多い。

金属-酸化物-半導体 (Metal-Oxide-Semiconductor, MOS) 構造は、名前の通り金属と半導体との間に絶縁体となる酸化物を挟み込んだものである。特に最も良く使用される Si には非常に安定で絶縁性の良い 2 酸化ケイ素 ( $\text{SiO}_2$ ) が存在し、熱酸化によって容易に形成でき、また、p 型、n 型両方の伝導チャネルを制御でき、相補型 MOS (Complementary MOS, CMOS) 回路が構成できた。CMOS 回路は消費電力を飛躍的に下げ、集積度の上昇をもたらすことで、半導体デジタル回路の主役となった。かつては高速論理回路は、バイポーラトランジスタを使ったエミッタ結合の回路 (Emitter Coupled Logic, ECL) が主流であったが、高集積化の要求、CMOS 回路の遮断周波数の向上により、

少し以前より、いわゆるスーパーコンピュータも CMOS 論理回路を使用するようになった。

MOSFET 構造も、MESFET 同様チャネル上にゲートを配置する。MESFET のように空乏層でチャネルを潰すデプレッション型と、逆にゲートでバンドを  $E_F$  より下に押し下げて伝導チャネルを形成するエンハンスメント型がある。また、酸化物はショットキー接合に比べてはるかに高い電圧に耐えるため、バンドを大きく曲げて p 型半導体の表面に n 型の 2 次元的なチャネル (反転層, inversion layer) を作ることもできる。

Si-MOS 構造は、集積回路ばかりでなく電力素子にも進出した。ただし、最近では SiC が ON 抵抗の低い素子を作るために注目されるようになり、また、高周波電力素子では GaN 系に開発の重点が移りつつある。



### 6.3.6 FinFET

21 世紀に入っても半導体集積回路では、CMOS を中心として激しい集積度向上競争が続いた。他の論理回路方式に比して消費電力の点で圧倒的に有利だった CMOS も、集積度の律速は電力消費によるチップ内加熱現象になり、これを解決するために、低電圧での素子駆動が求められるようになった。このため、 $\text{SiO}_2$  ではなくもっと誘電率の高い絶縁膜を使って低電圧で

チャンネルの ON/OFF を可能にすることが考えられた。誘電率を  $\kappa$  と書いて high- $\kappa$ 、あるいは high- $k$  材料と呼ばれる絶縁膜探してある。様々な条件から、現在ケイ酸ハフニウム、酸化ハフニウム、ジルコニアなどが使用されている。

更に、チャンネルの形状を、平面 (プレーナ) 型からフィン状にした、FinFET と呼ばれる構造が使用されるようになった。図のように、薄いチャンネルをゲートでくるんだ形であることから、表面と裏面の両方から空乏層-反転層が広がり、プレーナより高速・低抵抗スイッチすることができる。ps を切るスイッチ速度が得られている。また、素子密度を上げる上でも有効である。現在論理 LSI ではすでに主流となりつつある構造である。

## 6.4 半導体ヘテロ接合

Schottky 接合や MOS 構造に比較すると、類似物質の接合面であるのが異種半導体同士の接合、半導体ヘテロ接合 (heterojunction) である。これは、他に比べて急峻な有効ポテンシャル変化を実現することができ、また電子波の量子コヒーレンスを保ってポテンシャル導入ができるため、トンネル効果のような量子効果をつかう素子を実現するブロックになる。更には、結晶内に新たな周期構造を生み出し、バンド構造を人工的にいじることも考えられる。これをバンドエンジニアリング (band engineering) と称する。

この講義は半導体の物理の講義であるため、まずはヘテロ界面を物理的にどう扱うか、ということを考えていこう。

### 6.4.1 ヘテロ界面の有効質量近似

ここで、講師自身の教科書 [1] でも触れたやり方であるが、Bastard の教科書 [2] に従い、様々な部分を思い切り単純化して、ヘテロ界面に有効質量近似を適用する方法を考えてみる。

#### 6.4.1.1 ヘテロ接合

半導体 A, B の接合面を  $xy$  面にとる。A, B 2つの半導体が  $z = 0$  面 ( $xy$  面) で接合 ( $A : z < 0, B : z > 0$ ) しているとする。各領域では、Bloch の定理に従い、

$$\psi^{(A)}(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(A)}(\mathbf{r}) u_{l\mathbf{k}}^{(A)}(\mathbf{r}), \quad \psi^{(B)}(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(B)}(\mathbf{r}) u_{l\mathbf{k}}^{(B)}(\mathbf{r}) \quad (6.33)$$

と書けるとする。 $l$  はバンドを表す指数で、 $u_{l\mathbf{k}}^{(A,B)}$  は単位格子の周期性を持つ関数である。話を思い切り簡単にするため、格子周期関数と各バンドの分散関係はバンドの底や頂点の位置を除いて変化しないとする。

$$u_{l\mathbf{k}}^{(A)}(\mathbf{r}) = u_{l\mathbf{k}}^{(B)}(\mathbf{r}), \quad \partial \epsilon_l^{(A)} / \partial \mathbf{k} = \partial \epsilon_l^{(B)} / \partial \mathbf{k}.$$

この単純化により、 $xy$  面内の 2次元ベクトルを  $\mathbf{r}_{xy}$  として、 $z = 0$  での波動関数連続条件より

$$f_l^{(A)}(\mathbf{r}_{xy}, 0) = f_l^{(B)}(\mathbf{r}_{xy}, 0).$$

$xy$  面内、 $\mathbf{r}_{xy}$  の自由度に関しては、Bloch の定理より、

$$f_l^{(A,B)} = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{x}) \chi_l^{(A,B)}(z).$$

$1/\sqrt{S}$  は  $xy$  面の平面波的部分規格化定数、 $\chi_l(z)$  が  $z$  方向の包絡関数である。

$z$  方向自由度について、 $k = 0$  周りでの  $k \cdot p$  摂動を考える。すなわち、 $k = 0$  に対して格子周期関数と離散準位を求め、 $k \neq 0$  の領域の波動関数を  $k \cdot p$  に比例する摂動ハミルトニアンによって離散準位が混じる効果によって表す。 $\chi = \{\chi_j\}$  を求める方程式を、

$$\mathcal{D}^{(0)} \left( z, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \chi = \epsilon \chi \quad (6.34)$$



と書く。ただし、 $N \times N$  の演算子行列  $\mathcal{D}^{(0)}$  は

$$\mathcal{D}_{lm}^{(0)} \left( z, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left[ \epsilon_l(z) + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{lm} + \frac{\hbar \mathbf{k}_{xy}}{m_0} \cdot \langle l | \mathbf{p}_{xy} | m \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle l | p_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} \quad (6.35)$$

であり、

$$\epsilon_l(z) = \epsilon_l^{(A)} \quad (z < 0), \quad \epsilon_l^{(B)} \quad (z \geq 0). \quad (6.36)$$

ここで、 $|u_{m0}\rangle$  などを  $|m\rangle$  と書いている。

「バンド不連続ポテンシャル」を強調して

$$V_l(z) \equiv \begin{cases} 0 & z < 0 \quad (z \in A) \\ \epsilon_l^{(B)} - \epsilon_l^{(A)} & z \geq 0 \quad (z \in B) \end{cases} \quad (6.37)$$

と書くと、結局

$$\sum_{m=1}^N \left\{ \left[ \epsilon_{m0}^{(A)} + V_m(z) + \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{lm} - \frac{i\hbar}{m_0} \langle l | \hat{p}_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar \mathbf{k}_{xy}}{m_0} \cdot \langle l | \hat{\mathbf{p}}_{xy} | m \rangle \right\} \chi_m = \epsilon \chi_l \quad (6.38)$$

という  $\{\chi_l\}$  に関する連立方程式が得られる\*2。

以上から、バンド  $l$  の包絡関数  $\chi_l$  の接続条件を考えてみる。すでに見たように、ここでは  $u_l$  が A, B で変化しないとしたため、 $\chi_l$  は界面で連続でなければならない。一方  $\chi_l$  が連続という条件下で (6.38) が更に  $\chi_l$  に課す条件は、(6.38) を界面をまたいで積分することで、

$$\mathcal{A}^{(A)} \chi^{(A)}(z_0 = 0) = \mathcal{A}^{(B)} \chi^{(B)}(0), \quad (6.39)$$

の形に得られる。ただし、

$$\mathcal{A}_{lm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \delta_{lm} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{2i}{\hbar} \langle l | p_z | m \rangle \right] \quad (6.40)$$

である。この形から明らかなように、 $k \cdot p$  の摂動を与えるバンドの混じりの項  $\langle l | p_z | m \rangle$  によって、単純な包絡関数の微分が連続、という接続境界条件は成立しないことがわかる。

#### 6.4.1.2 包絡関数の接続

次に、今度は  $u$  やバンド分散 (有効質量) などに関する条件を緩める一方、単一バンド近似で考えてみる。有効質量方程式は 2 階の微分方程式であるから、一般的な境界接続条件は

$$\begin{pmatrix} \chi^{(A)}(0) \\ \nabla_A \chi^{(A)}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(B)}(0) \\ \nabla_B \chi^{(B)}(0) \end{pmatrix} \quad (6.41)$$

である。ただし、 $a$  を共通な格子定数として、

$$\nabla_{A,B} = \frac{m_0}{m_{A,B}} \frac{\partial}{a \partial z} \quad (6.42)$$

である。 $T_{BA} = \{t_{ij}\}$  を界面行列と呼ぶ。

$z$  方向の粒子流密度は、包絡関数で決まり、

$$j(z) = \frac{\hbar}{2im^*} \left[ \chi^*(z) \frac{\partial \chi}{\partial z} - \frac{\partial \chi}{\partial z} \chi(z) \right] \quad (6.43)$$

で与えられる。粒子数保存から、A, B 領域での  $j(z)$  が等しくなければならない。これは次と同値である。

$$\det T_{BA} = 1. \quad (6.44)$$

\*2 なお、 $k$  の 2 次までの近似ではこれ以外にも沢山の項があるが、大変複雑になるためここでは省略した。

この条件は  $T_{BA}$  が単位行列であれば満たされるので、最も簡単には  $T_{BA} = I$  とする包絡関数近似が考えられる。この場合は、包絡関数を通常の波動関数と同等に扱える。GaAs-(Al,Ga)As 界面について 1 次元強束縛模型を使って界面行列を計算すると、包絡関数近似が比較的良いことが示される。

このような場合には、物質の組み合わせによって決まるバンド不連続が存在するとして、接合面に階段関数ポテンシャルを置き、包絡関数を波動関数とする見方が成立する。これにより、積層構造によって 1 次元ポテンシャル問題、そして量子系をデザインする自由度を入手することができる。

### 6.4.2 Anderson のモデル

図 6.11 に模式的に示したのが、昔から長く使われてきた Anderson のモデルと呼ばれるもの\*3である [3]。図 6.11(a) のように、界面ぎりぎりまで、バルクのバンドが相対位置の変化なしにつながっている、とする。界面電荷その他の効果は、電場という形でバンドの空間的な傾きで表現する。

このモデル内の重要な問題は、異種物質を接合した際に「相互のバンド位置」がどうなるかである。Anderson モデルでは、これは、図 6.11(b) のように、電子の真空準位—真空中で静止している電子のエネルギー位置—からの affinity—電子親和力と訳されることが多く、結晶中の電子状態に遷移する際に原子が集まることで低下するエネルギー—で決まる。affinity は結晶種によって決まるので、結局結晶の種類で接合のバンドのつながり方が決まることになる。図では、A, B の affinity をそれぞれ  $\chi^A, \chi^B$  としている。

この affinity というものが、十分良く定義できるのかどうか、できたとして、計算できるか、測定できるか、など、多くの問題があるが、ここではこの問題には入らない。異なるアプローチについては、付録 6C をご覧いただきたい。

### 6.4.3 接合タイプの分類

まず、ヘテロ界面業界の用語で接合のタイプを分類しておこう。図 6.12 に良く行われる 3 分類を示した。(a) がもっとも普通のタイプで、I 型 (type-I) と呼ばれる。バンドギャップの小さい方の物質から大きい方の物質へ向かって、接合面を超える際に、伝導帯の底は上昇し、価電子帯の頂上は下降するものである。これに対して、(b) のように、接合面を通過する際に伝導帯・価電子帯が同一方向にシフトするものを II 型 (type-II) という。(b) の図では、A, B 両物質共にバンドギャップ中になるエネルギー領域があったが、バンドギャップに対してシフトが大きくなる

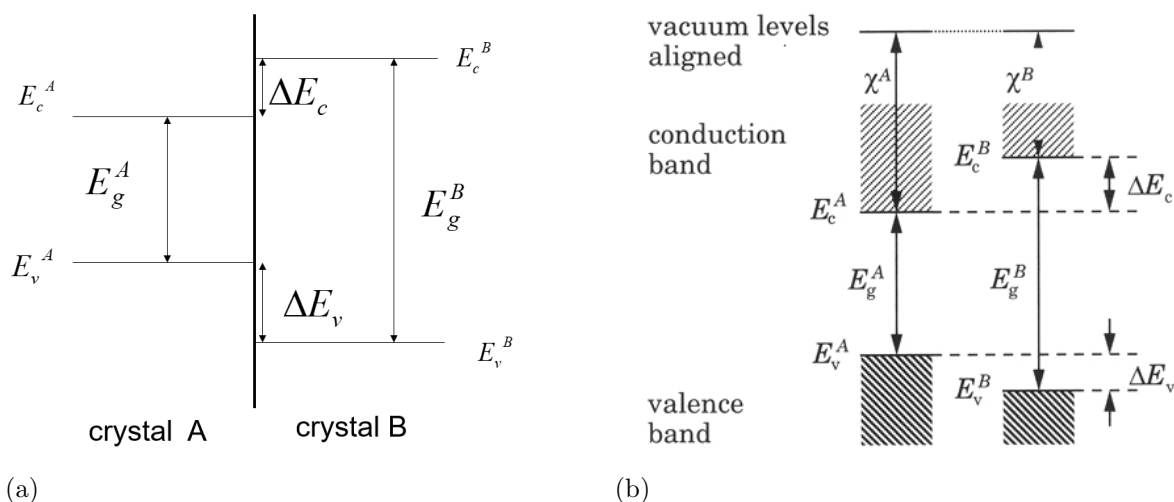


図 6.11 (a) 結晶 A, B を接合した際の相対エネルギー位置などの記号を示すダイアグラム。(b) バンドの相対位置が真空準位からの affinity(親和力?) で決まっているとする Anderson のモデル。

\*3 もちろん、Bell にいたノーベル賞受賞者の有名な Philip W. Anderson とは別人。P. W. Anderson は局在スピンの Anderson model で有名だし、R. L. Anderson は IBM にいた人で、少々紛らわしい。

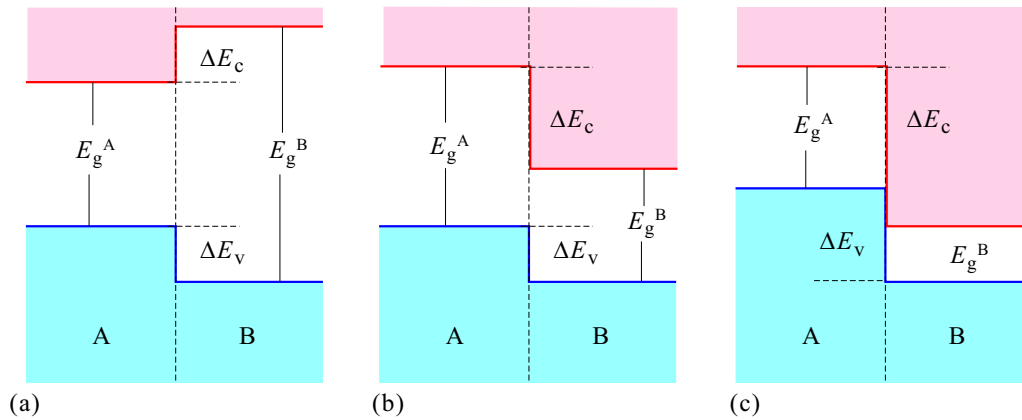


図 6.12 (a) I 型：広ギャップ側に対して，伝導帯端は上昇，価電子帯端は下降．(b) II 型：伝導帯端，価電子帯端が同じ方向に移動．broken-up あるいは misaligned．(c) III 型：II 型と同じだが，エネルギーギャップにオーバーラップがなく，片方の価電子帯と他方の伝導帯がオーバーラップしたもの．staggered．

と，(c) のように界面でバンドギャップがつぶれた形になる．日本では特にこのようなものを II 型と区別して III 型と呼んでいる．日本以外では，通常 (b) を type-II (broken-up or misaligned)，(c) を type-II (staggered) と呼んでいる．実際，[4] でも，(c) を type-II と呼んでいる．

## 6.5 ヘテロ接合の形成

結晶成長法の中でも薄膜成長のところで，すでに見てきたことであるが，ヘテロ接合の電子構造的な側面から，もう一度ざっと見てみよう．

### 6.5.1 エピタキシャル成長

ヘテロ接合の形成法として一般的なものは，第 1 回ですでに述べたエピタキシャル成長である．エピタキシャル成長には，大別して，液相，気相，真空蒸着法がある．このうち液相法は，材料物質の熔融状態から結晶基板上への析出を用いており，熱平衡に近い速くして良質な結晶の成長が可能である一方，急峻な界面が得にくい問題があり，膜厚等の精密な制御が必要な場合，後二者を使うのが一般的である．

ヘテロ接合面を形成する際に重要になるのが，結晶形の整合と格子整合 (lattice matching) である．図 6.13 は，一部の化合物半導体，元素半導体 (一部は半金属) について格子定数とエネルギーギャップをプロットしたもので，これらはブラベー格子は FCC で結晶形はほぼ同じである．灰色の帯で，格子定数が近くてヘテロ接合の形成が比較的容易なグループを示している (グループ内でどの組み合わせも積層可能というわけではない)．GaN 系の半導体のヘテロ接合も重要であるが，ウルツ鉱構造 (六方晶系) であることや高温加熱が必要なことから，窒化物系でヘテロ構造を形成することが多い．

格子不整合がある程度大きい場合でも，一定の膜厚までは界面転位が発生することなく成長する．これを，転位に集中する歪弾性エネルギーと膜全体の収縮展張による弾性エネルギーの競合点で与えるのが **Matthews** の臨界膜厚 (Matthews' critical thickness) である [5]．実際の結晶成長時には何らかの非平衡性があり，常に自由エネルギー最低点を実現する断熱変化が生じているわけではないので，これは目安に過ぎない．また，結晶成長時には基板を比較的高温に保つ必要があることが多く，熱膨張係数の違いから転位や歪が発生するなど，ヘテロ接合形成時に考える必要のある問題は非常に多い [6]．

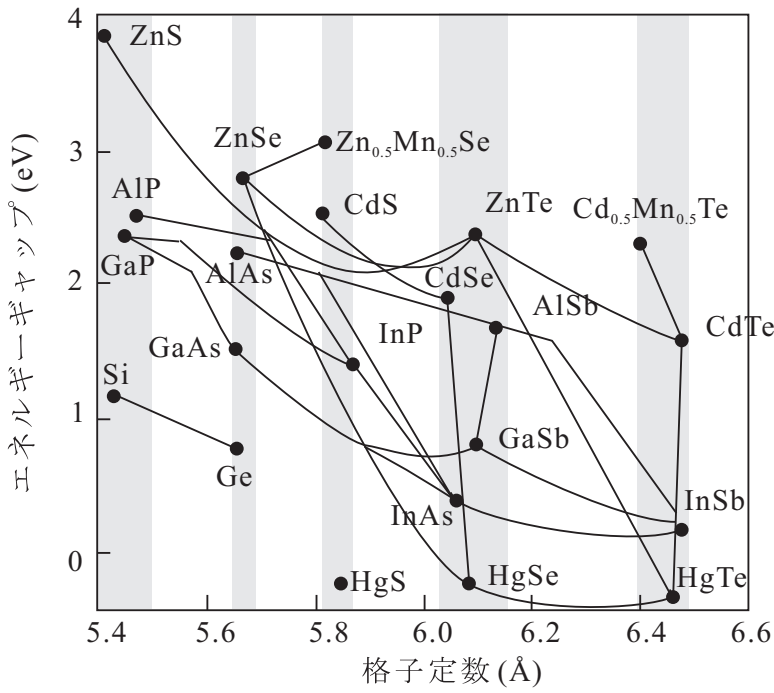


図 6.13 II-VI 族, III-V 族, IV 族半導体について格子定数とエネルギーギャップをプロットしたもの. 点を結ぶ線は, これらの間の混晶半導体を取り得る位置を示している. 縦の灰色の帯は, 格子整合が良好でヘテロ接合の可能性のあるグループを示す.

### 6.5.2 ファン・デル・ワールス ヘテロ構造

上記とやや異なるヘテロ構造として, ファン・デル・ワールス ヘテロ構造が注目されている [7]. これは, 図 6.14 のように, グラフェンのような 2 次元物質 (グラフェンについては, ヘテロ接合以外の 2 次元電子系として後で紹介する) を積み重ねて作るものである. CVD のようなエピタキシャル成長法を用いる場合もあるが, 劈開剥離で作った 2 次元物質層を機械的に積み重ねることで高品質のヘテロ構造が得られることもあり, 全く新しいヘテロ構造形成法が現れる可能性がある.

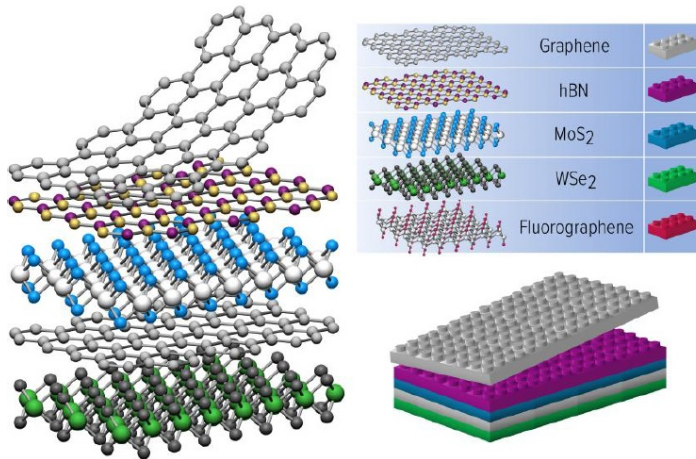


図 6.14 ファン・デル・ワールス ヘテロ構造の概念図. 様々な 2 次元物質を積み重ねて作製.



## 第7章 量子構造（量子井戸，細線，ドット）

これまで，2次元物質であるグラフェンなど，低次元の系についても見てきた．これらは，いわば天然の低次元系であった．ヘテロ接合や金属接合，微細加工技術などを使うことで，人間の手が物質系の設計にも一定程度入るようになった．本章は，代表的な量子構造3種，2次元，1次元，0次元の系について眺めてみる．

### 7.1 量子井戸

2枚のヘテロ接合に挟まれてできたポテンシャルのくぼみが量子井戸 (quantum well) である．初等量子力学以来おなじみの問題であるが，半導体ヘテロ接合によって学生の練習問題から現実になったとも言える．

#### 7.1.1 量子井戸内準位

少し学部時代のおさらいをしよう．量子井戸幅を  $L$ ，ポテンシャル障壁の高さを  $V_0$  に取る． $x \leq -L/2$ ， $L/2 \leq x$  の領域 (井戸外) での Schrödinger 方程式は

$$\left[ -\frac{\hbar^2 d^2}{2m dx^2} + V_0 \right] \psi = E\psi \quad (7.1)$$

であるから， $\kappa \equiv \sqrt{2m|E - V_0|}/\hbar$  と置くと， $C_{1,2}$ ， $D_{1,2}$  を (領域ごとに異なる) 定数として，井戸外では

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 \exp(i\kappa x) + C_2 \exp(-i\kappa x) & E \geq V_0 \\ D_1 \exp(\kappa x) + D_2 \exp(-\kappa x) & E < V_0 \end{cases} \quad (7.2)$$

である．

粒子が井戸を飛び出す運動エネルギーを持っておらず，概ね井戸内に留まっている  $E < V_0$  の場合， $x \rightarrow \pm\infty$  で波動関数が有限でなければならないから，

$$L/2 < x \text{ で } D_1^+ = 0, \quad x < -L/2 \text{ で } D_2^- = 0$$

である．肩の土は  $x$  の正負の領域を区別するためにつけた．ここで，不連続境界  $x = \pm L/2$  での接続条件を適用する．井戸内の波動関数は， $C_1$ ， $C_2$  を定数として，

$$\psi = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx), \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (7.3)$$

と平面波で表される．簡単のため井戸内外で有効質量  $m$  に変化はないとした．接合面での値の連続， $x$  に関する1階微分の連続より

$$\begin{aligned} \text{値の連続} & \begin{cases} C_1 \exp(ikL/2) + C_2 \exp(-ikL/2) = D_2^+ \exp(-\kappa L/2) \\ C_1 \exp(-ikL/2) + C_2 \exp(ikL/2) = D_1^- \exp(-\kappa L/2) \end{cases} \\ \text{微分の連続} & \begin{cases} ikC_1 \exp(ikL/2) - ikC_2 \exp(-ikL/2) = -\kappa D_2^+ \exp(-\kappa L/2) \\ ikC_1 \exp(-ikL/2) - ikC_2 \exp(ikL/2) = \kappa D_1^- \exp(-\kappa L/2) \end{cases} \end{aligned}$$

が要求される．以上から定数を消去すると，次の条件が得られる．

$$\begin{aligned} \exp(2ikL) &= \left( \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \right)^2 = \exp\left(-4i \arctan \frac{k}{\kappa}\right), \\ \therefore kL &= -2 \arctan \frac{k}{\sqrt{\kappa_0^2 - k^2}} + n\pi, \quad \kappa_0^2 \equiv \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (7.4)$$

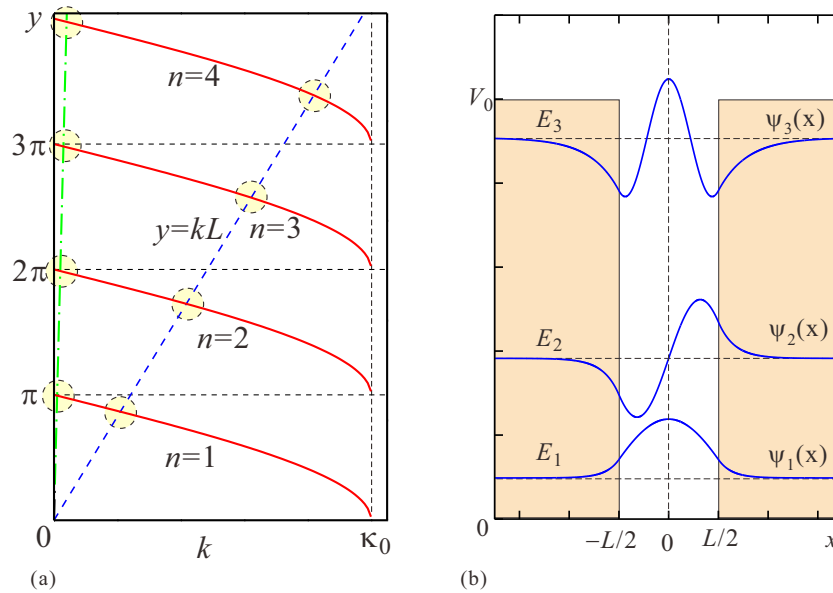


図 7.1 (a) 式 (7.4) の条件を満たす  $k$  を求めるためのプロット.  $k$  の関数として,  $-2\arctan(k/\kappa) + n\pi$  と  $kL$  とを描くと, 交点の  $k$  の値が (7.4) を満たすものである. (b)  $l = 8$  の条件下で得られた  $n = 1, 2, 3$  の束縛固有状態を描いたもの. ベースラインはそれぞれ  $V_0$  で測った固有エネルギー  $E_{1,2,3}$ . (左のグラフとは条件が異なり, 解は 3 つだけである.)

$kL$  を正の値に取る (解には  $-k$  も同等に含まれるため一般性が保たれる) こととし,  $\arctan(x)$  ( $\tan(x)$  の逆関数) の値を  $0$  と  $\pi/2$  の間に制限する. 図 7.1(a) のように,  $-2\arctan(k/\sqrt{\kappa_0^2 - k^2}) + n\pi$  と  $kL$  との 2 種類の曲線 (直線) の交点の  $k$  が (7.4) を満たす値である. 障壁高さ無限大の場合から容易に類推されるように,  $n$  が偶数の場合がパリティが奇, 奇数の場合がパリティが偶の状態に対応している.

この交点の解を  $l = 8$  の場合について数値的に求めてこれから波動関数の形を計算して描いたのが図 7.1(b) である.

### 7.1.2 量子井戸光吸収

本講義では光物性には原則踏み込まないことにしているが, 量子井戸の光吸収についてちょっとだけ見ておく. 量子井戸に垂直に  $z$  軸を取り, 量子井戸内の電子・正孔の包絡関数を,  $\phi_e(z)$ ,  $\phi_h(z)$ , とすると,

$$\left. \begin{aligned} \psi_e(\mathbf{r}) &= \phi_e(z) \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{r}_{xy}) u_c(\mathbf{r}), \\ \psi_h(\mathbf{r}) &= \phi_h(z) \exp(i\mathbf{k}_{xy} \cdot \mathbf{r}_{xy}) u_v(\mathbf{r}). \end{aligned} \right\} \quad (7.5)$$

$u_c$ ,  $u_v$  はブロッホ関数の内の格子周期関数で  $\mathbf{k} = 0$  で代替している. 直接遷移の場合のバンド間光学遷移確率は

$$\langle u_c(\mathbf{r}) | \nabla | u_v(\mathbf{r}) \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_e(z)^* \phi_h(z) \quad (7.6)$$

に比例する. この後半の積分部分は, 障壁高さが無限大で包絡関数部分が  $\sin(n\pi z/L)$ ,  $\cos(l\pi z/L)$  ( $n, l = 1, 2, \dots$ ) となる場合, 電子包絡関数と正孔包絡関数とで  $\sin$ ,  $\cos$  および指数  $n$ ,  $l$  すなわち, 量子井戸内の離散準位指数が一致している時にだけゼロでない値を取り, 離散準位指数が同じ状態間でのみ光吸収が生じる. そのエネルギーは

$$E = E_g + \Delta E_n^{(eh)} + \frac{\hbar^2}{2\mu} k_{xy}^2 \quad (7.7)$$

である.  $\Delta E_n^{(eh)}$  は  $n$  番目の量子化準位の電子正孔のエネルギーを加算したものの,  $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$  は換算質量である. 最後の項は, 2次元系の状態密度に対応して,  $\Delta E_n^{(eh)}$  で吸収が生じた後, 連続的な吸収が生じることを示している.

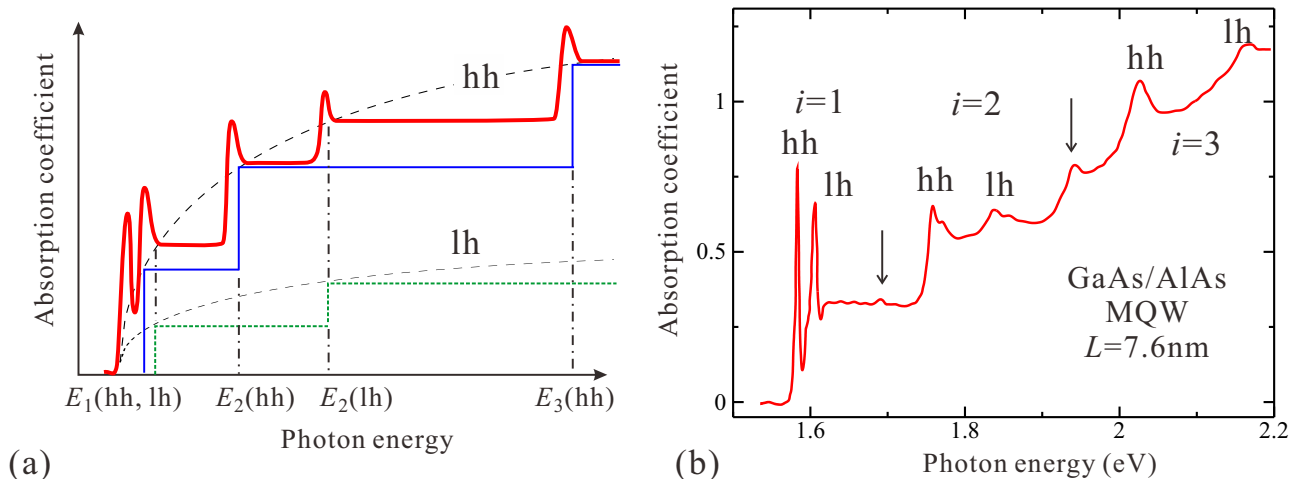


図 7.2 (a) 量子井戸の結合状態密度と励起子を考慮した吸収係数の模式図. 同じ量子数の電子・正孔波動関数間のみ遷移可能と近似し, 重い正孔, 軽い正孔に分けて描いた. (b) 井戸幅 7.6nm の AlAs/GaAs 量子井戸を 40 層並べた系で吸収係数を測定した結果. 測定温度は 6K. 矢印で示したように, 障壁高さが有限なことによる異なる量子数間の遷移による励起子ピークも現れている.

2次元系の状態密度は,  $E = (\hbar^2/2m^*)k^2$ ,  $n = \pi k^2/(2\pi)^2 = (E/4\pi)(2m^*/\hbar^2)$  より

$$\frac{dn}{dE} = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} H(E) \quad (H(x) : \text{Heaviside function}) \quad (7.8)$$

で, 定数であるから, (7.7) と合わせて, 段階的な吸収が期待される.

励起子は, 光吸収においては基礎吸収端よりも低エネルギー側の吸収ピークとして現れる. その様子を, 図 7.2(a) に量子井戸の場合に模式的に描いた.  $n = 0$  の基底状態のみが現れる場合を考えている. また, 障壁が十分高く, サブバンド量子数の異なる電子正孔波動関数の結合状態密度は存在しないとしている. 図 7.2(b) は, 井戸幅 7.6nm の AlAs/GaAs 量子井戸についての実験結果である. (7.8) の 2次元の状態密度を反映した段階的な吸収係数の変化の上に, hh, lh など示したような励起子吸収ピークが明瞭に現れている. また障壁高さが有限なために生じる異なる量子数間の遷移によるピークも見られる. 低次元化の影響は, 束縛エネルギーの増大に伴い, 励起子吸収ピークが吸収端より明瞭に低エネルギー側に離れること, 比較的高温までピークが観測されることなどに現れる.

以上から, これらの光吸収を調べることで, バンド不連続  $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$  が実験的に求められることがわかる. GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As の組み合わせで, 非常に初期の測定では試料の質のためか, lh と hh ピークが分離して現れず, このため,  $\Delta E_v$  が非常に小さくて lh 準位が収容できないと解釈され,  $\Delta E_c : \Delta E_v = 85 : 15$  とされていた時期もあったが, その後, この系では  $\Delta E_c : \Delta E_v = 57 : 43$  が良く合う経験則であることが確かめられている.

## 付録 6C : バンド不連続算出の試み

計算機的能力が飛躍的に増大し, LAPW のような多くの計算機資源を要する第一原理計算も比較的気楽に行えるようになった. それでも「簡単な物理的原理を用いて, 少数の実験パラメーターから統一的にバンド不連続を得る理論を構築したい」という試みは続けられている. これまでのそのような研究を紹介するが, 多くはその後の批判や実験, 第一原理計算との対応に耐えられないことが判明している.

### 6C.1 共通アニオン則

この「共通アニオン」則は, イオン性のある化合物半導体について考えられるもので [8], 価電子帯が陰イオンの  $p$  軌道が主でできているということから, 陰イオンが同じ化合物半導体同士は  $\Delta E_v \approx 0$  という乱暴な議論であり, 当然ながら精度は望めないし, 場合によっては実験や他の計算と大きくずれることもある.

## 6C.2 擬ポテンシャル理論

Affinity に関しても、第一原理から計算することがされているが、Anderson の頃は、様々な方法で  $\Delta E_c$  などを測定し、モデルに合うように affinity を決める、ということが行われていた。それに対してこれは、Frenley と Krömer によって考えられ提出された [9] 理論であり、バルクのパラメーターからバンド不連続を求めることを試みたものである。

計算法は、まず、自己無撞着擬ポテンシャル法で結晶内の静電ポテンシャルに対してバルクのバンド構造の相対位置を計算する [10]。次に、各構成原子の電気陰性度と結晶構造から、界面の静電ポテンシャルを計算し、これよりバンドの相対位置を求める、というもので、[9] では実験とも大体合っている、としている。

## 6C.3 LCAO 理論

Harrison が得意の原子軌道の線形結合 (LCAO) をヘテロ界面に適用したもの [11, 12]。Harrison 理論では、LCAO によってバンドが形成される。大抵の半導体は、 $s$  原子軌道 1 つと  $p$  原子軌道 3 つの合計 4 つの和で表せてしまう。価電子帯頂上は、 $p$  軌道でできていると考え、

$$E_v = \frac{\epsilon_p^c + \epsilon_p^a}{2} - \left[ \left( \frac{\epsilon_p^c - \epsilon_p^a}{2} \right)^2 + V_{xx}^2 \right]^{1/2} \quad (6C.1)$$

と表される。ここで、 $\epsilon_p^{c,a}$  はそれぞれ、cation, anion の  $p$  軌道のそれぞれのサイト上でのエネルギー、 $V_{xx}$  は、 $p$  軌道の隣接原子間の行列要素である。Harrison 理論 [11] によれば、 $m$  を電子質量、 $d$  を結合距離として

$$V_{xx} = 2.16\hbar^2/md^2 \quad (6C.2)$$

と近似される。この 2.16 という不思議な係数は、Si と Ge に対する別のバンド計算から得られた値 [13] にフィットするために得られたものである。

この方法では多くの半導体ヘテロ接合で価電子帯のバンド不連続が容易に計算できるため、しばしばその見積りに用いられる。比較的实验値に合うとされているが、GaAs-AlAs では  $\Delta E_v=0.04$  eV となるなど (実験値は約 0.5 eV) 合わないものもある [14]。実際、(6C.1) は  $\epsilon_p^c$  が共通アニオン則との主な違いになっていて、まだ相当粗い近似であることには変わりがない。

## 6C.4 界面双極子理論

Tersoff, Harrison が進めた理論である [15, 16, 17]。Tersoff は Harrison の LCAO 理論で、接合半導体間で電荷のやり取りがなく、双極子ができないのは現実的ではないと批判してこの理論を始めた [15] が、後に共同で双極子を取り入れた LCAO 理論を展開した [17]。Tersoff は半導体 (絶縁体) の表面では、バンドギャップ中に「電荷中性準位」のようなエネルギー位置が定義できる、と考えた。これは、価電子軌道と伝導電子軌道との寄与が一致してできるもので、金属-半導体の Schottky 接合を考えた場合、金属側の Fermi 準位と一致すべきもの、と考えられた\*4。これは、ごく短距離、格子定数程度の電荷移動である。 $E_F$  がバルクの値と一致するように生じる空間電荷のスケールとは異なる。2つの半導体を接合した場合、これらの準位が一致していれば、2種半導体間で電荷の移動はない。そのままでは一致していない場合、電荷移動によりこれらが一致する。したがって、この電荷中性準位の位置が計算できればそこからバンドオフセットも計算できることになる。

\*4 実際の Schottky 接合の多くでは、表面に高密度の欠陥準位が存在し、Fermi 準位はそこでピン止めされる。欠陥の少ないヘテロ界面では事情は異なる。



	$E_B$	$E_F(\text{Au})^a$	$E_F(\text{Al})^a$
Si	0.36	0.32	0.40
Ge	0.18	0.07	0.18
AlAs	1.05	0.96	
GaAs	0.70	0.52	0.62
InAs	0.50	0.47	
GaSb	0.07	0.07	
GaP	0.81	0.94	1.17
InP	0.76	0.77	

<sup>a</sup>Reference 18.

(a)

	Experiments	Theory	Difference
AlAs/GaAs	0.19 <sup>b</sup>	0.35	0.16
InAs/GaSb	0.51	0.43	-0.08
GaAs/InAs	0.17	0.20	0.03
Si/Ge	0.20	0.18	-0.02
GaAs/Ge	0.53	0.52	-0.01

<sup>a</sup>Reference 1.

<sup>b</sup>However, see text and Refs. 1, 19, and 20.

(b)

表 6C.1 (a) (6C.3) への両バンドの寄与を等分することで求めたギャップ内準位  $E_B$  と, Sze の教科書に出て  
いる, Au と Al を Schottky 電極に使った場合に実測された金属-半導体界面での  $E_F$  の位置.

電荷中性準位 (あるいは, 金属誘起ギャップ状態 (metal-induced gap states, MIGS)) の計算では, 単位胞内での  
実空間平均グリーン関数

$$G(\mathbf{R}, E) = \int d^3r \sum_{n\mathbf{k}} \frac{\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})}{E - E_{n\mathbf{k}}} = \sum_{n\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}}{E - E_{n\mathbf{k}}} \quad (6C.3)$$

への価電子帯と伝導帯の寄与の大きさを調べ, これらが等しくなる  $E$  を MIGS  $E_B$  とする.

この方法で求めた  $E_B$  と, Sze の教科書にある, Au と Al を Schottky 電極に使った場合に実測された金属-半導体  
界面での  $E_F$  の位置を表 6C.1(a) に示した. また, この  $E_B$  の一致から求めた価電子帯のオフセットと実測値の比較  
を表 6C.1(b) に示した. この表でも一致が十分良いとは言えないが, 更に実験も含めて様々な批判が出た. 結局, 化  
学トレンドなどを議論するには便利だが, デバイス設計に十分に信頼できる理論とは言い難いところである.

## 6C.5 第一原理計算の例

Wei と Zunger は界面のいわゆる第一原理計算を進め, 共通アニオン則, 更には単純な LCAO 理論の精度が低い  
のは, 界面双極子の効果というよりも, バルクのバンド計算の粗さによる部分が大きいと主張している [19]. すなわ  
ち, 価電子帯頂上 (valence band maximum, VBM) のエネルギー差  $\Delta E_{\text{VBM}}$  におけるバルクの寄与を  $\Delta E_{\text{VBM}}^b$ , 表  
面の寄与を  $\Delta E_{\text{VBM}}^s$  と置き,

$$\Delta E_{\text{VBM}} = \Delta E_{\text{VBM}}^b + \Delta E_{\text{VBM}}^s \quad (6C.4)$$

と書くと,  $\Delta E_{\text{VBM}}^s$  は小さく, LCAO 理論の問題はむしろ  $\Delta E_{\text{VBM}}^b$  の見積りにあったとする. すなわち, Harrison  
理論では,  $s$ ,  $p$  軌道のみ考えていたが, 特にカチオンの  $d$  軌道の寄与はかなりの大きさがあり, これを取り入れるこ  
とで, 実験との不整合はほとんど説明できる, としている (計算は, 全電子軌道を考えた一般化 LAPW 法による第  
一原理計算 [20] である).

計算結果を表 6C.2 に示している. なお, LAPW 法は現在では HiLAPW や VASP など, 便利なパッケージで比  
較的に使用できる (計算機リソースは沢山使用し, ジョブは重くなる). 周期系が対象であるが, ヘテロ界面の  
ような場合, 界面垂直方向に単位胞を大きく取り, 界面を 2 個含むような形で周期境界条件を課して計算をする. こ

Systems	Tight-binding <sup>a</sup>				All-electron (Present results)					
	$\Delta E_{\text{VBM}}^b$	$\Delta E_{\text{VBM}}^s$	$\Delta E_{\text{VBM}}^{\text{tot}}$	$\Delta E_{\text{VBM}}^{\text{MB}}$	Average (with SO)	Average (no SO)	Using 1s	Using 2s	Using 3p <sub>1/2</sub>	$\delta_{pd}$
CdTe-HgTe	0.00	0.09	0.09	$0.35 \pm 0.06^b$	0.37	0.39	0.377	0.388	0.400	0.34
CdTe-ZnTe	-0.07	0.00	-0.07	...	0.13	0.12	0.125	0.122	0.108	0.04
ZnTe-HgTe	0.07	0.09	0.16	...	0.26	0.29	0.277	0.286	0.289	0.30
AlAs-GaAs	0.01	0.15	0.16	$0.45 \pm 0.05^c$	0.42	0.41	0.41	0.40	...	0.31

表 6C.2 アニオンが Te 系, および As 系での単純 LCAO, 実験, 全電子第一原理計算による  $\Delta E_v$  を表にしたもの.

これはまた、超格子系について計算していることになり、包絡関数について、ヘテロ界面の階段関数がどの程度良い近似なのかをチェックすることもできる\*5。

## 付録 6D : 再結合電流と理想因子

本文で pn 接合の電流電圧特性を議論した際、拡散電流のみを考えた。実際の pn 接合では、その他様々な要因が電流に寄与する。ここでは、接合界面に生じた空乏層内でのキャリア再結合によって流れる電流を簡単に考察する。

最初に、バンド間キャリア再結合率が高い直接ギャップ半導体を考える。バンド間のキャリア再結合率を  $R_e$  と置くと、これはキャリア濃度  $p, n$  の両方に比例するはずである。すなわち  $pn$  積に比例する。その比例係数を  $R_{rc}$  とすると、

$$R_e = R_{rc}pn. \quad (6D.1)$$

$R_e$  は、暗状態で熱平衡にある場合には電子正孔対の熱励起率  $G_{th}$  に等しい。これと半導体方程式より

$$R_{rc} = \frac{G_{th}}{pn} = \frac{G_{th}}{n_i^2} \quad (6D.2)$$

である。光励起や外部電流による少数キャリア注入などが生じると、熱励起率と再結合率は一致せず、その差が実質再結合率  $U$  となる。n 型半導体では、正孔の濃度変化が主に問題となり、 $p_n = p_0 + \Delta p$ ,  $n_n \approx N_D$  とすると、

$$U = R_e - G_{th} = R_{rc}(pn - n_i^2) \approx R_{rc}\Delta p N_D \equiv \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (6D.3)$$

である。ここで、正孔の少数キャリア寿命

$$\tau_p = \frac{1}{R_{rc}N_D} \quad (6D.4)$$

を定義した。p 型半導体中の電子の寿命は、同様に

$$\tau_n = \frac{1}{R_{rc}N_A} \quad (6D.5)$$

と定義される。

以上に対して、Si や Ge のような間接ギャップ半導体では、キャリア再結合は主にトラップを介して行われる。この場合の実質再結合率は、詳細は略すが、Shockley-Read-Hall 統計 [21] により

$$U = \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_n \left[ n + n_i \exp \frac{E_t - E_i}{k_B T} \right] + \sigma_p \left[ p + n_i \exp \frac{E_i - E_t}{k_B T} \right]} \quad (6D.6)$$

のように表される。ここで、 $N_t$  はトラップ密度、 $\sigma_n, \sigma_p$  は、それぞれ電子と正孔の捕獲断面積、 $E_t$  はトラップ準位、 $E_i$  は真性半導体のフェルミ準位である。また、 $v_{th}$  は少数キャリアの熱エネルギー速度

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}} \quad (6D.7)$$

である。(6D.6) で、 $U$  は  $E_t \approx E_i$  で最大となる。実際には  $E_t$  はバンドギャップ中に分布しているが、特に  $E_i$  に近いところにトラップ準位を持つものが  $U$  に対して有効であるため\*6、最も粗い近似として、一種類のトラップのみ考え、 $E_t = E_i$  とする。すると、

$$U = \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_n (n + n_i) + \sigma_p (p + n_i)}. \quad (6D.8)$$

\*5 講師は、千葉大の中山らがこのような計算を行い、GaAs-AlAs 系については階段関数で良い、という結果を得て発表したことを覚えているが、当時の論文を発見できなかった。

\*6 これは、少数キャリアの寿命は、特に間接半導体では深い準位で決まっていることを意味する。結晶 Si で solar grade と呼ばれるものは、したがって、LSI 用の  $10^{-10} \sim 10^{-11}$  のような高純度は必要ではない一方、深い準位密度を抑えたものである必要がある。

バンド間遷移を考えた時と同様,  $U$  を  $\Delta p/\tau_p$ , あるいは  $\Delta n/\tau_n$  と書くことで,

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p v_{th} N_t}, \quad \tau_n = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_t} \quad (6D.9)$$

となる.

ここで, 式 (6.4) で導入した準フェルミ準位を使うと, 式 (3.13) より, np 積は

$$np = n_i^2 \exp \frac{\mu_e - \mu_h}{k_B T} \quad (6D.10)$$

である. これを (6D.6) へ代入すると, キャリア電荷を  $q$  として,

$$U = \frac{\sigma_n \sigma_p v_{th} N_t n_i^2 \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{\sigma_n \left[ n + n_i \exp \frac{E_t - E_i}{k_B T} \right] + \sigma_p \left[ p + n_i \exp \frac{E_i - E_t}{k_B T} \right]} \quad (6D.11)$$

である. 再び,  $E_t = E_i$  とし, 簡単のため,  $\sigma_n = \sigma_p = \sigma$  とすると,

$$U = \frac{\sigma v_{th} N_t n_i^2 \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{n + p + 2n_i} = \frac{\sigma v_{th} N_t n_i^2 \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{n_i \left[ \exp \frac{\mu_e - E_i}{k_B T} + \exp \frac{E_i - \mu_h}{k_B T} + 2 \right]} \quad (6D.12)$$

となる. 更に,  $\mu_e, \mu_h$  が空間位置などに依存して変化する場合,  $U$  が最大値を取るのは,  $E_i$  が  $\mu_e$  と  $\mu_h$  とのちょうど中間に位置する時である. この時, (6D.12) は,

$$U \approx \frac{\sigma v_{th} N_t n_i^2 \left[ \exp \frac{eV}{k_B T} - 1 \right]}{2n_i \left[ \exp \frac{eV}{2k_B T} + 2 \right]} \approx \frac{1}{2} \sigma v_{th} N_t n_i \exp \frac{eV}{2k_B T} \quad eV > k_B T \quad (6D.13)$$

となる. 最大値を取っているので, やや大きく見積もりすぎているが, 再結合による電流密度を

$$j_{rc} = \int_0^{w_a} qU dx \approx \frac{qw_a n_i}{2\tau} \exp \frac{eV}{2k_B T} \quad (6D.14)$$

と得る.

式 (6D.14) を (6.11) と見比べると, 指数関数項の電圧のところに因子  $1/2$  が付いていると見ることができる. これは, ごく平たく言うと, バンドギャップの「乗り越え」で電流を生じていた (6.11) の場合に対して, トラップで再結合を生じる際のエネルギーのやり取りは, その半分で良いことから生じている. このように, 電流が流れるプロセスが異なると, 一般に電圧の係数が異なる. そこで, 実験的には順方向電流を

$$J_F \propto \exp \frac{eV}{\eta k_B T} \quad (6D.15)$$

と書いて, 因子  $\eta$  を理想因子 (ideality factor) として, 実験にフィットさせ,  $\eta$  が 1 に近ければ拡散電流が支配的な理想に近い接合, 2 に近ければ空乏層内再結合電流が大きい接合, とされる.

実験室レベルでは,  $\eta$  は 2 どころか, 更に大きな値を示す接合ができることも稀ではない. また, pn 接合は, 接合面が空乏層中間部に来ることやドーパントの相互拡散などもあり, 2 に近い値が得られることが多いのに対し, ショットキー接合では, 比較的 1 に近い値が得られる傾向がある.

## 参考文献

- [1] 勝本信吾「半導体量子輸送物性」(培風館, 2014).
- [2] G. Bastard, “Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures” (Editions de Physique, France, 1990).
- [3] R. L. Anderson, IBM J. Res. Dev. **4**, 283 (1960); Solid-State Electronics **5**, 341 (1962).
- [4] C. Liu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 236601 (2008).
- [5] J.E. Matthews, A.E. Blakeslee, J. Crystal Growth **27**, 118 (1974).
- [6] H. C. Casey, Jr., M. B. Panish, “Heterostructure Lasers” Part B (Academic Press, 1978).
- [7] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature **499**, 419 (2013).
- [8] A. G. Milnes and D. L. Feucht, “Heterojunctions and Metal Semiconductor Junctions” (Academic Press, 2012).
- [9] W. R. Frensley and H. Kroemer, Phys. Rev. B **16**, 2642 (1977).
- [10] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, “Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors” (Springer, 1989).
- [11] W. A. Harrison, J. Vac. Sci. Tech. **14**, 1016 (1977).
- [12] W. A. Harrison *et al.*, Phys. Rev. B **18**, 4402 (1978).
- [13] D. J. Chadi and M. L. Cohen, phys. stat. solidi (b) **68**, 405 (1975).
- [14] 竹田 美和, 応用物理 **67**, 1077 (1998).
- [15] J. Tersoff, Phys. Rev. B **30**, 4874 (1984).
- [16] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **56**, 2755 (1986).
- [17] W. A. Harrison and J. Tersoff, J. Vac. Sci. Tech. B **4**, 1068 (1986).
- [18] S. M. Sze and K. K. Ng, “Physics of Semiconductor Devices” 3rd ed. (Wiley, 2008).
- [19] S.-H. Wei and A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **59**, 144 (1987).
- [20] S.-H. Wei, H. Krakauer, and M. Weinert, Phys. Rev. B **32**, 7792 (1985).
- [21] W. Shockley and W. T. Read, Phys. Rev. **87**, 835 (1952); R. N. Hall, Phys. Rev. **87**, 387 (1952).

前回は、ヘテロ接合による閉じ込め効果を調べた。ヘテロ構造による障壁が無限厚ではなくて有限な場合は量子トンネル効果により障壁を通した伝導現象が生じる。初等量子力学の続きであるが、半導体量子物理の黎明期にあって現実の系でこれを見ることができると示されたのは大変大きなことで、その後の分野の隆盛、多くの素子の実用化につながった。

### 7.1.3 二次元系の励起子

前節で、吸収端エネルギー付近にピーク構造が見えたが、これは 3.3.2 節の励起子に相当する吸収ピークである。ただし、量子井戸構造により次元が下がっているため、ややパルクとは定量的に異なる。パルク (3 次元系) では水素原子で話を済ませていたが、ここで 2, 3 両次元について簡単に内容を見ておこう。

水素原子問題と考え、クーロン中心力ポテンシャル  $V_c(\mathbf{r})$  を持つ Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_r^*}\nabla^2 + V_c(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (7.9)$$

を低次元で取り扱う。ここでは、 $m_r^*$  は換算質量とする。また、

$$V_c^{2d}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\mathbf{r}|}, \quad V_c^{1d}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0(|z| + 0.3r_0)} \quad (7.10)$$

と、特に 1 次元 ( $z$  軸とする) ではポテンシャル形状の変更が必要である。これは、式 (7.9) をそのまま 1 次元化すると励起子エネルギーの発散などの異常を生じるためである。実際に近い有限幅の量子細線 (ここでは半径  $r_0$  の円筒) を考え、その効果を (7.9) を 1 次元化したものにポテンシャル形状として実験式として取り込んだものが (7.10) である。

以下、水素原子問題そのものであるが、簡単にフォローすると、(7.9) の解を動径方向と回転の自由度への変数分離仮定により

$$\psi^{3d} = \rho^l e^{-\rho/2} R(\rho) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad \psi^{2d} = \rho^{|m|} e^{-\rho/2} R(\rho) e^{im\varphi}, \quad \psi^{1d} = R(\zeta) \quad (7.11)$$

とすることができる。  $\rho$ ,  $\zeta$  は動径方向座標、  $z$  軸座標を換算質量と束縛エネルギーを使い無次元化したもので

$$\rho = \alpha r, \quad \zeta = \alpha(|z| + 0.3r_0), \quad \alpha = \frac{\sqrt{-8m_r^*E}}{\hbar}. \quad (7.12)$$

$R(\rho)$ ,  $R(\zeta)$  は、次の方程式の解である。

$$\begin{cases} \left(\rho \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + (p+1-\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} + q\right) R(\rho) = 0 : & 3 \text{次元}, 2 \text{次元}, \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} + \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\lambda}{\zeta}\right) R(\zeta) = 0, \quad \lambda \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{-\frac{m_r^*E}{2E}} : & 1 \text{次元}. \end{cases} \quad (7.13)$$

ただし、 $p$ ,  $q$  は次元によって変化し、

$$p = \begin{cases} 2l+1 & (3 \text{次元}) \\ 2|m| & (2 \text{次元}) \end{cases}, \quad q = \begin{cases} \lambda - l - 1 & (3 \text{次元}) \\ \lambda - |m| - 1/2 & (2 \text{次元}) \end{cases} \quad (7.14)$$

である。  $l$  は角運動量子数、  $m$  は磁気量子数である。

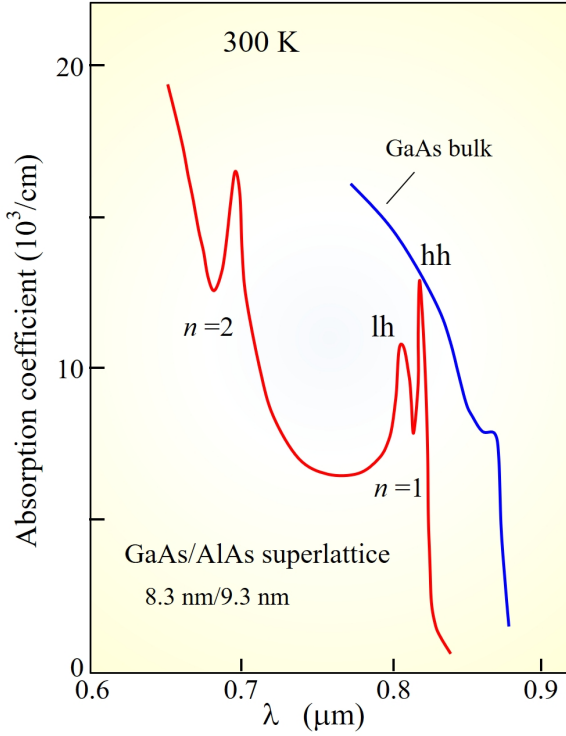


図 7.3 室温での GaAs(8.3 nm)/AlAs(9.3 nm) の超格子の吸収係数に現れた、励起子の吸収ピーク。超格子ではあるが、井戸間の結合は弱く、同様に見ることができる。図中で  $n$  と書かれているのはサブバンドの指数で、本文中の励起子波動関数の指数ではない。基底バンド ( $n = 1$ ) 端の励起子吸収ピークは, lh と hh とに分離している [1].  $n = 2$  端のピークは hh によるものと思われる。

3次元, 2次元の場合, (7.13) の  $R(\rho)$  を次のように展開する.

$$R(\rho) = \sum_{\nu} \beta_{\nu} \rho^{\nu}, \quad \beta_{\nu+1} = \beta_{\nu} \frac{\nu - q}{(\nu + 1)(\nu + p + 1)}. \quad (7.15)$$

この展開式が有限項  $\nu_{\max}$  で止まるためには,  $\nu_{\max} = q$  である. そこで, 主量子数  $n$  が次のように定義される.

$$n \equiv \lambda = \nu_{\max} + l + 1 \quad (3 \text{次元}), \quad n \equiv \lambda - \frac{1}{2} = \nu_{\max} + |m| \quad (2 \text{次元}). \quad (7.16)$$

以上から, 3次元, 2次元の場合の励起子のエネルギー準位を次の形に書くことができる.

$$E_{bn}^{3d} = -\frac{E_0}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots, \quad (7.17)$$

$$E_{bn}^{2d} = -\frac{E_0}{(n + 1/2)^2} \quad n = 0, 1, \dots. \quad (7.18)$$

ただし, エネルギー単位  $E_0$  は

$$E_0 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon\epsilon_0 a_0^*}, \quad a_0^* = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 \hbar^2}{m_r^* e^2} \quad (7.19)$$

である.  $a_0^*$  は有効ボーア半径である. (7.16) より, 2次元の場合は  $n = 0$  が可能であり, 基底状態エネルギーは3次元の  $-E_0$  に対して,  $-4E_0$  で, 束縛エネルギーが4倍大きくなる. これは, 3次元の場合  $z$  方向への閉じ込めによる運動量不確定性から運動エネルギーが増加するのに対して, 2次元系ではこれはすでにバンド端のエネルギーシフトとして取り込まれ, これを基準とした束縛エネルギーであることから定性的には容易に理解される.

一般の動径方向波動関数はラゲール陪多項式と指数関数を使って表され, 3次元の場合 1s 波動関数は  $\psi_{1s}^{3d} \propto \exp(-r/a_0^*)$  と書ける. 同様に  $\psi_{1s}^{2d} \propto \exp(-r/a_0^{*2d})$ , (7.13) へ  $l = m = 0$  として代入すると,  $a_0^{*2d} = a_0^*/2$  が得られる. すなわち, 2次元励起子の空間サイズは束縛エネルギーの増加と呼応して3次元の半分になる.

図 7.3 に示したのは, GaAs(8.3 nm)/AlAs(9.3 nm) の超格子の吸収係数 (赤線) と高純度 GaAs パルクの吸収係数 (青線) である. パルクの吸収係数には吸収端に励起子の影響を示す肩構造が現れているが, 超格子の方は明瞭なピーク構造を取り, 第1サブバンドに属する励起子は, 正孔に有効質量が2種類 (lh, hh) あり, 換算質量の変化によりピークが分裂の様子が見えている. 第2サブバンドの励起子ピークも明瞭に見えており, hh によるものと思われる. これらは, 上記のように, 閉じ込め効果によって束縛エネルギーが大きくなったことによるものである.

## 7.2 量子障壁

量子井戸ポテンシャルをひっくり返したものが量子障壁ポテンシャル (quantum barrier potential) であり, 量子井戸で井戸内の束縛状態を主に問題にしたのに対し, ひっくり返し状態として対応する共鳴散乱 (resonant scattering) 状態に特異なトンネル現象が現れる.

### 7.2.1 転送行列

図 7.5(a) のように, ある領域  $Q$  を考え, そこへ左から入射する波数  $k$  の波動関数  $A_1(k)$  と右へ放射する波動関数  $A_2(k)$ , ちょうどその逆の  $B_2(k)$ ,  $B_1(k)$  を考えよう. ここで, 左右の領域は 1 次元自由空間と考え, 運動量保存により  $k$  は共通に取る. この時添え字の 1, 2 は, 図の「境界 1, 2」での波動関数の値であることを意味する.

幅  $L$ , 高さ  $V_0$  の矩形障壁の場合を具体的に計算する.  $\kappa \equiv \sqrt{2mV_0}/\hbar$ , 障壁内の波動関数を  $V_i(\kappa) + W_i(\kappa)$  とする.  $V, W$  はそれぞれ  $e^{-\kappa x}$ ,  $e^{\kappa x}$  に対応し,  $\partial V_i/\partial x = -\kappa V_i$ ,  $\partial W_i/\partial x = \kappa W_i$  である. また, 添え字の  $i$  は上と同様, 空間位置を表し, 1, 2 を障壁の左右端にとると

$$V_2 = V_1 e^{-\kappa L}, \quad W_2 = W_1 e^{\kappa L}$$

となる. これを用いて, 境界 1, 2 での接続条件を書き下ろすと,  $\partial A_{1,2}/\partial x = ikA_{1,2}$ ,  $\partial B_{1,2}/\partial x = -ikB_{1,2}$  であるから,

$$A_1 + B_1 = V_1 + W_1, \quad A_2 + B_2 = e^{-\kappa L}V_1 + e^{\kappa L}W_1, \quad (7.20)$$

$$ik(A_1 - B_1) = \kappa(-V_1 - W_1), \quad ik(A_2 - B_2) = \kappa(-e^{-\kappa L}V_1 + e^{\kappa L}W_1) \quad (7.21)$$

となる.  $A \sim V$  の  $k, \kappa$  依存性の表記は省略した.

まず  $V_1, W_1$  を消去し, 次いで  $(A_2, B_2)$  を  $(A_1, B_1)$  で表す形にすると, 線形方程式であるから, 行列形式で

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \equiv M_T \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (7.22)$$

と書くことができ, 行列  $\{m_{ij}\}$  は

$$\begin{cases} m_{11} = \left[ \cosh(\kappa L) + i \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \sinh(\kappa L) \right], \\ m_{12} = -i \frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa} \sinh(\kappa L), \\ m_{21} = m_{12}^*, \quad m_{22} = m_{11}^*, \end{cases} \quad (7.23)$$

と与えられる.

$M_T$  の形はもちろんポテンシャルによって変化するが, (7.22) のような行列形式で表現できることはシュレディンガー方程式の線形性から一般に成立する.  $M_T$  を転送行列 (transfer matrix) と呼ぶ.

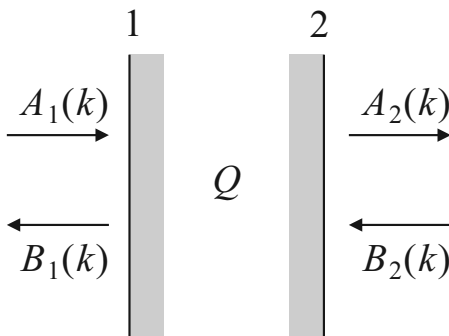


図 7.4 転送行列の概念図.

式 (7.23) で  $M_T$  が  $m_{21} = m_{12}^*$ ,  $m_{22} = m_{11}^*$  の形になったのは, 系が時間反転に対して対称であることと, ポテンシャルが左右対称であることによる.

$B_2 = 0$  として, 入射波  $A_1$  に対する透過波  $A_2$  と反射波  $B_1$  の比を求めると, (7.22), (7.23) より直ちに

$$t \equiv \frac{A_2}{A_1} = \frac{|m_{11}|^2 - |m_{12}|^2}{m_{11}^*} = \frac{1}{m_{11}^*} = \frac{2ik\kappa}{(k^2 - \kappa^2) \sinh(\kappa L) + 2ik\kappa \cosh(\kappa L)}, \quad (7.24)$$

$$r \equiv \frac{B_1}{A_1} = -\frac{m_{21}}{m_{22}} = \frac{(k^2 + \kappa^2) \sinh(\kappa L)}{(k^2 - \kappa^2) \sinh(\kappa L) - 2ik\kappa \cosh(\kappa L)} \quad (7.25)$$

が得られる.  $t$ ,  $r$  をそれぞれ複素透過振幅 (imaginary transmission coefficient), 複素反射振幅 (imaginary reflection coefficient) と呼ぶ.

$$\text{透過率: } T = |t|^2, \quad \text{反射率: } R = |r|^2, \quad |t|^2 + |r|^2 = 1 \quad (7.26)$$

であり, 転送行列  $M_T$  は

$$M_T = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix} \quad (7.27)$$

と表すことができる.

## 7.2.2 二重障壁の透過

図 7.5 の二重障壁ポテンシャルの透過率を求める. 量子井戸と量子障壁は互いに「さかさま」の関係にあったが, 2重障壁はその中間の構造と見ることができる. 境界を 1~4 と置き, 各境界での波動関数を  $A_{1-4}$ ,  $B_{1-4}$  とする. 左側の障壁は前節と同じであるから, (7.23) が使える. 次に, 障壁の間の井戸状になった部分であるが, ここでは波の進行に伴い, 位相因子  $\exp(ikW)$  だけが波動関数について次の障壁に入射するので転送行列として

$$M_W = \begin{pmatrix} \exp(ikW) & 0 \\ 0 & \exp(-ikW) \end{pmatrix} \quad (7.28)$$

と書くことができる. 最後に右の障壁は, 左と全く同じである. 転送行列は空間座標の原点によらない形に書かれていたので,  $M_T$  をそのまま使うことができる.

2重障壁全体の転送行列  $M_{DW}$  は定義から明らかなように

$$M_{DW} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikW} & 0 \\ 0 & e^{-ikW} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

と全体の積の形となる.

透過率を求めると, (7.29) より

$$T_{11} = m_{11}^2 \exp(ikW) + |m_{12}|^2 \exp(-ikW) \quad (\because m_{12} = m_{21}^*)$$

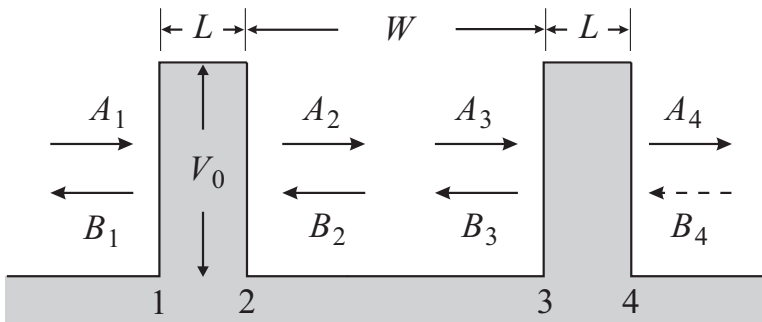


図 7.5 二重障壁ポテンシャルの模式図.



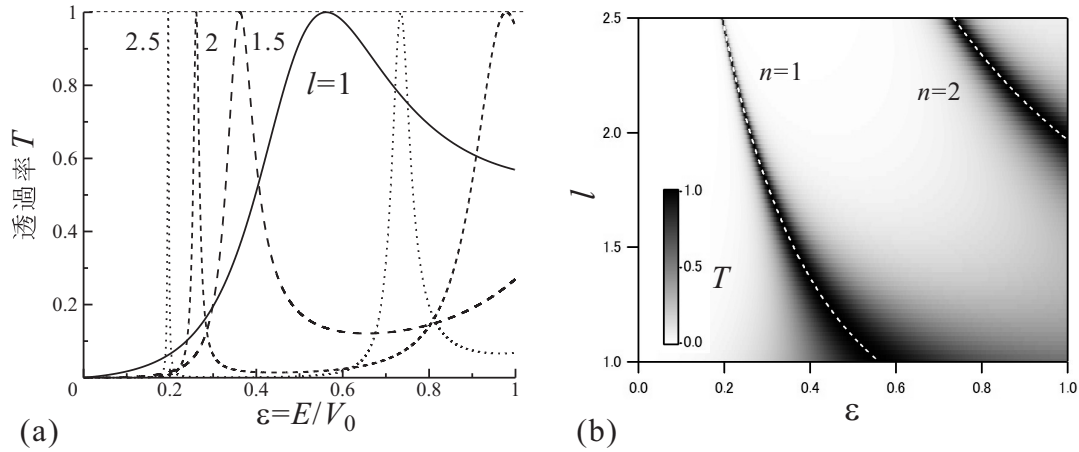


図 7.6 (a) (7.30) から計算した入射波の運動エネルギーに対する透過率  $T$ .  $W = 2L$  に固定し, 様々な障壁層厚 (従って間隔) について計算したもの. (b) 同じ計算結果を, 濃淡プロットしたものの白い点線は (7.31), (7.32) を数値計算したもの.

である. 障壁が 2 枚あることによる干渉効果は, 第 2 項に現れている.  $m_{11}$  の偏角を  $\varphi$  として  $m_{11} = |m_{11}| \exp(i\varphi)$  と書くと,

$$\begin{aligned} T_{11}T_{11}^* &= (|m_{11}|^2 e^{2i\varphi} e^{ikW} + |m_{12}|^2 e^{-ikW})(|m_{11}|^2 e^{-2i\varphi} e^{-ikW} + |m_{12}|^2 e^{ikW}) \\ &= (|m_{11}^2| - |m_{12}|^2)^2 + 2|m_{11}|^2|m_{12}|^2(1 + \cos(2(\varphi + kW))) \\ &= 1 + 4|m_{11}|^2|m_{12}|^2 \cos^2(\varphi + kW) \end{aligned}$$

となる. これより, 透過率が

$$T = \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{1}{1 + 4|m_{11}|^2|m_{12}|^2 \cos^2(\varphi + kW)} \quad (7.30)$$

と計算される. (7.23) と合わせて, 透過率が得られたことになる.

図 7.6(a) に障壁幅と井戸幅の関係  $W = 2L$  に固定し, 様々な  $L$  について透過率  $T$  のエネルギー依存性を示した.  $L$  は  $l \equiv (\sqrt{2mV_0}/\hbar)L$ ,  $E$  は  $\epsilon \equiv E/V_0$  として無次元化している. 透過率が 1 になっているのは, 共鳴散乱 (resonant scattering) で, 条件は (7.30) より

$$\varphi + kW = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (7.31)$$

である. ただし,  $\varphi$  は (7.23) より

$$\varphi = \arctan \left[ \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \tanh(\kappa L) \right] \quad (7.32)$$

と書け,  $-\pi/2 < \varphi < \pi/2$  とすることに (これにより,  $n$  の範囲が自然数に定まる).

図 7.6(b) は同じデータを  $\epsilon - l$  の面上に白黒濃淡プロットしたもので, 白い破線は上記共鳴散乱の条件を示している.  $l$  が大きくなるにつれてピークが鋭くなるのは, トンネル逸出確率が減少して井戸内に留まる時間が長くなり, エネルギーと時間との不確定性関係で決まる寿命幅が減少することに対応している. また,  $W$  を維持したまま  $L \rightarrow \infty$  とすると, 有限障壁量子井戸になるので, 共鳴散乱条件は束縛固有状態条件に一致する.

### 7.2.3 2重障壁ダイオードの電気伝導

2重障壁ダイオードは, 2重障壁構造をヘテロ接合で実現した素子である. ここでは GaAs-AlAs のヘテロ接合で, p 型電極を使って正孔に対する障壁を考える. この場合,  $\Delta E_v = 0.47$  eV である. GaAs の正孔は, 2種類存在し, 有効質量は  $0.51m_0$  と  $0.082m_0$  である. これらはそれぞれ「重い正孔」(hh), 「軽い正孔」(lh) と呼ばれる. AlAs 中の有効質量変化は無視する.

考えるポテンシャルは、図 7.7(a) 上図の通り、障壁層厚、井戸幅共に 5nm である。2重障壁の部分にはドーピングがされていない。図 7.7(a) に走査透過電子顕微鏡 (scanning transmission electron microscope, STEM) による断面画像を示す。

以上のパラメータと図 7.7 の構造を使って透過率  $T$  を計算した結果を図 7.8 に示した。正孔の有効質量が重いものに対して障壁の高さが高く、透過率ピークは非常に鋭くなっており、片対数スケールにしないと裾の様子が見えない。障壁よりエネルギーの低い領域に重い正孔が 5 つ、軽い正孔が 2 つのピークを持っている。式 (7.31) により井戸内の共鳴準位を数値計算すると、図 7.7(a) の図内に示したような位置となる。

このままでは共鳴準位に正孔を通すことができないので、図 7.7(b) に示すようにソース-ドレイン間に電圧  $V_{sd}$  を加える。ソース、ドレイン内には沢山の正孔がいて電場を遮蔽するので、加えた電圧のほとんどは 2重障壁部分にかかることになる。ただし、実際には 2重障壁部分以外に、接触抵抗によるかなり大きな電圧が生じる。

2重障壁部分には電場が発生するためポテンシャルが矩形でなくなってしまうが、ここでは無視することにしてよ。すると、図のように加えた電圧が共鳴準位の 2 倍に達した時、注入される正孔のエネルギーが共鳴準位に達する。この時 2重障壁の透過率がピークになるため、2重障壁を通る正孔の量すなわち電流がピークを取るはずである (付録 E を見よ)。

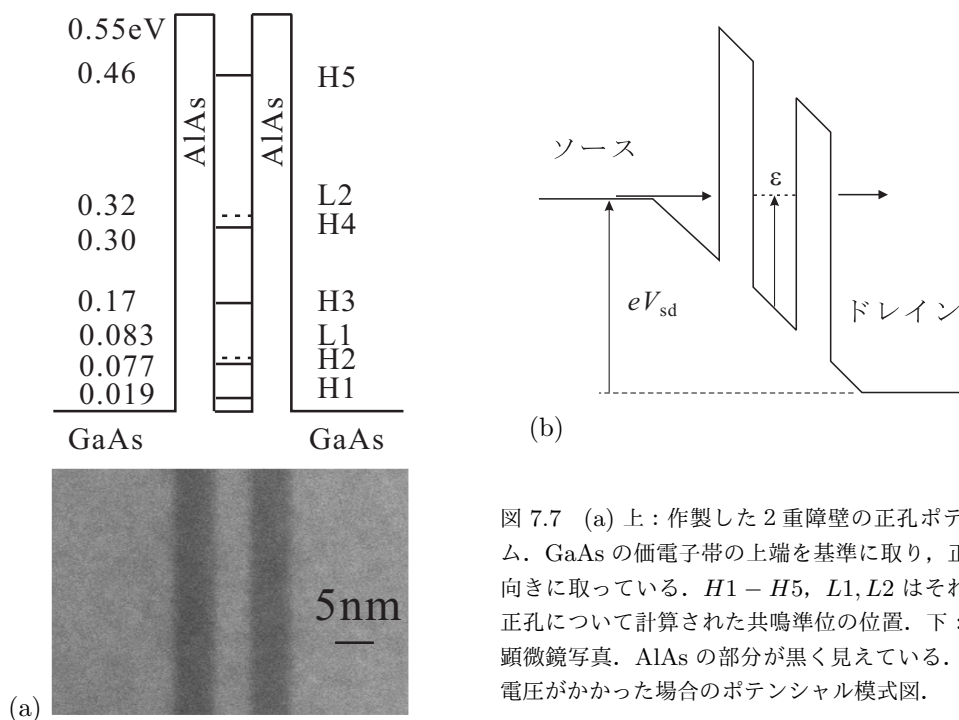


図 7.7 (a) 上: 作製した 2重障壁の正孔ポテンシャルダイアグラム。GaAs の価電子帯の上端を基準に取り、正孔のエネルギーを上向きに取っている。H1 - H5, L1, L2 はそれぞれ重い正孔、軽い正孔について計算された共鳴準位の位置。下: 試料の走査透過電子顕微鏡写真。AlAs の部分が黒く見えている。(b) ソース-ドレイン電圧がかかった場合のポテンシャル模式図。

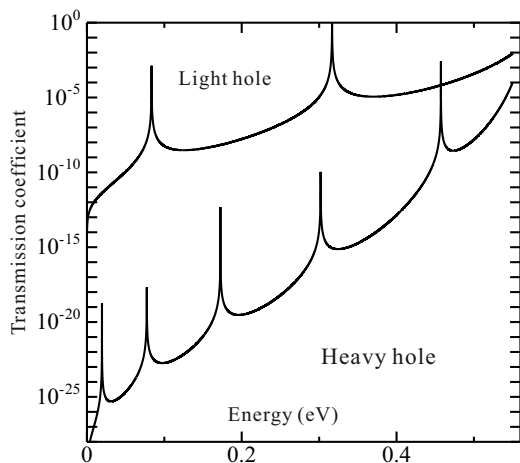


図 7.8 本文中のパラメータを使い式 (7.30) を用いて計算した 2重障壁構造の透過率のエネルギー依存性。透過率ピークの値は 1 に達しているが、極めて鋭くなっている。

実際に測定された2重障壁ダイオードの電流電圧特性を図7.9(a)に示した。電圧を加えていくと、電流にいくつかのピーク構造が現れている。ピーク位置を明瞭にするため、微分を取って符号を変え、適当な定数  $C$  を加えて対数プロットを取ったのが図7.9(b)である\*1。

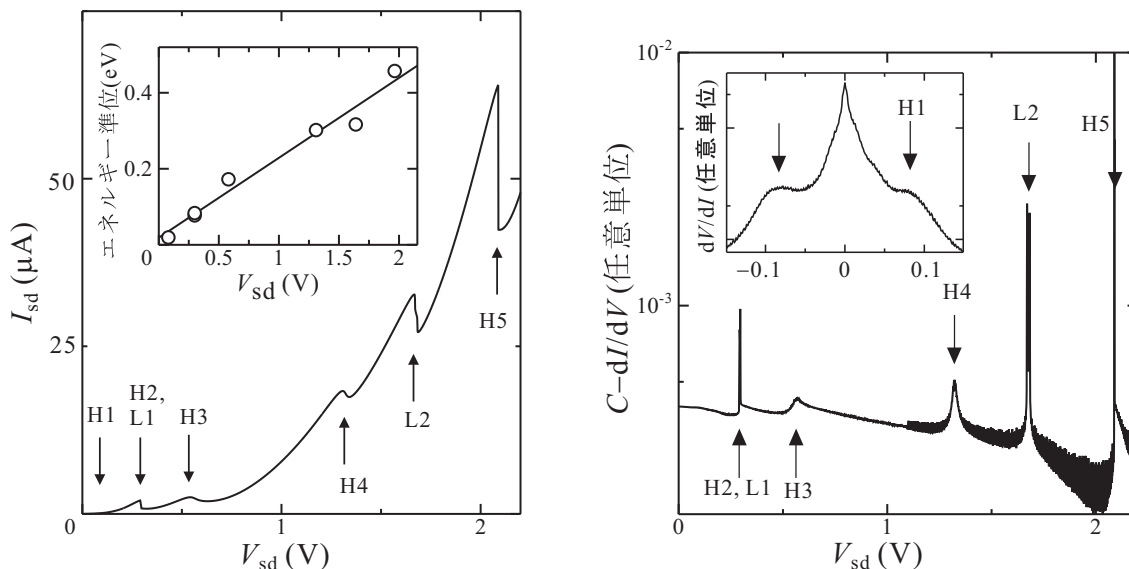
## 7.2.4 超格子

2重障壁の次は非常に大切な2重量子井戸があるが、量子ビットの項で後述することにし、江崎玲於奈 (Leo Esaki) と Raphael Tsu が提案し [2], 多彩な物理現象を生み出してきたヘテロ接合超格子 (heterojunction superlattice) について簡単に紹介しておこう。江崎らの提案したヘテロ接合超格子とは、ヘテロ接合を用いて、図7.10のようなクローニッヒ-ペニー (Kronig-Penny) 型のポテンシャルを実現しよう、というもので、接合面によって失われた空間並進対称性を、異なる形で回復し、 $k$  空間でのサイズの小ささをを用いて様々な現象を起こし調べよう、というものである。

Kronig-Penny ポテンシャルを  $V_{KP}(x)$  とし、Schrödinger 方程式を

$$\left[ -\frac{\hbar^2 d^2}{2mdx^2} + V_{KP}(x) \right] \psi(x) = E\psi(x), \quad V_{KP}(x) = V_{KP}(x+d) \quad (7.33)$$

とする。Bloch の定理により、波動関数は、 $d = L + W$  を格子長として格子周期関数と平面波部分とに分けること



(a)

(b)

図7.9 (a) 2重障壁ダイオードの電流電圧特性。ピークに対応する共鳴準位を矢印で示している。挿入図はピークに対応するエネルギー準位位置を電圧の関数としてプロットしたもの。(b) ピーク位置を強調するため電流を電圧で微分し、適当な定数  $C$  から引いて上下を逆転した後対数プロットしたもの。挿入図は同様なプロットをして原点付近を引き延ばしたもの。

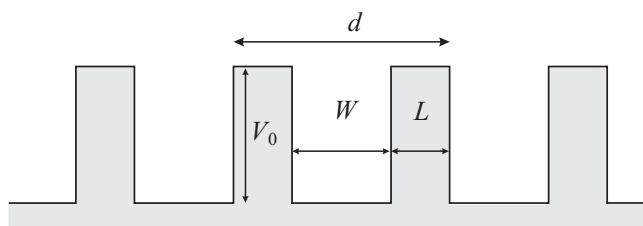


図7.10 1次元矩形周期ポテンシャル (Kronig-Penny ポテンシャル)

\*1 この操作は単にピーク位置を強調するためのものである。

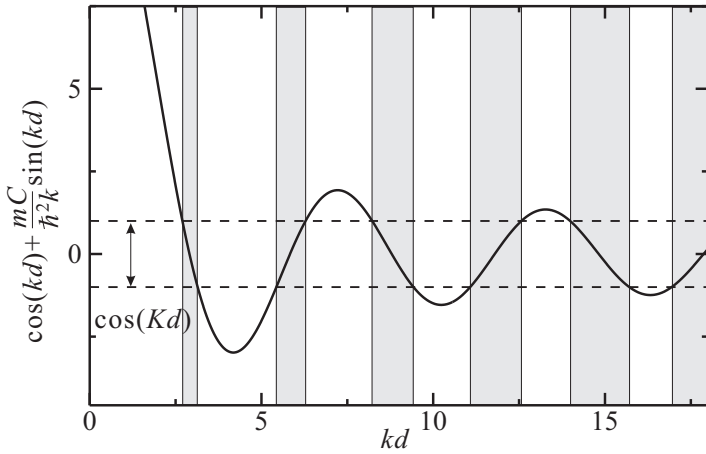


図7.11 (7.40)の右辺を $kd$ の関数としてプロットしたもの.  $mdC/\hbar^2 = 13$ とした. 灰色の部分が「許容帯」.

ができる.

$$\psi_K(x) = u_K(x)e^{iKx}, \quad u_K(x+d) = u_K(x), \quad K \equiv \frac{\pi s}{Nd}. \quad (7.34)$$

$s$  は  $-N+1$  から  $N-1$  までの整数値を取る. 単位胞を表す転送行列  $M_d$  は

$$M_d(k) = \begin{pmatrix} e^{ikW} & 0 \\ 0 & e^{-ikW} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11}e^{ikW} & m_{12}e^{ikW} \\ m_{21}e^{-ikW} & m_{22}e^{-ikW} \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

と書ける.  $i$  番目のセルの左側の入出力を  $(a_i, b_i)$  と書くと (7.34) より,

$$\begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \end{pmatrix} = M_d(k) \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} = e^{iKd} \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} \quad (7.36)$$

でなければならない. すなわち, これは  $e^{iKd}$  を固有値とする  $M_d$  の固有値問題である.  $M_d$  のユニタリ性からあるいは, (7.36) を逆向きに回した式から, 2つの固有値は  $e^{\pm iKd}$  である. (7.23) の  $\{m_{ij}\}$  を用いて

$$e^{iKd} + e^{-iKd} = 2 \cos Kd = \text{Tr}M_d = 2\text{Re}(e^{-ikW} m_{11}^*), \quad (7.37)$$

$$\cos [K(L+W)] = \cosh(\kappa L) \cos(kW) - \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \sinh(\kappa L) \sin(kW) \quad (7.38)$$

が得られる. (7.32) の  $\varphi$  を使うと

$$\cos(Kd) = |m_{11}| \cos(kW + \varphi) = \frac{1}{|t|} \cos(kW + \varphi) \quad (7.39)$$

と書くこともできる.

ここで,  $L \rightarrow 0$ ,  $W \rightarrow d$ ,  $V_0 \rightarrow \infty (V_0L = C(\text{constant}))$  という極限を取って,  $\delta$  関数列ポテンシャルにすると,

$$\cos(Kd) = \cos(kd) + \frac{mC}{\hbar^2k} \sin(kd). \quad (7.40)$$

この右辺をグラフにすると, (7.11) のようになり,  $[-1, +1]$  で  $K$  の解が存在するので, グレーの帯で示した部分がエネルギーバンドである. 1つのバンドのエネルギー分散を簡単化して

$$E(K) = \frac{E_{nw}}{2} (1 - \cos Kd) \quad (7.41)$$

としてみる. 群速度と有効質量は,

$$v_g(K) = \frac{E_{nw}d}{2\hbar} \sin Kd, \quad m^*(K) = \frac{\hbar^2}{E_{nw}d^2} \sec Kd. \quad (7.42)$$

一定電場  $E_m$  が系にかかっている時の周期ポテンシャル中の電子の運動方程式は

$$m^* \frac{dv}{dt} = \hbar \frac{dK}{dt} = F = eE_m \quad (7.43)$$

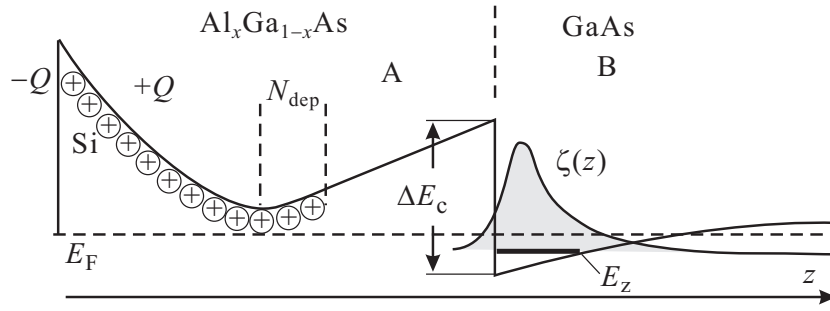


図 7.12 変調ドーブによるヘテロ接合 2 次元電子系の生成スキーム例.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  の場合について例示している.

と書くことができる. すなわち, 周期ポテンシャル中では実際に負の質量が生じる.

(7.43) に従って加速を続けると,  $K = eE_m t/\hbar$  と変化する. 原点  $x = 0$  に群速度 0 の波束を置き, このような条件下で時間発展を見たとしても, (7.42) より

$$v_g(t) = \frac{E_{nw}d}{2\hbar} \sin\left(\frac{eE_m d}{\hbar}t\right), \quad x(t) = \frac{E_{nw}}{2eE_m} \left[1 - \cos\left(\frac{eE_m d}{\hbar}t\right)\right] \quad (7.44)$$

となって, 常に一方方向に加速を続けているにも関わらず, 波束の位置は振動を続ける. これをブロッホ振動 (Bloch oscillation) と呼ぶ. 超格子ではバンドが超周期によってミニバンドに分裂して小さくなっているため, 電場により実際にバンド頂上に加速される可能性があり, 条件によって  $\hbar$  ブロッホ振動が観測されている.

### 7.3 変調ドーブと 2 次元電子系

ヘテロ接合を用いて作製される人工系で最もポピュラーなものが変調ドーブヘテロ接合 2 次元電子系 (two-dimensional electron gas, 2DEG) で, 図 7.12 のように単一のヘテロ接合を作り, バンドギャップの大きな半導体側にドーピングを行う. 以下 n 型について見ていく.

$z$  軸を図のように表面, ヘテロ接合面に垂直に取ろう. 硬いバンド近似では接合面で伝導帯に不連続  $\Delta E_c$  が生じ, 電荷が再配置する. 半導体の組み合わせとして混晶  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  と  $\text{GaAs}$  の組み合わせを使用すると, この  $\Delta E_c$  の階段関数  $V_h(z)$  前節の近似内では包絡関数を波動関数そのものと考え, 更に電子間相互作用を Hartree 近似で扱えば, イオン化ドナー, バンド不連続, 2DEG 自身が作る静電ポテンシャルそのものが 2DEG の量子化準位を作る形の自己無撞着な Poisson-Schrödinger 方程式を解くことで面垂直方向波動関数 (包絡関数) が得られる.

接合面に垂直な内部方向に  $z$  軸を取る. 図 7.12 で表面の Schottky 障壁により空乏化領域が生じる. 第 9 回 4.1 節で見たように, 表面に金属があるとしてここに堆積した電荷を  $-Q$  とすると, Schottky 障壁による電場は, 空乏領域のイオン化ドナー (図では Si) 電荷  $+Q$  によって補償され, 内部には入らない. 残りのイオン化ドナーすべて (すなわち,  $z$  方向に積分したもの) の接合単位面積あたりの密度を  $N_{\text{ddep}}$  とすると, これによって生じる静電ポテンシャルは, ドープ領域より内部では  $V_D(z) = (4\pi e^2/\epsilon\epsilon_0)N_{\text{ddep}}z$  である. ドープ領域とヘテロ接合面との間には通常スペーサーと呼ばれる非ドープ領域が設けられる. これによって 2 次元電子とイオン化不純物中心が空間的に分離されるため, 2 次元電子は極めて高い移動度を持つ. ただし, 図からわかるように, スペーサーを厚くするとバンドが持ち上がりすぎて 2 次元電子ができなくなってしまう.

2DEG 波動関数を  $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y)\zeta(z)$  と変数分離形に書いておく.  $\zeta(z)$  が包絡関数である. 2DEG 面密度を  $n_{2d}$  と書くと, これは,  $\zeta(z)$  が  $z$  方向の運動エネルギーとして持つ離散準位エネルギー  $E_z$  の関数である. 位置  $z'$  の電荷面密度は  $-en_{2d}|\zeta(z')|^2$  で, このシート電荷が作る電場は, Gauss の定理より  $-(4\pi e^2/\epsilon\epsilon_0)n_{2d}|\zeta(z')|^2|z - z'|$  と書くことができる. これが, 平均場近似の Hartree ポテンシャルを作ると考える.

$$V_{2d}(z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0}n_{2d}(E_z) \int_{-\xi}^{\infty} |\zeta(z')|^2 |z - z'| dz'.$$

$\xi$  は,  $\zeta(z)$  の AlGaAs 側への沁み出し距離より十分長く取る. 接合面で不連続  $\Delta E_c$  を持つ階段ポテンシャルを  $V_h(z)$  とすると, 2DEG が感じるポテンシャルは

$$V(z) = V_h(z) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[ N_{\text{dep}}z - n_{2d}(E_z) \int_{-\xi}^{\infty} |z - z'| |\zeta(z')|^2 dz' \right] \quad (7.45)$$

となる. これと,  $\zeta(z)$  に関する Schrödinger 方程式

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \zeta(z) = E_z \zeta(z) \quad (7.46)$$

を自己整合的に解くことで  $\zeta(z)$  を得ることができる. ただし, 有効質量  $m^*$  は 2 つの半導体で変化し, 境界条件として

$$\zeta(0)^{(A)} = \zeta(0)^{(B)}, \quad \left. \frac{1}{m_A^*} \frac{d\zeta^{(A)}}{dz} \right| = \left. \frac{1}{m_B^*} \frac{d\zeta^{(B)}}{dz} \right| \quad (7.47)$$

を課す. (7.45) から (7.47) までを整合させて解く形式が Poisson-Schrödinger 形式である. これは Hartree 近似であり, では電子相関 Fock の効果はどうか, ということであるが,  $\zeta(z)$  や  $E_z$  を議論する限りではそれ程大きな影響を与えないことがわかっている.

Poisson-Schrödinger 方程式を数値的に解くことは, GaAs の伝導帯のようにバンド構造が比較的単純でスピン軌道相互作用も小さいものについては比較的簡単であるが, 谷数が増え, スピン軌道相互作用が重要になる場合は次第に計算規模が大きくなる.  $\zeta(z)$  を使って更に計算をしたい場合, 簡単な形を持つ近似解が便利である. Fang-Howard 近似は

$$\zeta(z) = \sqrt{\frac{b^2}{2}} z \exp\left(-\frac{bz}{2}\right) \quad (7.48)$$

を試行関数,  $b$  を変分パラメーターとして変分法を行うもので, 結果は

$$b^3 = \frac{48\pi m \epsilon^2}{\epsilon\epsilon_0 \hbar^2} \left( \frac{11}{32} n_{2d} + N_d \right) \quad (7.49)$$

となる. これは沁み出しを無視しており, 沁み出しを考慮した近似式は [3] などに与えられている.

## 7.4 量子細線の形成

実験でどのように量子細線を形成するか, 方法の例を見ておく.

### 7.4.1 スプリットゲート法, その他物理的形成法

スプリットゲート法は, 2.6.1, 2 節で見たショットキー障壁を形成する表面金属を微細加工してショットキー空乏層で 2 次元電子系を様々な微細形状に変化させる方法である.

スプリットゲートで主に使用されるのは, 図 7.13(a) のように, 負の  $V$  を加えてゲート領域の  $Q$  を増加すなわち  $N_{\text{dep}}$  を減少させ, ゲート下から電子を排除し, さらにその排除領域 (空乏層) をゲート電圧で制御するものである.

図 7.13(b) のように, 間隔  $w$  で半無限の金属を表面に置いたときに生じるポテンシャルを考える. ゲートに電圧を加えて線密度  $\sigma$  の電荷がゲート金属に発生したとし, これは一様と近似する. スプリットゲートによる面垂直方向の電場  $\mathcal{E}_z(d)$  は,

$$\mathcal{E}_z(d) = \frac{-\sigma}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \left[ \pi + \arctan\left(\frac{x - w/2}{d}\right) - \arctan\left(\frac{x + w/2}{d}\right) \right] \quad (7.50)$$

と計算される. (7.50) は  $d$  に依存しているが, 粗い近似として幅  $\eta$  の 2DEG ポテンシャル中での変化は小さいとし, 電子がスプリットゲートにより受けるポテンシャル変調は  $V_{\text{sg}} = e\eta\mathcal{E}_z(d)$  であると考え.  $V_{\text{sg}}(x)$  をプロットすると図 7.13(b) の下の図のようになり, 波線で示したように, ポテンシャル底部では放物線ポテンシャルが良い近似に

なっていることがわかる\*2。すなわち，図 7.13(b) のゲート金属を乗せた場合は， $z$  方向に加えて電子の  $x$  方向運動エネルギーも量子化して，量子細線が実現することになる．状態密度の鋭い立ち上がり位置が 1 次元バンドの底で，図 7.13(b) のポテンシャルの離散化エネルギー準位位置にあたる．

この他の物理的な形成法としては，2 次元系を溶解液を用いたウエットエッチやイオンによる切削を用いたドライエッチによって細く切り出してしまう方法もある．また，MBE 成長した薄膜を真空中で劈開して端面に再成長することで T 字型の細線を形成する方法もある．

## 7.4.2 自己形成ナノワイヤー

半導体基板の上に電子線部分照射その他様々な手法により金属などで「種」を付け，この基板で結晶成長すると，種の所だけ結晶成長が進んでナノワイヤーが成長する場合がある．ヘテロ接合や変調ドーピングを組み合わせてワイヤー中に構造を作り出すこともできる．図 7.14(a) は InAs(111)B 基板の上に金微粒子を触媒として，気相-液相-固相法で MBE 成長した [111] 方向 InAs ナノワイヤーの例である．図 7.14(b) は，GaN を InGaN が包む形で成長させたコア-シェル型のナノワイヤーである．

この他，1 次元系と言えるかどうかは微妙であるが，グラフェンを細く巻いた形状のカーボンナノチューブ (Carbon nanotube) も，自己形成させて広く研究されている対象の 1 つである．

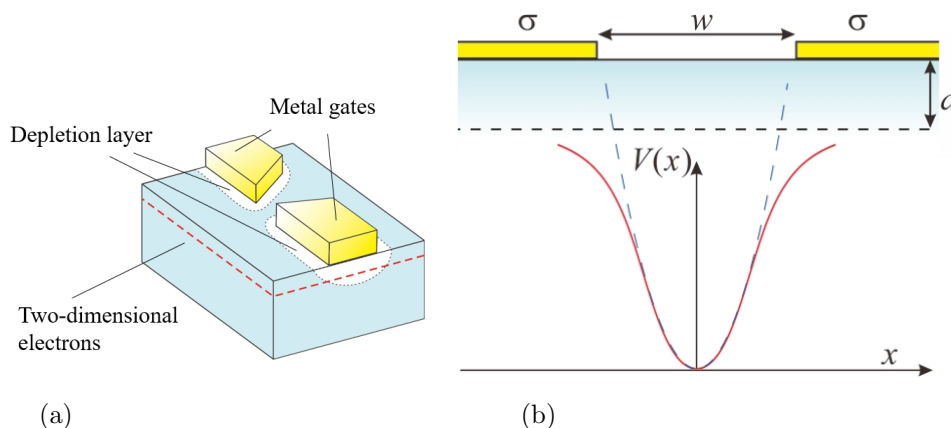
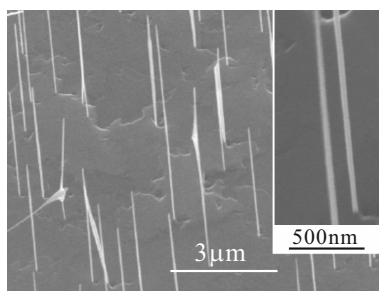
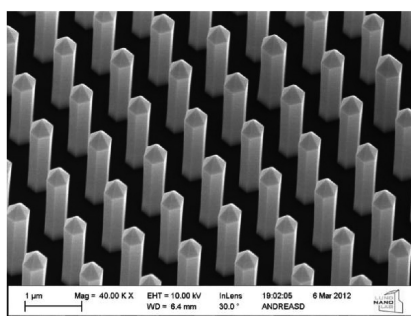


図 7.13 (a) スプリットゲートを用いた微細系の作製法の概念図．(b) 簡単なモデルによるスプリットゲートの作るポテンシャル．



(a)



(b)

図 7.14 (a) InAs(111)B 基板の上に金微粒子を触媒として，気相-液相-固相法で MBE 成長した [111] 方向 InAs ナノワイヤー．(b) GaN-InGaN コア-シェル型ナノワイヤー

\*2 結局，対称なポテンシャルで底部が尖っていない場合は，底部形状のべき展開は 2 次の項が主となるため多くのポテンシャル底部では放物線近似が成立する．

## 7.5 量子ドットの形成

量子ドットの形成法にも、量子細線同様、物理的な方法と天然の形成法、そしてこれらを組み合わせる方法などが存在する。そのごく一部を紹介する。

### 7.5.1 物理的形成法

量子ドットは、光学的に非常に広範囲の応用が期待されており、量子ドットレーザーはすでに市場に出ている。が、ここでは、電気伝導を中心に見ていこう。電気伝導現象が生じるためには電極を接触させなければならない。電極として通常のフェルミ面を持つ正常金属を考えよう。「接触」としては、電子がトンネルで往来するトンネル接合を考える。ドットに電子を出入りさせるために最低1個の電極が必要である。更に、量子細線、あるいはFETなどのように2つの粒子溜めの間を流れる電流などを測定する構造にするには、2つの電極、したがって2つのトンネル接合を要する。図7.15に示したように、これらの電極をFETの命名に倣ってソース、ドレインと呼ぶ。

量子ドットは、状態密度が図??のようにデルタ関数で表され電気伝導は、接合のトンネル確率とこれらの状態密度位置とソースドレインのフェルミ準位位置の相対関係で決まる。量子ドットにトンネル確率が0の金属電極を接近させ、この電極に電位を与えることで、ここから生じる電場によって量子ドットの化学ポテンシャルを上下させることができる。この電極をゲートと呼ぶ。図7.15(a)に伝導測定用量子ドットの抽象化イメージを示した。

量子細線でも使用したスプリットゲート法は、量子ドットの形成にも有効である。図7.15(b)はそのショットキー電極配置をイラストで示したものである。トンネル接合部分にはQPCをピンチオフに近い領域で使用する。ゲートは、やはりショットキー電極を逆バイアスで使用する。この時、図からも予想されるように、逆バイアス電圧を加えることで空乏層が広がってドット全体を押し込むように働くため、量子閉じ込めポテンシャルのサイズも変わり、後述の単電子効果以外に準位間隔が広がる効果もある。このためブランジャー(押し込み)ゲートと呼ばれることもある。この形状では、ソース、ドット、ドレインが2次元電子に沿って横に並ぶことから横型量子ドットと呼ばれる。ゲート電圧によって量子ドットの電子数を減らしていくとドットサイズも小さくなり、ソース、ドレインから空間的に分離され、トンネル確率が小さくなって伝導が実質的になくなってしまい、少数電子系の実験ができないことが問題とされた時期もあったが、遠隔電荷検出法などによりその問題は克服されている。

図7.15(c)は横型に対して2重障壁構造を円柱状に切り出して作ったもので、円柱を一周してショットキーゲート電極を蒸着して作製するもので、縦型量子ドットと呼ばれる。トンネル結合はエピタキシャル成長した2重障壁で決まっており電子数を1個にしても結合が変化せず、少数電子の実験に適している。外部の回路に接続する際に困難が生じるが、克服するための様々な工夫が行われている。

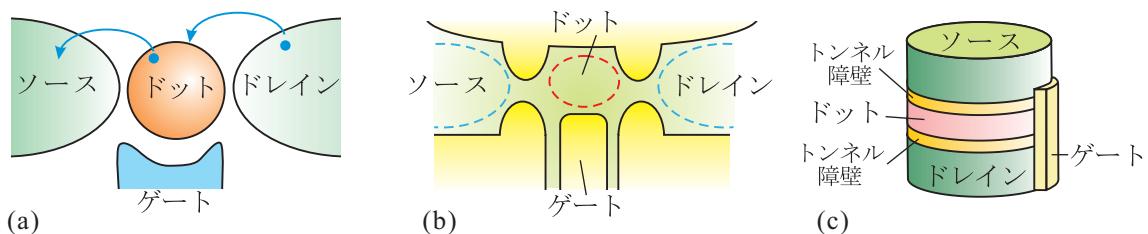


図 7.15 (a) 電気伝導を調べるための代表的な量子ドット構成の模式図。量子ドットを挟んで、伝導を調べるための2つの電極、ソース、ドレインがトンネル障壁を介して接続され、やや離れてドットの電位を制御するゲート電極が配置されている。(b)「横型」量子ドットの模式図。2次元電子系と微細加工ショットキ金属ゲートを使う。(c)「縦型」量子ドットの模式図。2つの障壁層で量子ドットになる層を挟んだ構造を作り、その外側のドーブ層でソース、ドレインを形成する。微細加工によりピラー状に切り出し、周囲に円筒状の金属ゲートを形成する(図は、円筒のごく一部を描いている)。



## 7.5.2 自己形成法

エピタキシャル成長には様々な成長様式があり、層状成長はフランク-ファンデアマーヴ (Frank-van der Merve, FvdM) モード (図 7.16(a)) と呼ばれている。これに対して、薄膜と基板の界面エネルギーが大きい材料系では、成長初期より基板に材料がはじかれて 3 次元成長するフォルマー-ヴェーバー (Volmer-Weber, VM) モード (図 7.16(b)) や、最初は 2 次元的に成長するが、膜内に入る格子歪みのために途中から 3 次元成長するストランスキー-クラスタノフ (Stranski-Krastanow, SK) モード (図 7.16(c)) などが存在し、2 次元より更に低次元の構造が自己形成される。

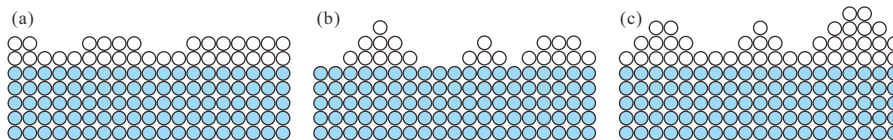


図 7.16 様々な成長様式。灰青色の丸は基板原子，白丸は薄膜原子を表す。(a) Frank-van der Merve (b) Volmer-Weber (c) Stranski-Krastanow

自己形成による低次元系形成の代表例が、SK モードにより量子ドットを得るものである。実験例が図 7.17 で、GaAs 基板の上に 7% 格子定数が大きい InAs を堆積し、高い基板温度にしばらく放置すると表面の In 原子が拡散凝縮運動を起こして量子ドット構造が形成される。InAs の場合、ドットが自己形成されるのは、基板上に比較的少数の In 原子が存在する場合、基板からの強い格子歪から逃げるためには高さ方向に 3 次元成長を行った方がエネルギー的に安定なため、表面に数原子層の薄い濡れ層を作った後、SK モード成長により基板面方位に応じた形状のドットがランダムに形成される。SK モード成長による量子ドットは、形状や配置がランダムである一方、高密度で結晶品質の良い量子ドットが得られることから量子ドットレーザーなど光学素子に広く応用されている。また、InAs は金属との接合性が良いことから、金属電極を付けて伝導測定することも行われている。

自己形成と物理的な手法の組み合わせとして良く採用されるのが、自己形成ナノワイヤーにリソグラフィーでゲートや障壁電極を付けてドットにする手法である。特にヘテロ接合化が (不可能ではないが) 容易ではない InSb や InAs を量子ドット化したり、量子ドット以外に多くのゲートを要する実験にも用いられる。また、ナノワイヤー成長時にヘテロ接合による障壁を組み込み、量子ドットとする手法もある。

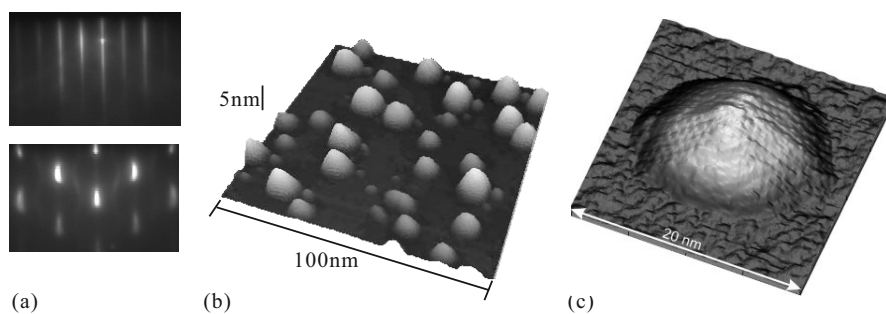


図 7.17 (a) GaAs(001) 基板上の InAs 量子ドットの成長。上: InAs 成長開始時の 2 次元成長 RHEED パターン。下: 量子ドット成長中の 3 次元的 RHEED パターン。(b) でき上がった量子ドット系の原子間力顕微鏡像。(c) 更に STM で 1 個の量子ドットを観察したもの、格子像が見えており、ドット全体が単結晶に近いことがわかる。

### 7.5.3 コロイド量子ドット

近年、光学量子ドットとして広く使用されるようになったのがコロイド製法を用いたものである。これは、図 7.18 のように、溶媒中に「前駆体」と呼ばれる量子ドット材料を注入して溶解し、温度変化により過飽和状態にしてその一部を析出させることで量子ドットを得る方法である。表面積と体積の関係から、過飽和度が一定値よりも下がると、成長が続くドットと再溶解するドットに分かれることから、大きさが比較的そろったドットを得ることができる。これをオストワルド熟成法と呼ぶ。

飽和領域に達したところで、別種類の前駆体を投入することで、量子ドット表面に別の物質を堆積することができる。この方法で作られた量子ドットをコア-シェル型量子ドットと呼ぶ。量子ドットはサイズで発光波長を変えることができるため、効率の良い多色発光体を形成することができ、量子ドットディスプレイなどに実用化がされている。

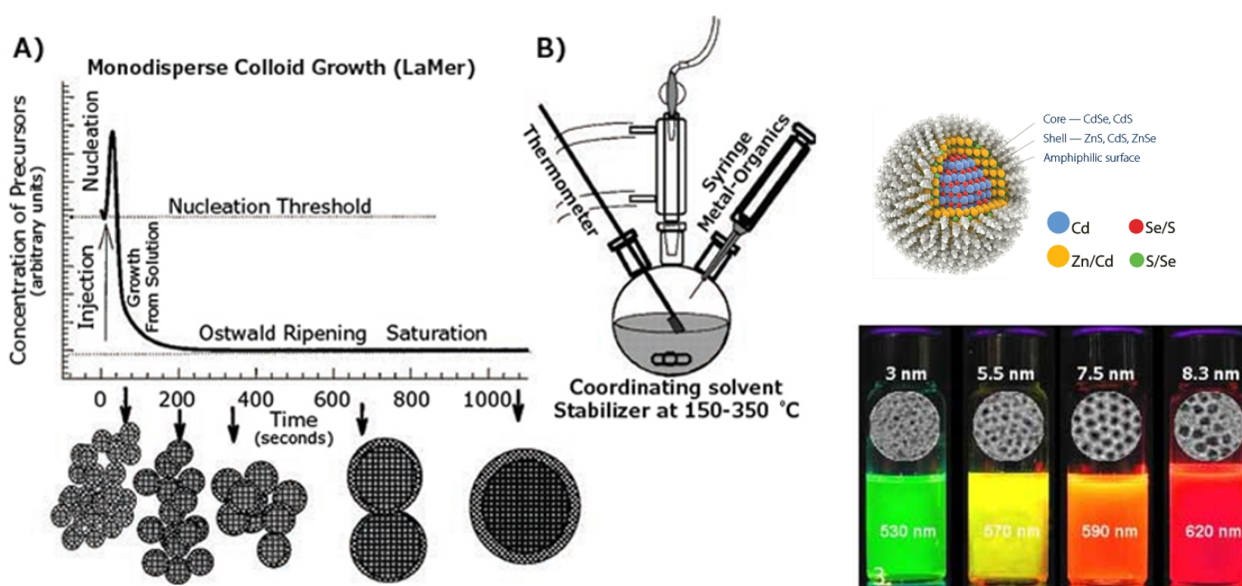


図 7.18 左 (A) 過飽和溶液から析出法によって量子ドットを形成する手法の説明図。グラフは、ドットの前駆体の濃度の時間変化である。左 (B) 析出法セットアップの概念図。右上：コア-シェル型量子ドットの模式図。[4] 右下：CdS ベースのコアシェル量子ドットの発光と TEM 像。(Ocean Nanotech. web site. <https://www.oceannanotech.com/>)

### 参考文献

- [1] T. Ishibashi, S. Tarucha and H. Okamoto, Proc. GaAs and Related Compounds, p. 587 (Oiso, 1981).
- [2] L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [3] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 3893 (1982).
- [4] C. B. Murray, C. R. Kagan, and M. G. Bawendi, Annu. Rev. Mater. Sci. **30**, 545 (2000).

量子閉じ込めを使っているわけではないが、ヘテロ接合を使用した光学デバイスを一部紹介しておこう。

## 7.6 注入少数キャリアの閉じ込めと光デバイス

光や pn 接合によって注入された少数キャリアは、拡散流、およびドリフト流によって固体中を移動する。前者を制御するためには、少数キャリア注入の幾何学形状や注入量を変化させる。バイポーラトランジスタが典型例である。後者は、ヘテロ、ショットキー、MOS 接合、空間変調ドーピング、などによるポテンシャル、バイアス電圧やゲート電圧によるその変化、などにより制御される。後者のわかりやすい一例が、太陽電池の窓層 (window layer) と呼ばれるものである。これは、図 7.19(a) のように、太陽電池の pn 接合トップ層の上にバンドギャップの大きな半導体を接合したものである。

太陽電池の効率低下要因の一つが、表面の高密度局在準位 (Schottky 接合で Fermi 準位のピン止めなどを生じていたもの) を介しての少数キャリア非輻射再結合である。外部への電流として取り出されるのは、pn 接合の内部電圧で掃き出された少数キャリアである。表面側で光吸収により生じた少数キャリアは、ランダムな初期運動量を持ち、表面方向にも拡散する。これらの多くは、表面準位を介して非輻射再結合を起こし、エネルギーが熱として失われる。表面に反射防止のための凹凸構造があると、表面積の増大もあって更に表面再結合率は高くなる。

この時、表面側に図 7.19(a) のように大きなバンドギャップ  $E_{g2}$  を持つ層があれば、ヘテロ接合障壁により少数キャリアの表面への拡散を押し返すことができる。ヘテロ接合は、図の AlGaAs-GaAs のような接合性の良いものを選べば接合面でのギャップ内準位の発生は押し返され、界面で反射した少数キャリアは pn 接合へ拡散して光電流に

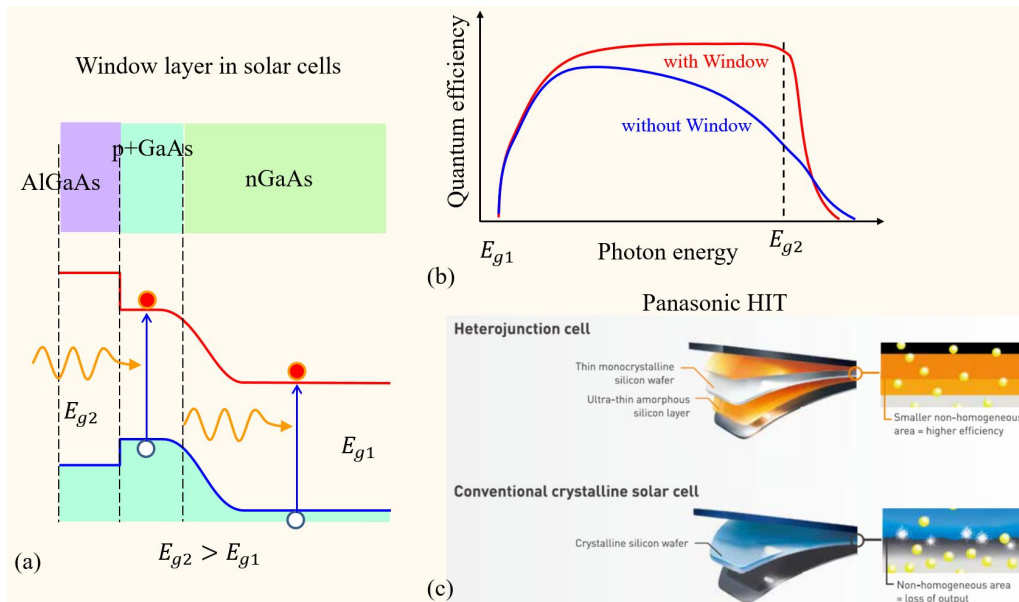


図 7.19 (a) 上：窓層付き太陽電池の模式図。AlGaAs/GaAs pn 接合を例に取った。下：同バンド模式図。(b) 量子効率スペクトルの概念図。青線が窓層なし、赤線が有りの場合。(c) HIT 太陽電池のパフレットより、ヘテロ接合による効率向上を示している。

寄与する。図 7.19(b) が、エネルギーギャップ  $E_{g1}$  の半導体 pn 接合上にギャップ  $E_{g2}$  の窓層を積層した場合の量子効率 (quantum efficiency) スペクトル  $\eta(h\nu)$  の模式図である ( $h\nu$  は光子のエネルギー)。量子効率は、入射した光子数に対して光電流として流れる電子数の比で定義される。窓層がない場合 (青線) は、 $h\nu$  が大きくなり、吸収係数の増大により表面近くでの少数キャリア生成が増えると、表面再結合増加によって  $\eta(h\nu)$  は減少するが、窓層を持つ場合 (赤線) は、これがほぼなくなるため、1 に近い  $\eta$  が  $h\nu \sim E_{g2}$  近くまで得られる。 $h\nu$  が  $E_{g2}$  を超えると、窓層での吸収が始まり、表面再結合が増えて  $\eta$  は減少する。 $E_{g2}$  として、太陽光スペクトルが減少して光子密度が低下する付近を選ぶことができれば、変換効率の向上が期待できる。これは、拡散流をヘテロ障壁によって生じる一種のドリフト流で抑える例と見ることができる。

巧みな方法でこれを市場で販売する太陽電池に応用した例が、図 7.19(c) に示した、SANYO で開発され、Panasonic ブランドで製造販売されている HIT (heterojunction with intrinsic thin-layer) 太陽電池である。基本的には Si 結晶太陽電池であるが、Si はアモルファス化すると有効バンドギャップが広がることを利用し、活性層をアモルファス層で挟んで少数キャリアを閉じ込める構造としたものである。変換効率の点では現在でもトップクラスであるが残念なことに諸事情により製造中止がアナウンスされている。

### 7.6.1 発光ダイオード

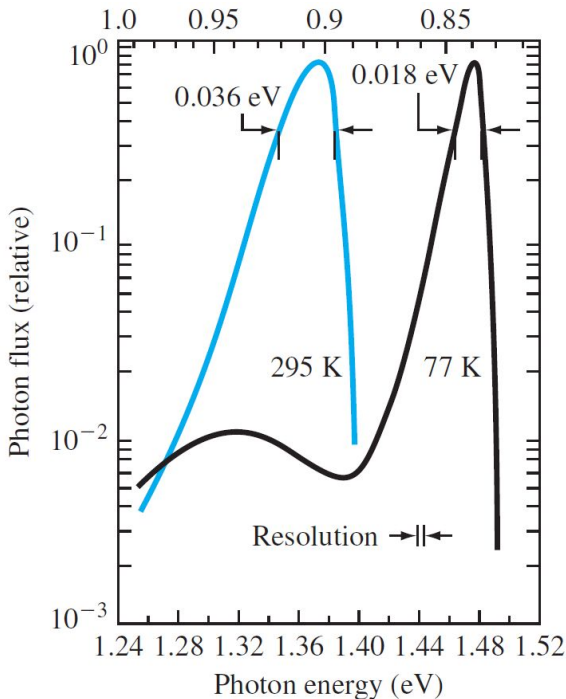


図 7.20 GaAs pn 接合の EL スペクトル。[1] より。

思われる。

LED の特性で重要なのは、発光波長、そして発光効率である。ホモ pn 接合を発光層とする場合は、発光波長は式 (7.51) のように、ほぼバンドギャップで決定される。発光の量子効率  $\eta_q$  は、注入キャリア再結合過程  $R$  に対する発光再結合過程  $R_r$  の割合

$$\eta_q \equiv \frac{R_r}{R} = \frac{\tau_{nr}}{\tau_{nr} + \tau_r} = \frac{\tau_{tot}}{\tau_r}, \quad \frac{1}{\tau_{tot}} \equiv \frac{1}{\tau_{nr}} + \frac{1}{\tau_r}, \quad (7.52)$$

で定義される。 $\tau_{nr}$ ,  $\tau_r$  はそれぞれ非輻射再結合、輻射再結合による少数キャリア寿命で、 $\tau_{tot}$  はマティーセンの規則で得られる総合的な少数キャリア寿命である。バンド間遷移による輻射再結合確率は、電子正孔濃度積に比例する。すなわち、

$$R_r \propto np. \quad (7.53)$$

ドリフト流閉じ込めの極めて重要な例として、発光デバイスを考える。少数キャリア注入法としては、pn 接合によるものとする。すなわち、電気を光に変換するエレクトロルミネッセンスを考えることになる。pn 接合を使って注入した少数キャリアの再結合で生じる光子を出力とする素子が、発光ダイオード (light emitting diode, LED) である。

注入した少数キャリアが発光再結合によって光子を出力する過程には様々存在するが、ここでは直接伝導帯端の電子と価電子帯端の正孔が直接再結合するもの考える。その発光強度は

$$I(\nu) \propto \nu^2 (h\nu - E_g)^{1/2} \exp \left[ \frac{-(h\nu - E_g)}{k_B T} \right] \quad (7.51)$$

のように書くことができる。図 7.20 に GaAs pn 接合からの発光スペクトルの例を示す。温度低下と共に、格子定数変化を主因とするバンドギャップ変化が生じ、発光は高エネルギー側にシフトし、半値幅が狭まっている。77 K のスペクトルに見える低エネルギー側の 2 番目のピークについては、論文 [1] では、「そのようなものが見える」としか記述がないが、比較的浅めの不純物準位の発光ではないかと

当然ながら，少数キャリア注入条件下では半導体方程式は成り立たず， $np \neq n_i^2$  である。

少数キャリア電流密度は，(6.11) で見たように，電子電流密度と正孔電流密度の和，

$$j_e + j_h = e \left[ \frac{D_e n_{p0}}{L_e} + \frac{D_h p_{n0}}{L_h} \right] \left[ \exp \left( \frac{eV}{k_B T} \right) - 1 \right], \quad (7.54)$$

及び，空乏層 (厚さ  $w_d$ ) 内再結合電流密度

$$j_R = \frac{e n_i w_d}{2 \tau_0} \left[ \exp \left( \frac{eV}{2 k_B T} \right) - 1 \right] \quad (7.55)$$

の和で表される。  $eV$  の項にファクター  $1/2$  がついているのは，空乏層内再結合は主にギャップ中央部の深い局在準位を介して起こるためである。

pn 接合の n 側を高濃度ドープした  $n^+p$  接合では，発光は主に p 層内での電子-正孔再結合によるものである。従って，接合の注入効率は

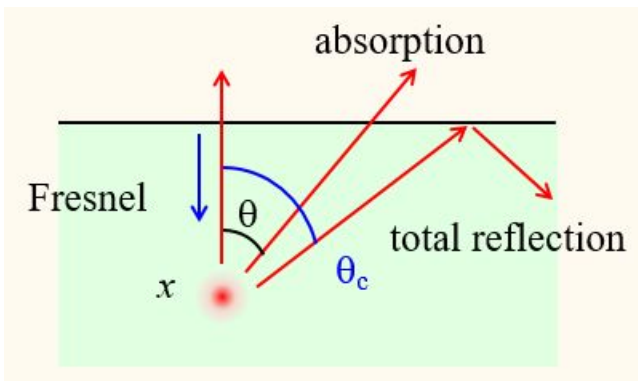
$$\gamma = \frac{j_e}{j_e + j_h + j_R} \quad (7.56)$$

である。内部量子効率 (internal quantum efficiency) は (7.52)，(7.56) より，

$$\eta_{iq} = \gamma \eta_q \quad (7.57)$$

と定義される。内部量子効率の決定要因としては，太陽電池などと同様，深い不純物準位など結晶質に関するもの，表面再結合など構造に起因する様々なものがある。

LED デバイスにとって，最終的に重要なのが外部量子効率 (external quantum efficiency) である。式 (7.51) からわかるように，バンド間直接発光光子のエネルギーは，状態密度を反映してエネルギーギャップよりも若干高いところにピークを持つため，結晶自身が発光光子を再吸収してしまい，最終的に外部に出て来ない再吸収損失となる。



左図のように，表面からの距離を  $x$ ，発光向きの表面垂直方向からの角度を  $\theta$  とすると，吸収係数を  $\alpha$  として，

$$\zeta_{\text{abs}} = 1 - \exp(-\alpha x / \cos \theta) \quad (7.58)$$

の吸収損失が生じる。また，屈折率  $\bar{n}_1$  と  $\bar{n}_2$  の物質の界面を光が通過する際には，

$$\Gamma = \left( \frac{\bar{n}_2 - \bar{n}_1}{\bar{n}_1 + \bar{n}_2} \right)^2 \quad (7.59)$$

の反射率で反射が生じる。表面でのこの反射による損失を，フレネル (Fresnel) 損失と呼ぶ。また，半導体内部の方が外部より屈折率が大きいため， $\theta$  が全反射の臨界角  $\theta_c$  を超えると，表面で全反射され，これも光学損失となる。最終的に外部に放射される光子数の，結晶内部で発生した光子数に対する割合を，光学効率 (optical efficiency)，素子を通過した全キャリアに対する割合を，外部量子効率と呼ぶ。光学効率を  $\eta_{\text{opp}}$ ，外部量子効率を  $\eta_{\text{exq}}$  と書くと，定義より，

$$\eta_{\text{exq}} = \eta_{\text{opp}} \eta_{iq} \quad (7.60)$$

である。単純な pn 接合の外部量子効率は一般に大変低く，数 % にも満たないことが多い。

特に，光学損失の内，フレネル損失，全反射損失については，太陽電池の場合と同様，表面に微細構造で修飾をして，多重反射を生じさせることで低下させることが行われている。これも太陽電池の窓層と同様，内部量子効率を高め，光学損失の内でも特に吸収損失を強く抑える構造として，ダブルヘテロ接合 (double-heterojunction, DH) LED が，多くの場合，使用されている。これは，図 7.21 に概念的に示したように，活性層物質に比べてエネルギーギャップの大きな物質でクラッド層を構成するものである。図では更に，pn 接合のドーピング部分もクラッド層で持たせており，活性層のドーピングをしないことで，ドーパントが非発光再結合中心となることを避けている。狭領域に注

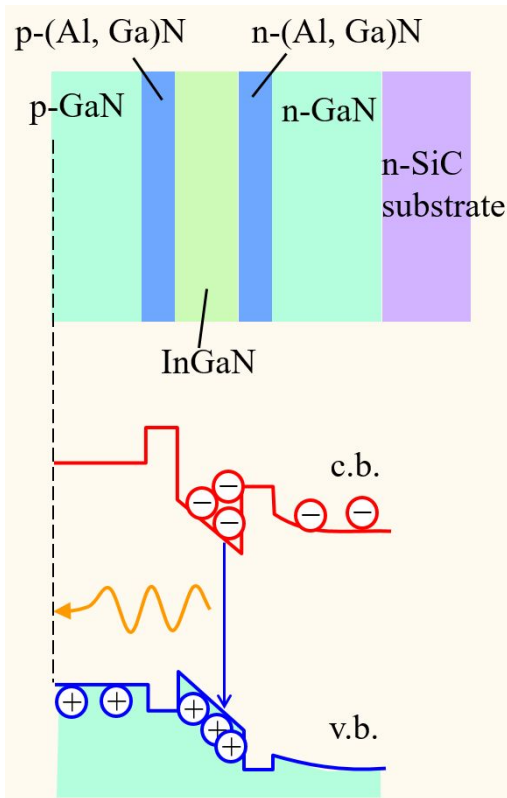


図 7.21 ダブルヘテロ接合 LED の概念図. InGaN を活性層とするものを例に取っている.

入キャリアを集中することで  $np$  積を大きくして内部発光効率を高めることができる. 更に発光光子エネルギーはクラッド層のバンドギャップよりも小さいため, 薄い活性層から出ると吸収が起こらない. 背面側に鏡面になるような構造を入れて背面側に射出された光子も前方へ反射するように設計されている.

文献 [2] では, InGaN をベースにした YAG 励起型の LED で外部量子効率 77% を達成した, としている. 通常は, 30% 程度でも高効率な方であり, 非常に高効率とすることができる.

## 7.6.2 レーザーダイオード

LED の発光は, 図 4.1 (b) の自然放出によるものであった. ここで, (c) の誘導放出を考える. 遷移確率中の  $|A_0|^2$  は, 電磁場のエネルギー密度に比例する, このエネルギー密度を, 系の体積を  $V$ , モード  $\lambda$  の光子数を  $n_\lambda$  として,  $n_\lambda \hbar \omega_\lambda / V$  とする. このようなコヒーレントな電磁場は, 物質中に電気双極子モーメント  $\boldsymbol{\mu}$  を誘起し,  $|a\rangle$  と  $|b\rangle$  の非対角要素を生じる.  $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0 \cos(\omega_0 t)$  とすると,  $\boldsymbol{p} = m\omega_\lambda \boldsymbol{r}$  となる.  $\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{p}$  を,  $(\omega_\lambda m/e)\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{\mu}$  とし,  $\omega = \omega_0 = \omega_\lambda$  とすると,  $|b\rangle \rightarrow |a\rangle$  の誘導放出確率振幅は

$$P_{ba}(t) = \frac{\omega_\lambda}{\epsilon_0 \hbar V} |\langle a | \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{\mu} | b \rangle|^2 n_\lambda \frac{t^2}{2} \quad (7.61)$$

で,  $n_\lambda$  に比例する. また, 対称形であるから光吸収過程  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$  の確率振幅  $P_{ab} = P_{ba}$  である. (7.61) は, あるモードにいる光子の数が多ほど, このモードへの誘導放出確率が高いことを示しており, ボース・アインシュタイン凝縮などと同じボース誘導 (Bosonic stimulation) 現象の一種と捉えることもでき, 誘導放出に際して, 放出を誘導 (刺激) する光子と放出される光子とがコヒーレントであることを示している [3]. このことは,  $\boldsymbol{\mu}$  が電磁場によって誘起されていることから, 古典的にも了解される.

今, 光が伝播する媒質を, このような二準位系の集合でモデル化する. 二準位系のの内状態  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$  にあるものの密度をそれぞれ  $N_a$ ,  $N_b$  とする. 上記  $\omega_\lambda$  の光が伝播する時, 夫々の二準位系との平均相互作用時間を  $\tau$  とすると, 単位体積あたりの光子吸収エネルギーは

$$\mathcal{E} = (N_a - N_b) P_{ba}(\tau) \hbar \omega_\lambda \quad (7.62)$$

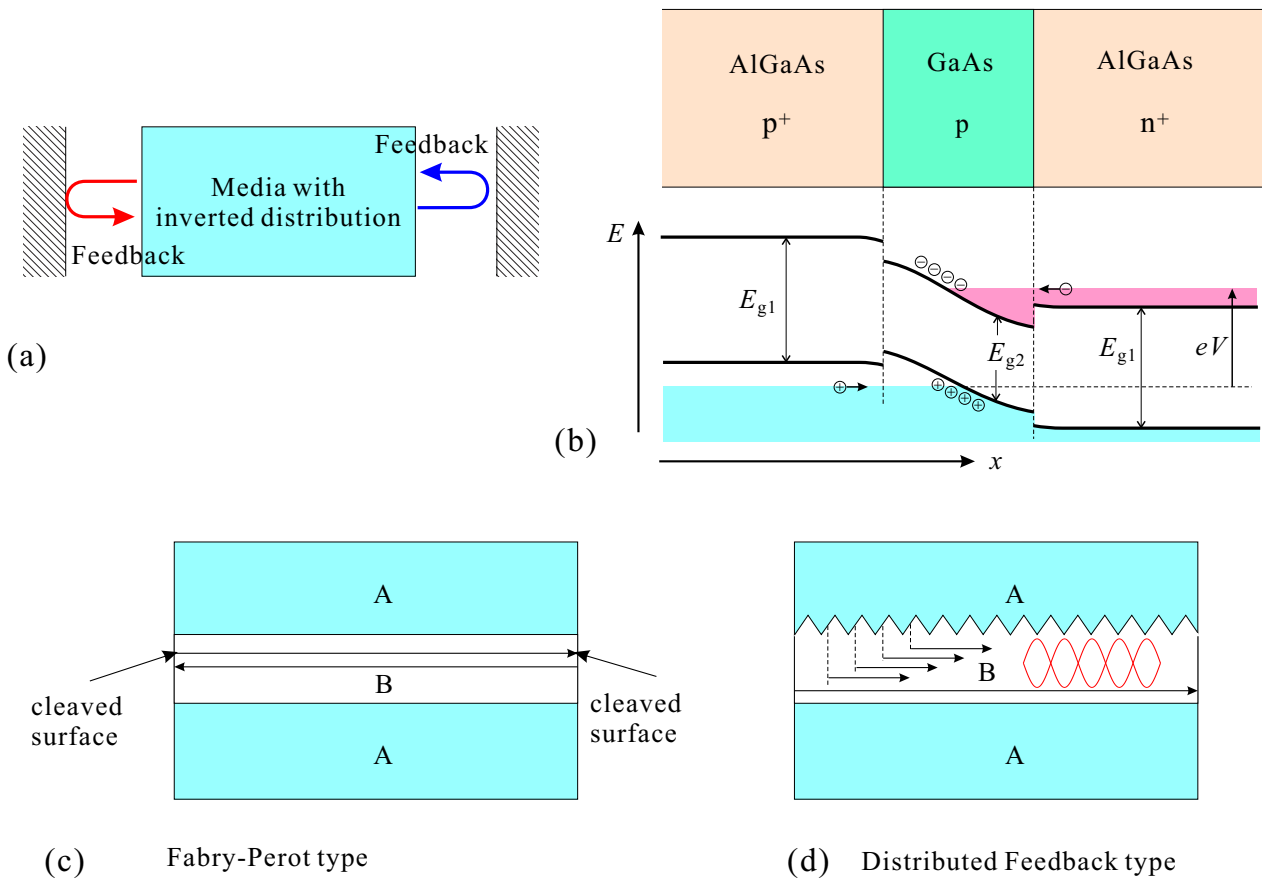


図 7.22 (a) 平行鏡による光の閉じ込め。鏡による帰還作用と見ることができる。(b) 二重ヘテロ構造レーザーダイオードの構造模式図。半導体の代表例として AlGaAs, GaAs を挙げている。順方向バイアスにより, GaAs 部分に反転分布が生じる。(c) バンドギャップの大きな A 物質で B 物質を挟み, 光の共振器に試料端のへき開面での反射を用いたファブリ-ペロー型レーザー構造。(d) A 物質-B 物質界面に波型回折格子を設けた分布帰還 (DFB) 型レーザー構造。

となる。もし、 $N_b > N_a$  という状態が実現すれば  $\mathcal{E} < 0$ , すなわち、光が伝播するにつれて媒質からエネルギーを吸収して振幅が増大する。これは、位相のそろったコヒーレント状態の光であり、このような光子の増幅現象（同一状態の光子数を増加させること）を生じさせること、およびその仕掛け（装置）を一般に **レーザー** (light amplification by stimulated emission of radiation, LASER) と呼ぶ。

レーザーダイオード (laser diode, LD) は、LED と同様に pn 接合を用いた発光素子であるが、2 重ヘテロ接合（あるいはそれより更に強い閉じ込め構造）を用いて反転分布を作り出し、レーザーとするものである。光を強く増幅するためには、反転分布媒質の中を光を進ませる必要があるが、光も鏡面を使って共振器中に閉じ込め、同じ媒質中を往復させることで強く増幅する (図 7.22(a))。図 7.22(b) が初期頃の LD の構造を示したものである。図 7.22(c) は共振器として最も単純なファブリ-ペロー (Fabry-Perot) 型を用いた例。図 7.22(d) は、ヘテロ境界面を三角形の連なり状態に加工し、面内での反射を使用して共振器としたもの。分布帰還型 (distributed feedback, DFB) レーザーと呼ぶ。



## 第8章 量子輸送の基礎

1次元系は、量子輸送を考えるのに最適な次元であるので、ここから量子輸送現象を導入して行こう。

### 8.1 古典輸送と量子輸送

「古典輸送」の項では、場合の数の勘定以外は電子を粒子として扱ったが、一方、ヘテロ接合とこれを使った量子閉じ込めでは全くの波動として扱った。このように異なる扱いを同じ半導体中で行った理由は、問題になる距離とエネルギーのスケールにある。これまで古典的に扱ってきた  $pn$  接合と量子論的に扱った2重障壁ダイオードは、かなり際どいケースである。 $pn$  接合で、空乏層はドーピング濃度を上昇させると薄くなる。 $p$ 層  $n$ 層ともに高濃度にドーピングすると空乏層は全体としても大変薄くなり、フェルミ準位は  $p$ 層では価電子帯に、 $n$ 層では伝導帯に入り込むため、空乏層を挟んでフェルミ準位の上下に状態密度が存在するようになる。この時、空乏層を通して量子波動の表れであるトンネル現象が生じるのが江崎ダイオードである。一方、2重障壁ダイオードは、障壁と井戸に使用する物質により、室温では共鳴ピークが見られないことがある。どのような場合に量子的な扱いが必要になるのか、古典輸送の項の冒頭でもその点に触れたが、ここで少しまとめて議論しておこう。

どのような場合に量子コヒーレンスが輸送現象に現れるのか？実空間内でこれを表すための「長さ」が量子コヒーレンス長 (quantum coherence length) である\*1。一口に言って、固体中を電子が伝播する際、量子力学的波動としての位相記憶を保って伝播する距離を量子コヒーレンス長と呼び  $l_\phi$  と書くことが多い。

実験の上でコヒーレンスの消失を問題にする場合、電子の量子力学的干渉性そのものを失わせる本質的なものと、個別の電子は干渉を起こしているものの、多数の電子の統計を取ると干渉に統計揺らぎが入って実験結果からは干渉が消えてしまう、という場合がある。前者は一口に言って他自由度との量子絡み合い (あるいは量子もつれ, quantum entanglement) によるものである。

右図の2重スリットの実験で考えてみよう。スクリーン上に生じる干渉パターンは

$$|\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos \theta$$

で右辺第3項が量子干渉項である。今、スタート地点からスクリーンまでの間に沢山の散乱が生じ、ある量子力学的自由度  $\chi$  との間に相互作用をしたとする。その結果、

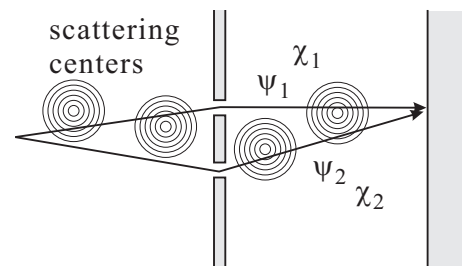
$$\psi_1 \rightarrow \psi_1 \otimes \chi_1, \quad \psi_2 \rightarrow \psi_2 \otimes \chi_2$$

となったとすると、干渉項は

$$2|\psi_1||\psi_2| \cos \theta \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle$$

である。この時もし  $\chi_1 \perp \chi_2$  であれば、内積の項は消え、従って干渉項が消滅する。この時、自由度  $\psi$  と  $\chi$  は最大エンタングルド状態 (maximally entangled state) にある (付録 F)。

言い換えると、この場合の量子コヒーレンス長は、電子自由度が他自由度 (環境 (environment) という言い方をすることもある) との間に最大エンタングルド状態を作るまでに伝播する距離である。ここで、ちょっと疑問を持たれる可能性があるのが、 $\chi_1$  と  $\chi_2$  が直交したのがたまたまで、更に時間発展すると直交が外れて干渉項が復活してし



\*1 「コヒーレンス長」という言葉は、様々な局面で違った意味に使用される。凝縮系物理の例では超伝導現象を扱う場合に、それも複数のコヒーレンス長が現れる。



まうのではないか、という点である。もちろん、量子系の設定次第ではそのような場合があり得る\*2。今は、特に制御されていない量子系のため、時間発展とともにエンタングルメントは他の自由度におよび、「もつれ」が元に戻ることはない、と考える。

このような一粒子の干渉性そのものが失われる場合に対し、一粒子の干渉性は残っているものの、粒子と粒子で波長が若干異なる、すなわち電子波の単色性 (monochromaticity) に対して伝播距離が伸びるにつれて位相差がずれて結局多数の電子を相手とする実験結果からは干渉性が失われてしまうという場合がある。その長さを見積もってみよう。電子はフェルミ粒子であり、絶対零度では、伝播可能な電子のエネルギーは  $E_F$  で完全に単色のはずである。伝導する電子のエネルギーの幅はすなわち  $\Delta E = k_B T$  である。時間  $\tau$  だけ伝播して生じる位相のずれは、 $2\pi \Delta f \tau = 2\pi \Delta E \tau / h = 2\pi k_B T \tau / h$  である。これが  $2\pi$  になる時間が臨界伝播時間として  $\tau_c$  とすると、

$$\tau_c = \frac{h}{k_B T}$$

である。拡散的伝播では拡散長  $l = \sqrt{D\tau}$  より、これによって決まる一種のコヒーレンス長  $l_{th}$  は

$$l_{th} = \sqrt{\frac{hD}{k_B T}} \quad (8.1)$$

である。これは熱的拡散長 (thermal diffusion length) と呼ばれる。散乱がほとんどない、弾道的な伝導の場合は、ほとんどフェルミ速度  $v_F$  で試料を抜けていくと考えてよいので、

$$l_{th} = \frac{h v_F}{k_B T} \quad (8.2)$$

となる。以上の熱長 (thermal length) は、デコヒーレンスと直接の関わりがないにも関わらず、実験上、見かけのコヒーレンス制限長になるので注意が必要である。

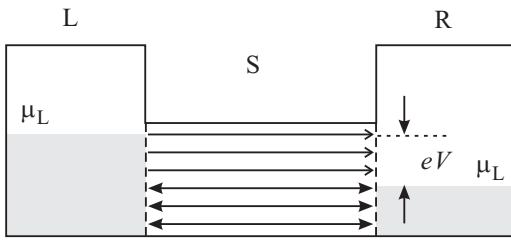
$l_\phi$  はわかったとして、では  $l_\phi$  が何とどのような関係にある場合に量子コヒーレンスが問題になるのか？まず、当然ながら、試料サイズが  $l_\phi$  よりも短くなった場合である。更に電子のドブロイ波長 (今の場合フェルミ波長) と試料サイズが同程度になった場合、量子閉じ込め効果が生じるが、そこまで行かなくても  $l_\phi$  より小さくなることで量子コヒーレンスは何らかの形で伝導に関与する。また、電気伝導には試料サイズ以外にも特徴的な長さ (characteristic length) が生じることがしばしばある。代表例が、外部磁場がかかった時の磁気長 (magnetic length) である。磁束密度を  $B$  として、 $l_B = \sqrt{h/eB}$  と書かれ、最小サイクロトロン半径とも呼ばれる。 $l_B$  が  $l_\phi$  より短くなると特に電気伝導の磁場応答に量子コヒーレンスの影響が様々に現れる。

以下、コヒーレント輸送現象を中心に講義を進める。本講義では、量子系の輸送現象を「量子回路」の伝導現象として見る見方を紹介していこう。本節ではその最も基礎的な部分について見て行こう。

## 8.2 Landauer の公式

20 世紀初頭から半ばにかけて、ベル研などを中心に展開された線形応答理論の到達点が量子輸送の久保公式 (Kubo formula) であり、物性物理学の必須の道具である。一方、現実の量子輸送を解析する際には、久保公式の一形式として導くこともできる [4]Landauer の公式が良く使用される。久保公式の導入は統計物理学などの他の講義に譲り、Landauer の公式の最も簡単な導出から量子輸送に入っていこう。

\*2 実際、このような「コヒーレンスの復活」実験をすることができる。これを持って環境を考えるデコヒーレンス論が誤りだ、とする人もいるが、無論、誤解である。環境論では元来「本質的なデコヒーレンス」は (熱力学極限以外では) 存在しない。現実の系において熱力学極限でなくても統計力学の結論が十分適用できるのと同様、多自由度とのエンタングルメントが進めば、文字通りその「もつれ」が元にならざるにほめて戻るとは事実上なく、干渉性は失われたと考えてよい。



## 8.2.1 量子化伝導度

「伝導」が概念的に生じるための最低の次元が1次元である。まずは、フェルミ粒子系を1次元にした時にその電気伝導度がどうなるか考える。左図のようなモデルで考える。散乱のない1次元伝導体が2つの粒子溜め (particle reservoir) につながれている。粒子溜めは粒子の出し入れに対して全体の粒子数が非常に大きく、熱平衡にあって化学ポテンシャルが良く定義できる。図で、左右の化学ポテンシャルをそれぞれ  $\mu_L$ ,  $\mu_R$ , とする。伝導体の中

中で波数  $k$  で指定される状態が運ぶ電流を  $j(k)$  とすると、波動関数の規格化の長さを  $L$  として、電荷密度は  $e/L$  であるから、

$$j(k) = \frac{e}{L} v_g = \frac{e}{\hbar L} \frac{dE(k)}{dk} \quad (8.3)$$

である。全電流  $J$  は

$$J = \int_{k_L}^{k_R} j(k) \frac{L}{2\pi} dk = \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE = \frac{e}{h} (\mu_L - \mu_R) = \frac{e^2}{h} V \quad (8.4)$$

であるから、

$$G = \frac{J}{V} = \frac{e^2}{h} \equiv G_q \equiv R_q^{-1}. \quad (8.5)$$

これは、散乱のない1次元フェルミ粒子系の伝導度の伝導度であり、量子化伝導度 (quantum conductance) あるいは、伝導度量子と呼ばれる。以上はスピン自由度を考慮しない場合であり、スピン自由度を単に量子自由度の縮重と考えると良い場合はこれを2倍して  $2e^2/h$  を量子化伝導度と呼ぶ場合も多い。  $R_q$  は量子化抵抗である。

以上は、不確定性原理を言い換えたものである。少しわかりやすい形に直すと、1次元フェルミ系に  $\Delta k$  の幅の波数を使って  $\Delta x$  の幅の波束を作ったとすると、1次元フェルミ系に詰め込める波束に乗せられる電荷の密度は  $e/\Delta x$  で、その波束の速度は  $\Delta E/\hbar\Delta k$  であるから、

$$J = \frac{e}{\Delta x} \frac{\Delta E}{\hbar\Delta k} = \frac{e^2}{h} V \quad (8.6)$$

と、同じ結果が得られる。ただし、  $\Delta x\Delta k = 2\pi$ ,  $\Delta E = eV$  とした。

## 8.2.2 量子ポイントコンタクトと伝導チャンネル

上に述べたような「1次元的なフェルミ系」は量子細線 (quantum wire, QW) あるいは量子ポイントコンタクト (quantum point contact, QPC) で実現される。これらを実際に作る方法の1つが、2次元電子系 (two-dimensional electron gas, 2DEG) を更に細長い領域に閉じ込めるやり方である。

QPCの場合、「細長い」領域とは、図8.1(a)のように、広い領域から何らかの方法で2DEGの伝導領域を制限し、次第に細長い領域に閉じ込めたものを指す。これが、??節のスプリットゲートにより実現されることは、すぐにお気づきの事と思う。

これを図8.1(b)のようにモデル化し、長手方向を  $x$  軸に取って2次元領域から入射する電子は全エネルギー  $E = E_{k_x} + E_{k_y}$  を変化させずにこの領域を通過する、ただし、  $x$ ,  $y$  各方向の運動エネルギー  $E_{k_x}$ ,  $E_{k_y}$  は閉じ込めの壁からの反射によってエネルギーロスなく相互に移り変わるとする (断熱近似)。

本来は、図??(b)のような調和ポテンシャルが良い近似であるが、簡単のため閉じ込めは矩形的でポテンシャルの高さは無限大とすると、  $y$  方向の波動関数は、閉じ込め幅を  $W$  として、  $\varphi_n(y) = \cos(n\pi y/2W)$  ( $n$  は奇数),  $\sin(n\pi y/2W)$  ( $n$  は偶数) である。幅の変化は十分緩やかで  $x$  と  $y$  で変数分離でき  $\psi(x, y) = \varphi_n(y)\phi(x)$  と書けると

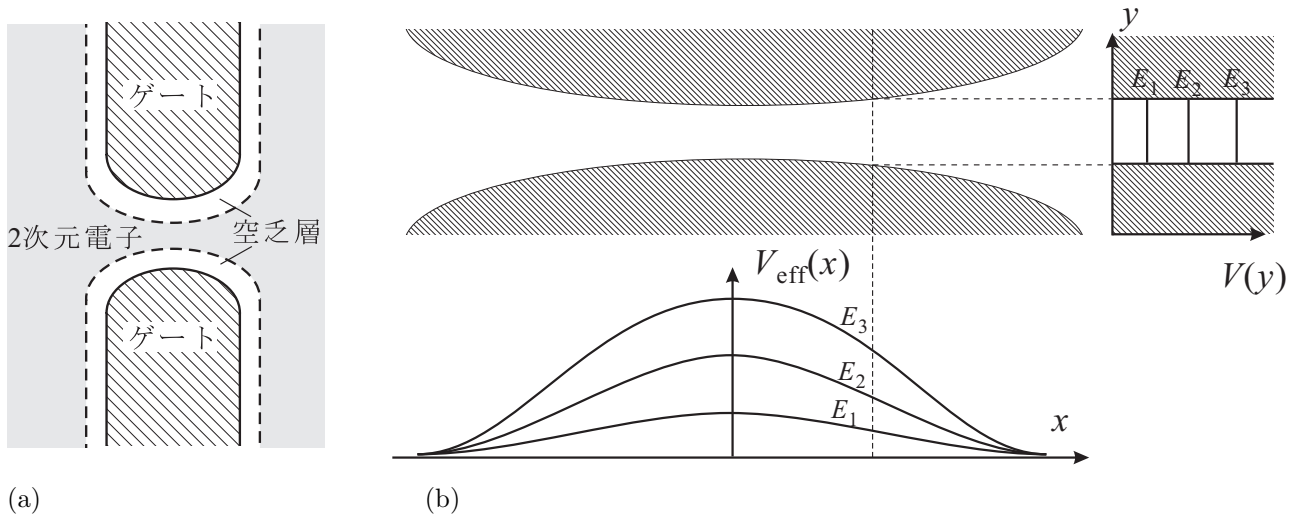


図 8.1 (a) 量子ポイントコンタクト (Quantum Point Contact, QPC, 後述) の模式図. (b) QPC の簡単なモデル. 上: 実空間で斜線部分からは電子が排除され, 空白部分に 1 次元的に閉じ込められているとする. 右の図は, 点線で示した断面での閉じ込めポテンシャル. 離散化固有エネルギー  $E_{1,2,3}$  は, 下図の 3 つの有効ポテンシャルに対応. 下: 式 (8.8) の有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}(x)$  を模式的に書いたもの.

する.

$$\begin{aligned}
 H\psi(x, y) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi_n(y)\phi(x) \\
 &= \varphi_n(y) \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( \frac{n\pi}{2W} \right)^2 \right) \phi(x) = E\varphi_n(y)\phi(x)
 \end{aligned} \tag{8.7}$$

となる. (8.7) は局所的な近似であり, 各  $x$  についてこれが成立するとすると,  $x$  方向に関しては,

$$V_{\text{eff}}(n, x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{2W(x)} \right)^2 \tag{8.8}$$

だけの有効ポテンシャルを持つ 1 次元問題となる. この様子を描いたものが, 図 8.1(b) の下の図である.  $y$  方向の準位量子化  $n$  によって  $V_{\text{eff}}(n, x)$  は離散的に変化する. 結局中央部分では各電子のエネルギー分配状態は

$$E_{\text{tot}} = E_{k_x}(n, x) + V_{\text{eff}}(n, x) \tag{8.9}$$

であり,  $n$  で指数付けされている 1 次元状態と考えることができる. このような 1 次元伝導状態を伝導チャネル (conductance channel) と呼ぶ. 各伝導チャネルの状態密度は, 式 (8.1) の  $d_f = 1$  で表されることになる. 上記  $E_{k_x}(n, x)$  はチャネル毎に異なるから, 全体の  $E_F$  は固定されており,  $k_{xF}$  はチャネル毎に定義され, 状態密度もチャネル別に決まる.

### 8.2.3 量子ポイントコンタクトの電気伝導実験

実際に QPC を作って伝導を調べた実験を見てみよう. ゲートに加える負電圧の大きさを増加させると, (8.8) の有効ポテンシャルは  $W(x)$  の現象に伴い高くなり, 細線部分をポテンシャルに妨げられずに通過できるチャネルの数が減少する.

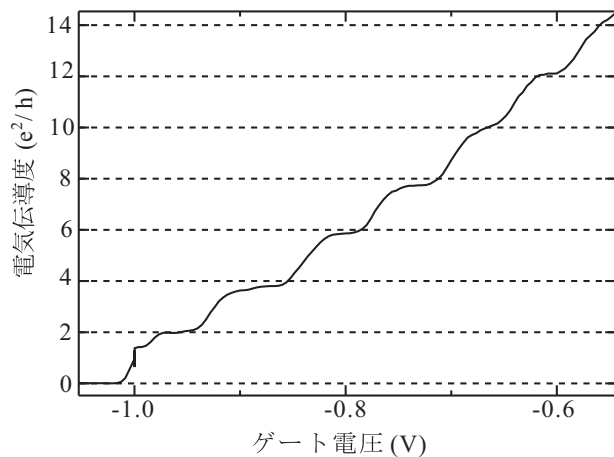
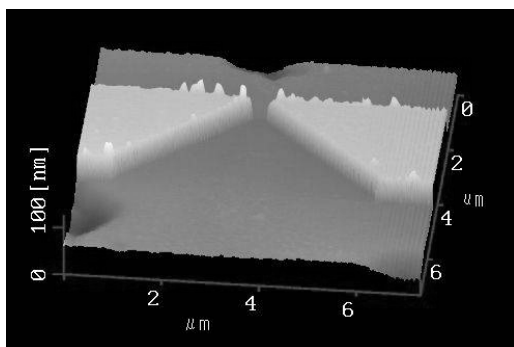
図 8.2(a) は実際に微細加工で作ったスプリットゲートを原子間力顕微鏡 (AFM) で観察した像. 図 8.2(b) は, ゲート電圧  $V_g$  に対して QPC の電気伝導度  $G$  (流れる電流を, 両側の電極の電位差 (化学ポテンシャル差を  $e$  で割ったもの) で割ったもの) をプロットしたものである.  $G$  が  $V_g$  に対して階段的に変化しており, 階段の高さはほぼ一定で  $2e^2/h$  であることがわかる. すなわち,  $G$  は  $2e^2/h$  の整数倍に量子化されている. 時間反転対称性が保たれ, スピン縮退が解けていないことを考えると, この実験で式 (8.5) の結果が確認されたことになる.

図 8.3 の実験では、QPC の伝導度が  $n \times 2e^2/h$  ( $n$  は整数) のステップの上 (プラトー) にある時に、原子間力顕微鏡 (AFM) の針を QPC の近くを下ろす。すると、QPC の伝導度の方にわずかなシフトが生じる。探針を動かしながら、このシフトをプロットすると、図 8.3(b) のように、 $n = 2$  のプラトーでは 2 つの腹をもった波が流れ出ている様子が、 $n = 3$  では 3 つ、 $n = 1$  では 1 つになる様子がわかる。これから、細線中での  $y$  方向の定在波の腹の数、すなわち細線を透過するチャンネル数と伝導度の量子化数  $n$  とが等しいことが実験的に示された<sup>\*3</sup>。

## 8.2.4 伝導チャンネルと透過率

以上、QPC を題材にして伝導チャンネル概念を導入した。QPC のように短い構造としたのは実験的に得やすいということが大きく、長い構造であっても散乱がなければ同じであり、実際高移動度の 2 次元系を使って細線構造を作ると伝導度量子化が確認される。次にこの量子細線を太くしていくことを考える。幅の増大に伴い、幅方向の量子化エネルギー準位間隔は狭まり、バンドの底からのフェルミ準位  $E_F$  の位置を固定すると、 $E_F$  以下の伝導チャンネル数が増大する。幅を無限に広げて 2 次元系にすることを考えると、2 次元系の電子濃度を  $n_{2D}$  とし、単位長さあたりのチャンネル数は、 $\sqrt{n_{2D}}$  となる。

以上では、散乱の全くない系を考えていた。今考えているのはコヒーレントな量子輸送であり、フォノンその他によるランダムな非弾性散乱は取り合えず考察の対象外であるが、不純物や格子欠陥などによるポテンシャル散乱は量子コヒーレンスを破らないため、これを取り入れることは可能である。散乱は伝播する状態間の遷移であり、従って今考えている言葉でいえば、伝導チャンネル間の遷移である。そこで、散乱中心を図 8.4(b) のように点で表し、この点を介してチャンネル間を電子が移り変わるとする。量子力学的な散乱であるからあみだくじのようにまるまる乗り移るわけではなく、波動が点で分離して流れていくことになる。伝導チャンネルはちょうどマイクロ波の導波管のような役割を果たしており、導波管は様々な形状の継ぎ手を使ってマイクロ波を分離したり合流したりできるが、散乱中心がこの継ぎ手の役割を果たしている。継ぎ手では波を逆行させる反射も生じるが、当然散乱中心でも生じる。散乱中心が増えて乱れた伝導体と呼ばれる状態になると、チャンネル描像では図 8.4(c) のように蜘蛛の巣状態となる。一見收拾がつかないように見えるが、伝導体の出口と入り口のみに着目し、入り口の  $i$  番目のチャンネルから 1 個の電子が出口



(a)

(b)

図 8.2 (a)QPC 構造の原子間力顕微鏡像。白く浮き上がって見えているのがゲート電極。下地は Al-GaAs/GaAs 2 次元電子系。(b) ゲート電圧に対して QPC の伝導度をプロットしたもの。測定温度は 30 mK。

<sup>\*3</sup> 例えば、チャンネル数が 3 であれば、腹が 1, 2, 3 の波が重なって出るはずではないか、と思われた方もいるとおもう。確かにそうのだが、1 次元系の状態密度は、バンドエッジを  $\epsilon_0$  とし  $1/\sqrt{\epsilon - \epsilon_0}$  と変化するので、実際には最も上にあるチャンネルの波動関数振幅が測定にかかる。また、進行方向の運動エネルギーを考えると最上チャンネルを通ってくる波が最も小さいので、プローブのポテンシャルに散乱されやすく、測定にかかりやすいこともある

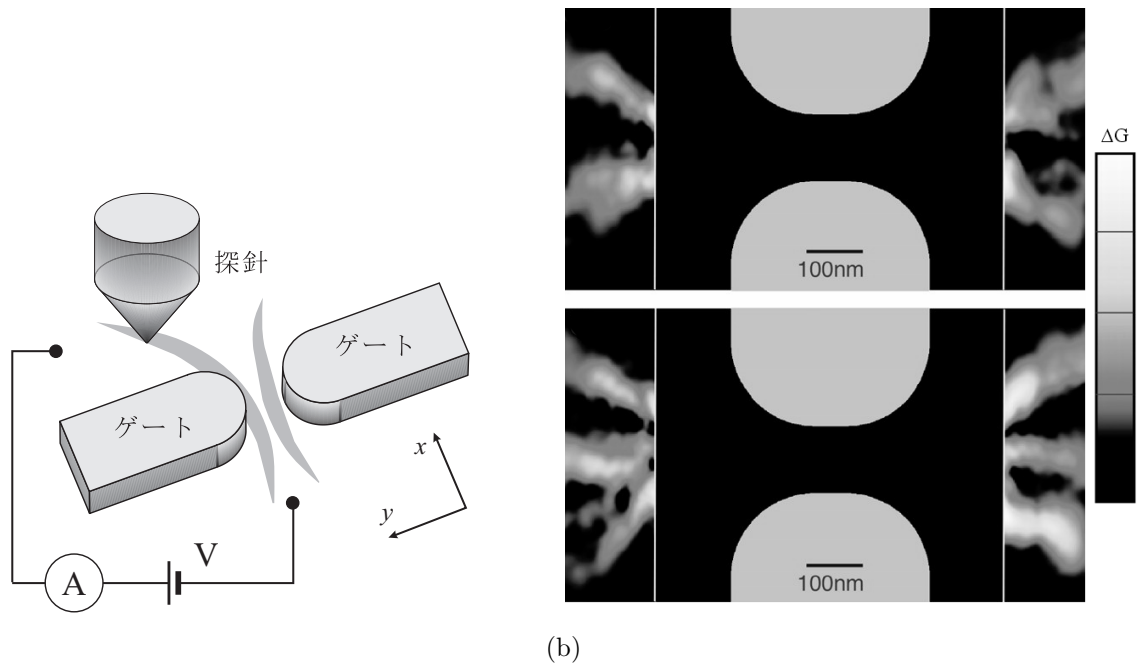


図 8.3 (a)QPC から流れ出る波動関数密度を走査プローブ顕微鏡 (SPM) を使用して測定するための実験のセットアップ. QPC の伝導度を測定しながら, SPM の探針を走査する. (b) このセットアップを使って得られた伝導度の量子化値からの「ずれ」の像. 中央部分は原子間力顕微鏡から得られた QPC 構造を描いたもの (形状は正確だが像そのものではない). 上は  $n_{\text{ch}} = 2$  の伝導度ステップでの測定, 下は 3 のステップでの測定. (データは Topinka *et al.*, Science **289**, 2323 (2000) より)

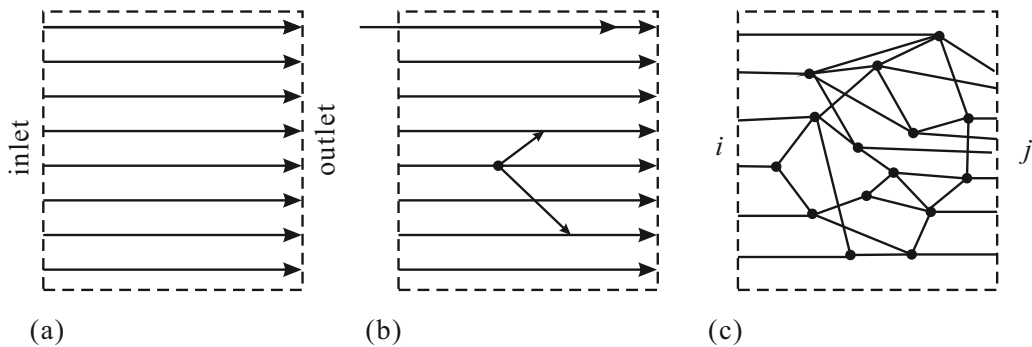


図 8.4 (a) 2次元の伝導体を1次元チャンネルの集合として表す. 2端子構成. (b) 散乱中心の導入. 伝導チャンネル間の遷移を引き起こす. (c) 多数の散乱中心を持つ「乱れた伝導体」.

の  $j$  番目のチャンネルに出ていく確率を  $T_{ij}$  と書いてみる. 散乱が全くない1チャンネルの電気伝導度が  $e^2/h$  で透過率  $T = 1$  であったことから, 透過確率行列  $\{T_{ij}\}$  を持つ伝導体の伝導度  $G$  は, スピン自由度2も加えると,

$$G = 2 \frac{e^2}{h} \sum_{i,j} T_{ij} \quad (8.10)$$

となる. (8.10) をランダウアーの2端子公式 (Landauer formula for 2-terminal conductance) と呼ぶ.

### 8.3 S 行列

伝導チャンネルをマイクロ波導波管と比較して散乱中心 (継手) を導入したが, 電子導波管 (electron waveguide) という呼び方もしばしばされる. コヒーレントな伝導体においては, 散乱中心ではなく実際に導波管の継手のように伝導チャンネルを分岐統合して干渉回路を構成するような枝分かかれもしばしば使用される. その取扱いに良く使用される

のが、マイクロ波回路でも使用される散乱行列 (**S 行列**) (scattering matrix, S-matrix) である。これは、図 8.5(b) のように散乱体に左右から入射してくる波動関数を  $a_1(k)$ ,  $a_2(k)$ , 流出する波動関数を  $b_1(k)$ ,  $b_2(k)$  とし、

$$\begin{pmatrix} b_1(k) \\ b_2(k) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L & t_R \\ t_L & r_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} \quad (8.11)$$

とするものである。  $A_i(k)$  などとは一部波動関数の進行方向が異なるため小文字表記とした。ここで、  $t_{L,R}$ ,  $r_{L,R}$  はそれぞれ左、右からの複素透過率・反射率である。散乱の際には位相シフト (phase shift) が生じるので、これらは一般に複素数である。透過率・反射率  $T_{L,R}$ ,  $R_{L,R}$  との関係は

$$T_{L,R} = |t_{L,R}|^2 = 1 - R_{L,R} = 1 - |r_{L,R}|^2 \quad (8.12)$$

である。

S 行列は T 行列と異なり、作用するベクトルにチャンネルが混じっていることから、一般には T 行列のように出力を次の入力とすることができない。一方、式 (8.11) のように、各行列要素の物理的な意味が明確であり、散乱に関する物理量を直ちに取り出せる点が特長である。

以上は、同じ波数を持つ 2 つの 1 次元チャンネルの接続について考えた。一般の場合に拡張しようとする、チャンネル毎に波数や分散が異なり、困難が生じる。最も簡単な QPC のような場合でも、  $G = n \times 2e^2/h$  のプラトー状態の場合、  $n$  個の伝導チャンネルが存在し、フェルミ波数は各チャンネルで異なっている。このような場合、式 (8.11) の入出力のベクトルで  $a_i(k)$  などに、単純に波動関数を使用すると、S 行列の物理的意味も曖昧となりユニタリー性 (後述) も失われる。そこで、波動関数を  $\psi_{ai}(k_F)$  などと書いて

$$a_i(k) = \sqrt{v_{Fi}} \psi_{ai}(k_F) \quad (8.13)$$

などとする ( $b_i$  についても同様) ことで、入出力ベクトルのノルムをとった際に「確率密度流」の大きさになるようにすることができる。複素透過率  $t$  に対して、  $|t|^2 = T$  が透過率になることになり、(8.13) を複素確率密度流と呼ぶことにしよう。

### 8.3.1 S 行列の接続 (合成)

T 行列を直列に接続するのは 2 重障壁のところをやったように単純に積を取れば良く、計算を簡単化するのに役立つ。一方、S 行列の場合、直列接続の場合下の図のように、全体で 8 本の入出力をクロス接続して、2 つで 1 つの S 行列とする。計算上は、まず

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = S_A \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} & t_R^{(A)} \\ t_L^{(A)} & r_R^{(A)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = S_B \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L^{(B)} & t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} & r_R^{(B)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

と置く。

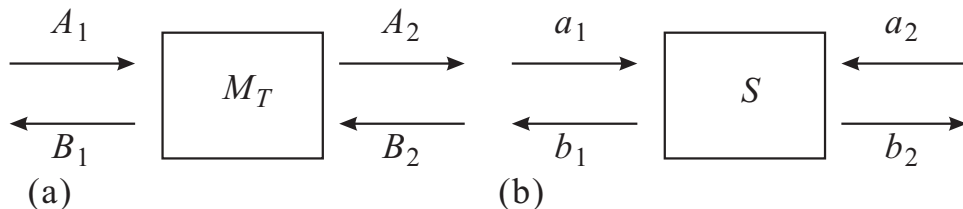
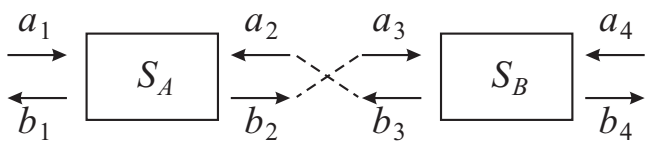


図 8.5 (a) T-行列  $M_T$  の概念図. (b) S-行列  $S$  の概念図



境界条件

$$b_2 = a_3, \quad a_2 = b_3 \quad (8.15)$$

を使用して、最終的な式からこれらの変数を消去し、1つのS行列の形に書きなおす。その結果得られるのが、次の合成S行列  $S_{AB}$  である。

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} + t_R^{(A)} r_L^{(B)} \left( I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} t_L^{(A)} & t_R^{(A)} \left( I - r_L^{(B)} r_R^{(A)} \right)^{-1} t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} \left( I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} t_L^{(A)} & r_R^{(B)} + t_L^{(B)} \left( I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} r_R^{(A)} t_R^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (8.16)$$

大変面倒な形をしていて、どうしてわざわざこのようなものを考えるのか不思議かもしれない。しかし、これは2つの散乱体があった時、その間を伝播する波が時空間でどのような経路を取るかを示している。(8.16)の(1,1)成分を考え、第2項に現れた除算を

$$\left( I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} = I + r_R^{(A)} r_L^{(B)} + (r_R^{(A)} r_L^{(B)})^2 + (r_R^{(A)} r_L^{(B)})^3 + \dots \quad (8.17)$$

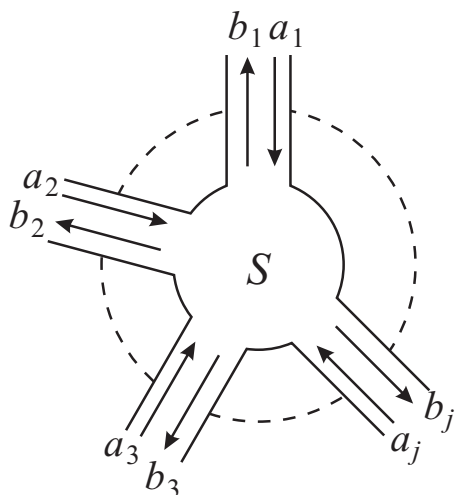
と展開すると、結局この第2項が散乱体A、B間での何回かの反射の後に反射される過程を足し上げたものであることがわかる。S行列は各要素の意味が式(8.11)のように簡単明瞭であり、各散乱の単一摂動過程を表しているため、物理的な解釈がしやすく、またチャンネル数および電極数が増えた場合にも適用が容易である。

以上のT行列、S行列接続においては伝送路上での位相回りは考えなかった。これは、位相回りを表すT、S行列を挿入することで対応する。伝送路自身が共鳴器として働くような場合もこれによって対応できる。

式(8.13)のように入出力を複素確率密度流に定義しなおしたので、多チャンネル化は容易であり、入出力ベクトルの次元を増やせば良い。(8.17)を書き下ろす際に積の順番に注意し、また除算は逆数を乗ずる形とし、1をIとしているが、これは、 $a_1$ などをベクトル、 $r(A)_r$ などを行列で表示することで容易に多チャンネルに拡張するためである。

伝送路上ではチャンネル間に相互作用(散乱)を考えていない。従って、多チャンネルの場合、チャンネルをどう伝送路に配置するかはS行列の場合問題にならない。従って、左図のように伝送路に差別なく結線(wire connection)を行うことができる。この意味で、S行列は結節点と取る

こともできる。T行列も当然同じではあるのだが、(入力)→(出力)の関係があるので、S行列のように伝送路が等価でないので扱いに注意が必要となり、また当然接続において単純に積を取れば良いという特性は使えなくなる。



## 8.4 オンサガー相反性

S行列の大切な性質として、ユニタリー性(unitarity)がある。複素確率密度流(8.13)の定義から、確率密度の保存により  $|a|^2 = |Sa|^2$  でなければならない、ユニタリー性の要請は自明である。これより導かれる電気伝導において重要な対称性の1つがオンサガー相反性(Onsager reciprocity)である。輸送現象一般に成立する対称性であるが、S行列形式では磁場  $\mathbf{B}$  に対して

$$S(\mathbf{B}) = {}^t S(-\mathbf{B}) \quad (S_{mn}(\mathbf{B}) = S_{nm}(-\mathbf{B})) \quad (8.18)$$

と表すことができる。

これは、次のように導かれる。今、考えているのが、1体のSchrödinger方程式の散乱問題だったことを思い出す。Schrödinger方程式

$$\left[ \frac{(\hbar \nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi = E\psi \quad (8.19)$$

の複素共役をとり， $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$  とすると，

$$\left[ \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi^* = E\psi^* \quad \therefore \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (8.20)$$

すなわち， $\psi(B)$  と  $\psi^*(-B)$  は同じ解集合を形成している ( $\{\dots\}$  は  $\dots$  の集合を表す)．ここで，考えている  $\psi(B)$  は Schrödinger 方程式 (8.19) の散乱解だったことを思い出そう．散乱解を  $\text{Sc}\{\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{b}\}$  ( $\mathbf{a}$  は S 行列の入射波， $\mathbf{b}$  は散乱波) と表すと，

$$\text{Sc}\{\mathbf{a}(B) \rightarrow \mathbf{b}(B)\} \in \{\psi(B)\}, \quad (8.21)$$

$$i.e., \quad \mathbf{b}(B) = S(B)\mathbf{a}(B) \quad (8.22)$$

(8.22) の両辺の複素共役をとって

$$\mathbf{b}^*(B) = S^*(B)\mathbf{a}^*(B). \quad (8.23)$$

一方，進行波  $\exp(\pm i\mathbf{k}r)$  に対して複素共役をとることは，波の進行方向を逆転することになる\*4．つまり，複素共役を取ることに入射波と散乱波が入れ替わり

$$\text{Sc}\{\mathbf{b}^*(B) \rightarrow \mathbf{a}^*(B)\} \in \{\psi^*(B)\} \quad (8.24)$$

$$\therefore B \rightarrow -B \text{ とすると } \text{Sc}\{\mathbf{b}^*(-B) \rightarrow \mathbf{a}^*(-B)\} \in \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (8.25)$$

$$i.e. \quad \mathbf{a}^*(-B) = S(B)\mathbf{b}^*(-B) \quad (8.26)$$

(8.26) より

$$\mathbf{b}^*(B) = S^{-1}(-B)\mathbf{a}^*(B) \quad (8.27)$$

であるから，(8.23) と比較して

$$\begin{aligned} S^*(B) &= S^{-1}(-B) = S^\dagger(-B) \quad (\because \text{unitarity } SS^\dagger = S^\dagger S = I) \\ \therefore S(B) &= {}^t S(-B) \end{aligned} \quad (8.28)$$

以上より相反性が証明された．

特に，ここまで考えてきたような 2 端子伝導の場合，すなわち入口と出口，およびそれに接続された電極が 1 つずつあって電極間の電圧降下と電流との比で電気抵抗を考える場合，電気抵抗 ( $\rho_{xx}$ ) の磁場応答 (磁気抵抗) について対称性

$$\rho_{xx}(\mathbf{B}) = \rho_{xx}(-\mathbf{B}) \quad (8.29)$$

が導かれる．これは，輸送係数の線形性を仮定しているので，非線形素子では有限バイアス下で破れる．特性が正負バイアスで対称であれば，バイアス反転も含めれば回復する．

## 8.5 Landauer-Büttiker の公式

これまで，2 端子の伝導体のコヒーレントな伝導について扱ってきた．コヒーレントな伝導の実験は，S 行列の扱いなどを見てもわかるように，一種の散乱実験とも見ることができる．散乱波を検出する検出器に相当するのが端子であり，端子の数は一般の伝導実験では 2 端子以上，多数考えることができる．端子数に特に制限を設けず，すべてを同等に扱う散乱理論形式が **Landauer-Büttiker** の公式である．

端子を  $p, q$  など指数付けしよう (図 8.6)．端子  $p$  は化学ポテンシャル  $\mu_p = -eV_p$  を持つ粒子溜めに接続されているとする．端子  $p$  から試料に流れ込む電流  $J_p$  は， $p$  から試料へと向かうチャンネルの電流から， $p$  以外の各端子から試料を通して  $p$  へ流れ込む電流を差し引いたものであるから，

$$J_p = -\frac{2e}{h} \sum_q [T_{q \leftarrow p} \mu_p - T_{p \leftarrow q} \mu_q] \quad (8.30)$$

\*4 (8.19) は，「時間によらない」Schrödinger 方程式なので，ここで複素共役と呼ぶのは  $i\omega t$  の符号はそのままにして  $i\mathbf{k}r$  の符号のみ反転することを意味する．



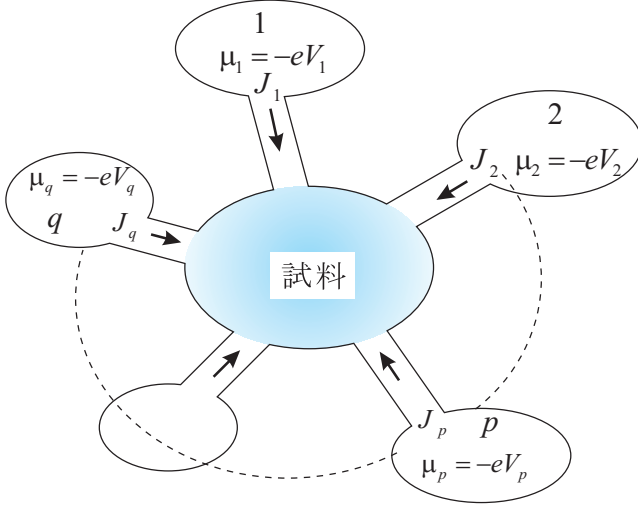


図 8.6 LB 公式を導くモデル.

まず、電流の保存から

$$\sum_q J_q = 0 \quad (8.32)$$

である。次に、全端子の電位が同じなら電流は零のはずであるから、

$$\sum_q [G_{qp} - G_{pq}] = 0 \quad (8.33)$$

となる。

更に、外部磁場  $B$  に対して **Onsager** の相反定理

$$G_{qp}(B) = G_{pq}(-B) \quad (8.34)$$

が成立する。これはもちろん、S-matrix の時に成立した Onsager の相反定理からの帰結である。以上がランダウアー・ビュティカーの伝導公式である。

4つの端子を持つ試料を考える。4つの化学ポテンシャル（電位）の内、端子4の電位を参照電位として  $V_4 = 0$  とおく。すると、

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} \quad (8.35)$$

と書くことができる。

さて、カシミール (Casimir) 問題と呼ばれる、

$$J_1 = -J_3, \quad J_2 = -J_4 \quad (8.36)$$

という境界条件を考えよう。これは、 $J_2 = 0$  とおけば、1-3 に電流を流して 2-4 で（電流を流さずに）電圧を測定する通常の4端子測定問題になるので、これを含んでいる。この問題の解は、 $V_{ij} \equiv V_i - V_j$  において

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{13} \\ V_{24} \end{pmatrix} \quad (8.37)$$

という形に書くことができる。ただし、

$$\alpha_{11} = 2G_q[-\mathcal{T}_{11} - S^{-1}(\mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{12})(\mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{21})] \quad (8.38a)$$

$$\alpha_{12} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{12}\mathcal{T}_{34} - \mathcal{T}_{14}\mathcal{T}_{32}) \quad (8.38b)$$

$$\alpha_{21} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{21}\mathcal{T}_{43} - \mathcal{T}_{23}\mathcal{T}_{41}) \quad (8.38c)$$

$$\alpha_{22} = 2G_q[-\mathcal{T}_{22} - S^{-1}(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{23})(\mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{12})] \quad (8.38d)$$

と書くことができる。  $T_{p \leftarrow q}$  等を、

$$\mathcal{T}_{pq} \equiv T_{p \leftarrow q} \quad (p \neq q), \quad \mathcal{T}_{pp} \equiv -\sum_{q \neq p} T_{q \leftarrow p}$$

と、行列  $\mathcal{T}$  の形で表すと、 $\mathbf{J} = {}^t(J_1, J_2, \dots)$ 、 $\boldsymbol{\mu} = {}^t(\mu_1, \mu_2, \dots)$  (いずれも列ベクトル) として、

$$\mathbf{J} = \frac{2e}{h} \mathcal{T} \boldsymbol{\mu}$$

と表すことができる。また、

$$V_q = \frac{\mu_q}{-e}, \quad G_{pq} \equiv \frac{2e^2}{h} T_{p \leftarrow q} \quad \text{とおくと}$$

$$J_p = \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q] \quad (8.31)$$

である。基本はこれだけであるが、以下のように様々な制限条件がつく。

$$S = \mathcal{I}_{12} + \mathcal{I}_{14} + \mathcal{I}_{32} + \mathcal{I}_{34} = \mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41} + \mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43} \quad (8.39)$$

である。(8.37)は電圧で電流を表す形になっているが、もちろんこれは式の上でそう書いているだけで、物理的な操作としては何らかの電気回路等のフィードバックを使用して、(8.36)の条件が満たされるように、 $V_1, V_2, V_3$ を調整することになる。

Landauer-Büttiker 公式を使って、4端子伝導度ではどのようなことが生じるか考える。(8.34)が(8.37)に与える条件は、

$$\alpha_{11}(B) = \alpha_{11}(-B), \quad \alpha_{22}(B) = \alpha_{22}(-B), \quad \alpha_{12}(B) = \alpha_{21}(-B) \quad (8.40)$$

である。

通常の4端子問題に適用して、13:電流端子, 24:電圧端子, とした時のLB流「電気抵抗」を $\mathcal{R}_{13,24}$ などと書くことにすると、

$$\mathcal{R}_{13,24} = \frac{V_2 - V_4}{J_1} = \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (8.41)$$

となり、行列要素は Onsager の相反定理を満たしているが、 $\mathcal{R}$ は(8.29)のような磁場反転に対する対称性を満たさない。一方

$$\mathcal{R}_{24,13} = \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (8.42)$$

と、(8.40)より、電流電圧端子を入れ替えた磁気抵抗は、磁場反転に対して対称である。

一般に

$$\mathcal{R}_{mn,kl} = R_q \frac{\mathcal{I}_{km}\mathcal{I}_{ln} - \mathcal{I}_{kn}\mathcal{I}_{lm}}{D}, \quad D \equiv R_q^2(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})S \quad (8.43)$$

なので、相反関係

$$\mathcal{R}_{mn,kl}(B) = -\mathcal{R}_{kl,mn}(-B) \quad (8.44)$$

が成立する。負号がついたのはもちろん単なる端子の順番の問題である。

上の結果は、実際に量子コヒーレントな試料に対して4端子を接続して測定したとき、どのような磁気抵抗が現れるか分析する上でも重要な手がかりを与えている。すなわち、一般に4端子測定においては磁場の反転( $B \rightarrow -B$ )を行っても測定される電気抵抗の値は同じになるとは限らない。しかし、電流電圧端子を入れ替えた上で逆向きの磁場の下で抵抗を測定すると、それは同じ値になっているべきである。

## 参考文献

- [1] W. N. Can, IEEE Trans. Electron Dev., ED-12, 531 (1965).
- [2] Y. Narukawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **46**, L963 (2007).
- [3] 本格的に学ぶには例えば, R. Loudon, “The Quantum Theory of Light” (3rd ed., Oxford, 2000); P. Meystre and M. Sargent III, “Elements of Quantum Optics” (Springer, 1990); 松岡正浩 「量子光学」 (裳華房, 2000) など.
- [4] 早川尚男 「非平衡統計力学」 (サイエンス社, 2007).
- [5] S. Datta, “Electron Transport in Mesoscopic Systems” (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [6] 勝本信吾 「メゾスコピック系」 (朝倉書店, 2002)

### 8.5.4 アハロノフ-ボーム リング

例として Aharonov-Bohm (AB) リングの透過率を考える。図のような伝導チャンネル構成とし、三叉路部分の S 行列を

$$S_t = \begin{pmatrix} 0 & -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \\ -1/\sqrt{2} & -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (8.51)$$

とする\*1。AB 位相については、片側の経路に

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_{AB}} \\ e^{-i\theta_{AB}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \theta \equiv 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} = \frac{e}{\hbar} \phi \quad (\phi \text{ はリングを貫く磁束。}) \quad (8.52)$$

という S 行列で表される導体を挿入し、またリングの両方の腕の行路差を表す S 行列

$$S_w = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_0} \\ e^{i\theta_0} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.53)$$

を、反対側の経路に挿入する。磁場なしの行路差による位相シフト  $\theta_0$  は伝播方向によらないのに対し、 $\theta_{AB}$  は向きにより反転し、この導体のオンサガー相反性(??)は、これによって満たされる。

以上の合成 S 行列より、リング全体の複素透過率は

$$t = \frac{4 \sin \theta_0}{1 + e^{i\theta_{AB}} (e^{i\theta_{AB}} + e^{i\theta_0} - 3e^{-i\theta_0})} \quad (8.54)$$

と得られる [3]。透過率(??)より伝導度  $T = |t|^2$  は磁束  $\phi$  に対して、図 8.19(b) のように  $\phi_0$  周期の AB 振動をしている。 $\theta_0$  を変化させても、同様に  $2\pi$  周期の振動をしている。 $|t|^2$  は  $\phi = 0$  軸に対して対称であり、S 行列 (8.52) に対して導入した Onsager 相反性により、(8.54) にも相反性が成立した結果である。周期  $\phi_0$  の振動に着目すると、その振動位相は  $\theta_0$  に対して  $\pi$  を振幅とする矩形波状に変化し、位相がジャンプする付近では振幅がなくなる。磁気抵抗振動が消失するわけではなく、 $\phi_0/2$  周期を始め、高調波成分は振幅が大きくなる。このように、 $\theta_0$  の連続変化に対して  $\phi_0$  周期成分の位相が  $0$  か  $\pi$  しか取り得ないことを AB 振動位相の固定 (phase rigidity) と呼ぶ [4]。位相の固定があるため、AB リングに量子ドットを埋め込んだ系で AB 振動を測定しても振動位相からドットでの位相シフトを検出することはできないことになる\*2。

## 8.6 量子輸送と統計性

半導体中の輸送現象としては、電子（電荷およびスピン）の輸送を考えることが多いが、輸送を担う準粒子には電子とは異なる振舞いをするものもある。これまで見た量子輸送論をどのように適用するか（適用できないか）考えておこう。

\*1 良く採用される形だが、完全な対称形であるためどちらかというとやや特殊である。

\*2 複数伝導チャンネルを考え、更に磁場領域を限ると、これが破れて位相シフトが連続的に発生するようになることがある [5]。Onsager 相反性が破れるわけではない。

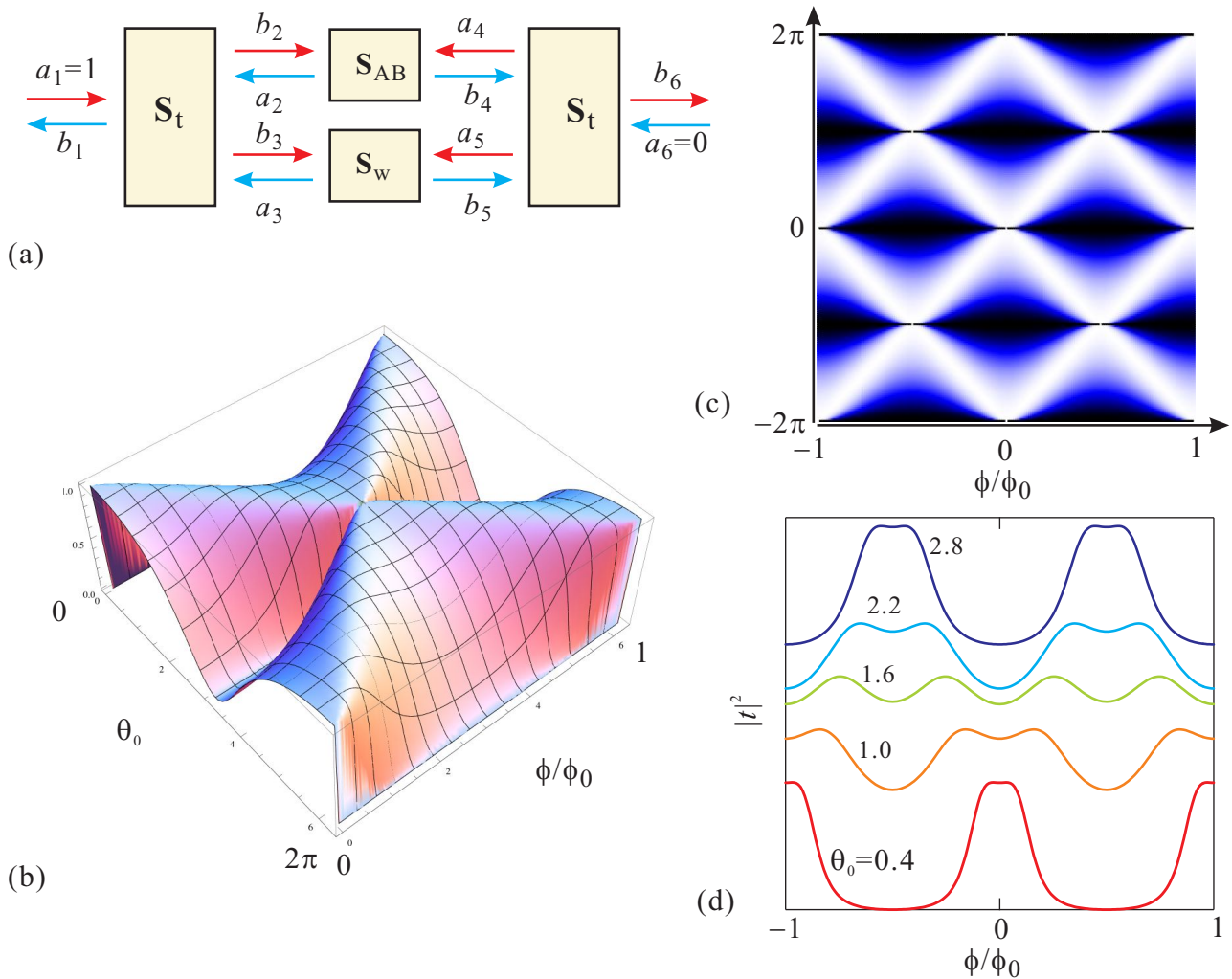


図 8.19 (a) AB リングの S 行列モデル. (b) 式 (8.54) から計算された AB リングの透過率  $|t|^2$  を行路差を位相で表したもの ( $\theta_0$ ) とリングを貫く磁束  $\phi/\phi_0$  の関数としてプロットした. (c) (b) と同じ計算結果を、やや広い領域で 2 次元カラープロットしたもの. (d) やはり同じ透過率を、細線部の位相シフトのいくつかの値に対して、 $\phi/\phi_0$  の関数として描いた.  $\phi_0$  周期の AB 振動は  $\theta_0 = 1.6$  付近で一旦消え、振動が反転、すなわち位相が  $\pi$  だけ飛躍することがわかる.

### 8.6.1 バンチング・アンチバンチング

前節で、半導体量子構造中の電気伝導を扱うために Landauer 公式を導入した. 電子の伝導を前提としており、その導出には単位電荷およびフェルミ分布が使用されていた. 従って、これは化学ポテンシャルの異なるフェルミ粒子系を量子細線で接続した際にどれだけの粒子流が流れるかを考えたものと言うことができる. 一方、Landauer 公式中にある透過係数  $T_{ij}$  を計算するために、T 行列、S 行列形式を導入したが、これ自身は、波の透過や反射を考えるだけで、統計性とは直接関係しておらず、フェルミ粒子系でなくても適用できると考えられる.

同種ボース粒子・フェルミ粒子のバンチング・アンチバンチングについて初等的なところを見ておくと、同種 2 粒子の波動関数は座標表示で

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \pm \phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1)] \quad (8.55)$$

と書くことができる. 複号は + がボソン、- がフェルミオンに相当する. 図 8.20(a) に  $\phi_{1,2}(\mathbf{r})$  として、空間的に一部オーバーラップを持つガウス分布的なものを考え、この場合に、式 (8.55) で表される 2 粒子の波動関数が、2 粒子の相対位置に対してどのような存在確率密度を与えるかを模式的に示したのが図 8.20(b) である. (8.55) で  $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$

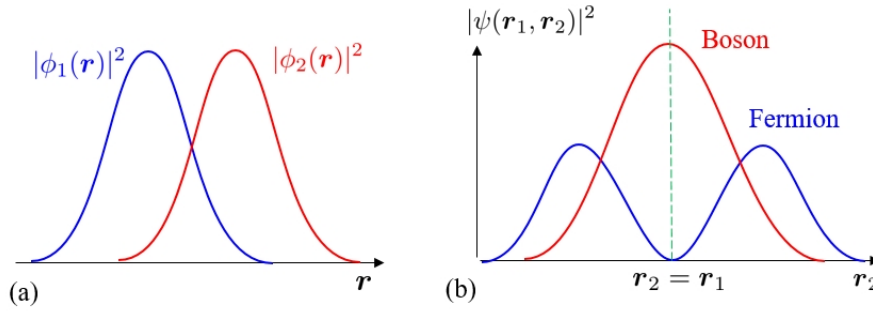


図 8.20 (a) 一粒子の波動関数で表される確率密度の座標表示  $|\phi_1(\mathbf{r})|^2$ ,  $|\phi_2(\mathbf{r})|^2$  を模式的に描いたもの. 空間的に一部の重なりがある場合. (b)(a) の場合に, 粒子 1 の座標  $\mathbf{r}_1$  を基準に取り, 粒子 2 の座標  $\mathbf{r}_2$  に対して (8.55) の  $\psi$  で与えられる粒子 2 の空間存在確率密度を模式的に描いたもの.

と置いてみればすぐわかるように, ボソン, フェルミオンの場合, それぞれ,

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)|^2 = \begin{cases} 2|\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2|\phi_2(\mathbf{r}_1)|^2 & (\text{boson}), \\ 0 & (\text{fermion}) \end{cases} \quad (8.56)$$

となって, ボソンでは存在確率が一粒子の場合の 2 倍, フェルミオンでは 0 となる. これは, ボソンは粒子同士が接近して固まるバンチングが生じるのに対し, フェルミオンでは粒子同士が避けあうアンチバンチングが生じることを示している.

Landauer 公式の元となった (8.3)~(8.5) の考察は, このアンチバンチングを使っても理解することができる. すなわち, 1 次元系につながった電子溜め間の化学ポテンシャル差が  $eV$  であった場合, 電子を一方に流すための波束構成に使用できる固有状態のエネルギー幅がこの程度  $\Delta E \sim eV$  である. この波束が空間の一点を通過するのに必要な時間は, 不確定性より  $\Delta t = h/\Delta E = h/eV$  である. アンチバンチングすなわちフェルミオンの統計性により, この波束 1 個に電子 1 個 (スピンを考慮すれば 2 個) が収容できるから, この 1 次元系を流れる電流は  $J = e/\Delta t = (e^2/h)V$  (スピンを考慮して  $(2e^2/h)V$  となって同じ結果を与える).

以上の理解は, ある意味単なる言い換えであるが, 量子細線上の電子の流れを考える上で重要な示唆を与える. 量子細線で伝導度が量子化している時, 上記の  $h/eV$  という時間間隔で電子は流れるため付録 8A のショット雑音の項にあるように, 「規則正しいデルタ関数」の場合となり, ショット雑音はゼロとなる. Landauer の議論では, 伝導度の量子化はフェルミオンのアンチバンチングの帰結であったが, ショット雑音からそれが確認できる可能性がある, ということになる. 透過率  $\mathcal{T}$  が 1 以下で, 一部の電子が反射される量子細線にも拡張すると,  $G = \mathcal{T}G_q$  である. この時, 「用意できたにもかかわらず電子が反射により占有されなかった」波束状態が一部生じ, これは確率過程であるためショット雑音となる. これは, 整然とした波束列を, 確率  $\mathcal{T}$  で電子,  $1 - \mathcal{T}$  で正孔が占めていると見ることができる. 電子, 正孔が同種間では区別のできない粒子であることを考えると, 空席が取り得る場合の数, すなわち乱雑さの程度は  $\mathcal{T}(1 - \mathcal{T})$  に比例する.  $\mathcal{T} \rightarrow 0$  では, (8A.3) と同形になり, 電圧を  $V$  として  $J = 2\mathcal{T}G_q V$  となる (スピン自由度 2 を考慮) ことを考えると, 雑音パワースペクトルは

$$S \equiv \frac{\langle (\delta J)^2 \rangle}{\Delta f} = 2e \frac{2e^2}{h} V \mathcal{T}(1 - \mathcal{T}) \quad (8.57)$$

と書くことができる [?]. これは, (8A.3) の  $S_{\text{Poisson}}$  に比べて, 因子  $1 - \mathcal{T}$  だけ雑音が抑えられている. 一般に, 分散の平均値に対する比をファノ因子 (Fano factor) と呼ぶが, 今の場合はショット雑音のポアソン雑音に対する比で,  $1 - \mathcal{T}$  となっている.

図 8.21 に測定例を示した. 伝導度の変化 (a) に対して, 伝導度プラトーの中央付近, これを挟む遷移領域の 3 点で QPC 電圧に対して電流雑音 (ゆらぎの 2 乗の周波数密度) を測定したものが (b) である. 遷移領域では, 電圧に対して雑音が増大し, ショット雑音が生じていることがわかるが, プラトー中央では電圧に対する雑音増大は非常に小さく, 雑音が抑えられていることがわかる. 伝導度に対するファノ因子の形にプロットしたのが (c) で, 青線で示

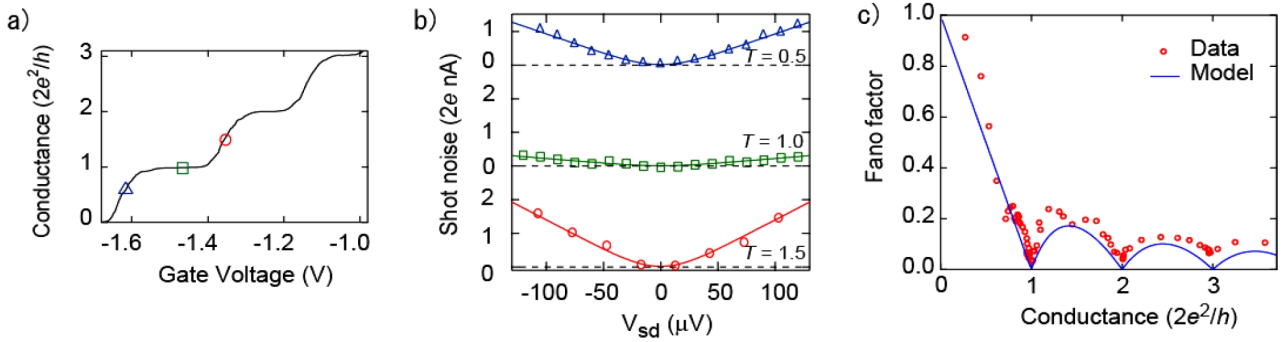


図 8.21 QPC の伝導度量子化プラトーおよびその周囲で測定したショット雑音. (a) 伝導度量子化の様子. (b) (a) 中に示した 3 点で測定したショット雑音. (c) ファノ因子を QPC 伝導度に対してプロットしたもの. 青線は、ファノ因子が  $1 - T$  になるという簡単なモデルから得られるもの. [6] より.

したファノ因子が  $1 - T$  になるという簡単なモデルで概ね説明できることがわかる.

## 8.6.2 励起子ポラリトンの輸送現象

ボース統計に従う準粒子として、4.4.2 節で導入した励起子ポラリトン (exciton-polariton, E-P) を取り上げる. 励起子ポラリトンは、光 (電磁場) と物質との強い相互作用により、光と励起子が混じった準粒子である. 励起子はフェルミオンの対であるためボース統計に従うが、式 (3.33) にあるように、その有効質量は電子と正孔の有効質量を合わせた  $m_e + m_h$  となる. 一方、励起子ポラリトンは、図 4.7 の分散関係からもわかるように、光の質量ゼロを反映して  $k \approx 0$  付近では有効質量が極めて小さい. このため、光子場によって位相制御を行うことが可能になり、光回路への応用研究が行われている. また、BEC の臨界温度 (8B.10) が非常に高くなる可能性があり、実際、BEC を観測した、という報告がなされている.

### 8.6.2.1 共振器励起子ポラリトン

E-P を安定して伝播させるために使用されるのが、レーザーダイオードの項で出てきた 2 次元的な共振器を更に細く加工して伝送路とした図 8.22(a) のような構造である. ここでは、GaAs を量子井戸としてこれを GaAs/AlGaAs の超格子 (SL) で挟み、更に外側に GaAs のクラッド層を配置した構造をしている. GaAs に比べて SL 部分は有効屈折率が低く、光子はこの部分に閉じ込められる. 一方、励起子は、SL 部分がバンド不連続により障壁として働くので、中央の GaAs 量子井戸に閉じ込められる. この時、2 次元励起子となって相対的に束縛エネルギーが大きくなり安定することは 7.1.3 節で見たとおりである. 以上の仕掛けにより、励起子ポラリトンを伝播させることができるが、そのためには一定の低温環境が必要である. その温度の目安は、図 8.22(c) の分散関係で、上側の枝と下側の枝の間のギャップに相当し、図 8.22 のような系でも窒素温度を超える可能性がある.

図 4.7 の分散は、物質中光子と励起子によるものであったが、このような E-P 導波路では、光子はマイクロキャビティに強く閉じ込められているため、分散が変化する. 図 8.22(c) は、光子のキャビティモードと励起子の分散との間に相互作用による準位間反交差 (avoided crossing) が生じることを示している. ただし、このキャビティは図 8.24 にあるものである.

図 8.23 左図は、図 8.22(a) の共振器伝送路を用いた、Mach-Zehnder (MZ) 型干渉計デバイスの概念図である. 励起子の項でも述べたように、電子正孔で電場に対する応答が逆であるため、完全に一体の複合粒子としてみれば電場の影響が現れにくい、図 8.22(a) の構造を用いて励起子の束縛エネルギーを変化させることで、有効な運動エネルギーを通して波数が

$$\Delta\varphi = L \left[ \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m(E_k - \delta E)}}{\hbar} \right] \quad (8.58)$$

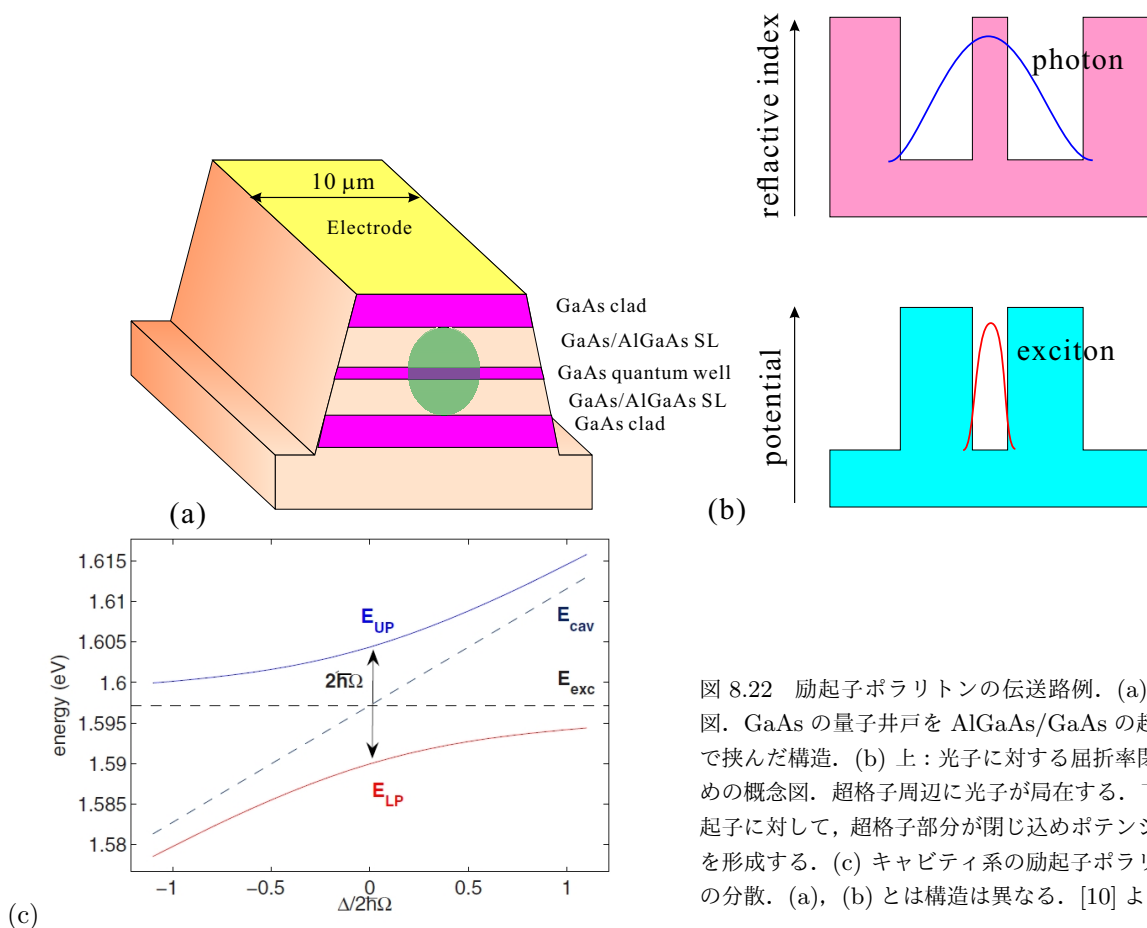


図 8.22 励起子ポラリトンの伝送路例. (a) 断面図. GaAs の量子井戸を AlGaAs/GaAs の超格子で挟んだ構造. (b) 上: 光子に対する屈折率閉じ込めの概念図. 超格子周辺に光子が局在する. 下: 励起子に対して, 超格子部分が閉じ込めポテンシャルを形成する. (c) キャビティ系の励起子ポラリトンの分散. (a), (b) とは構造は異なる. [10] より.

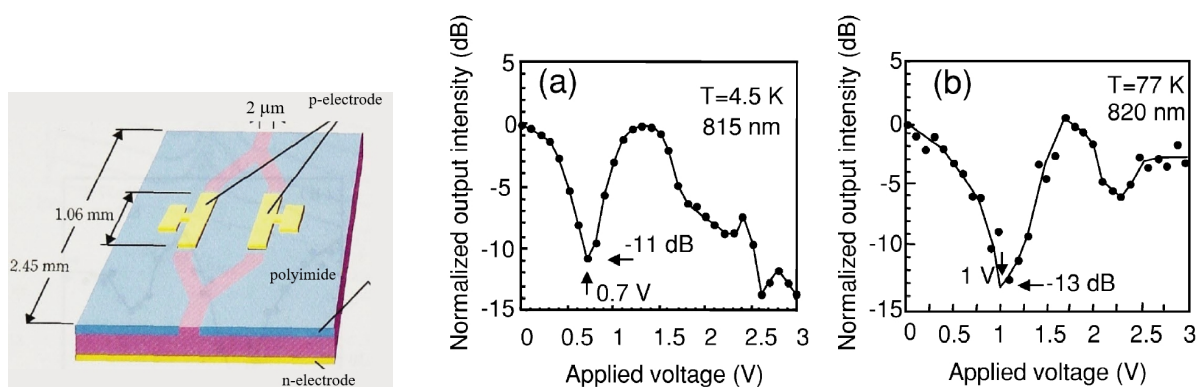


図 8.23 左: 励起子ポラリトンの Mach-Zehnder(MZ) 型干渉計デバイスの概念図. (a) ゲート電圧に対する, MZ 干渉デバイスの出力変化 (4.5 K). (b) 同, 77 K.

のように変化する.  $\delta E$  は, 上記有効運動エネルギーの変化を代表させたもので,  $L$  はゲート領域の距離である. これによって, 図 8.23 左図のような 2 経路回路では, 2 経路の干渉効果によって, 出力が変化する. 最終的には素子端から光子になって放出されるため, 出力光強度として検出することができる.

図 8.23 の回路は, MZ 干渉計ということになっているが, 出力が 1 経路しかないため, 合流点での反射波が存在し, どちらかと言えば, 2 端子 AB 型干渉計 (今, AB 位相はつけることができないので, リング型というべきかもしれない) というべきものである. 図 8.23(a), (b) にあるように, ゲートに印可した電圧によって, 光出力を 10 dB 以上抑制することができ, 電圧-光スイッチ機能が実現されている.

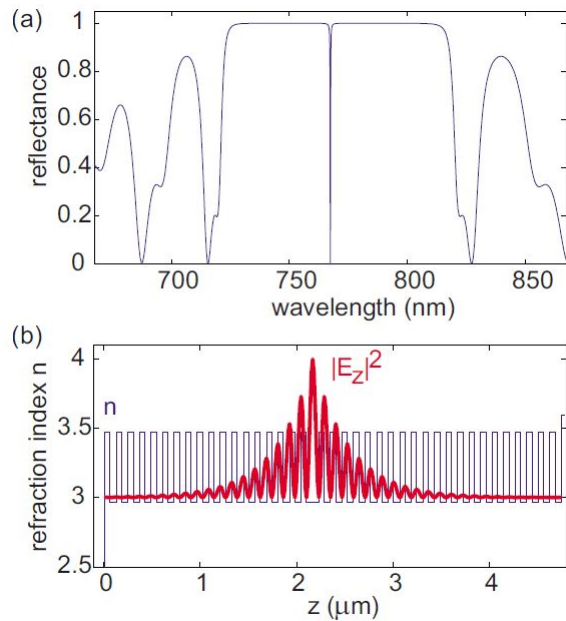
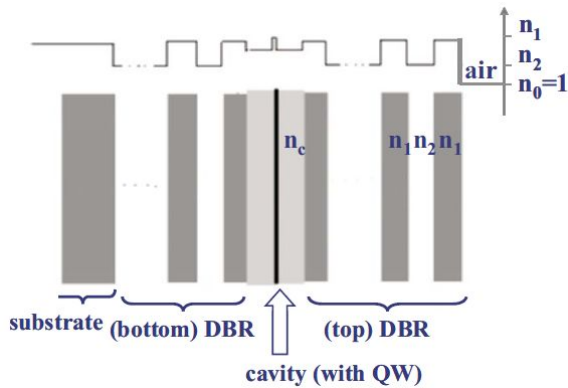


図 8.24 左：励起子ポラリトン凝縮を観測するために用いられた導波路共振器の模式図。上は屈折率。右：(a) 左のキャビティの反射率を計算したもの。(b) 共振器の屈折率の図と、(a) で中心付近の鋭い共鳴透過を示す局在モードの  $z$  方向電場分布を赤線で描いたもの。[10] より。

### 8.6.2.2 励起子ポラリトンの凝縮

以上見たように、量子回路を流れるフェルミオンの代表である電子に対してマイクロ共振器中の E-P はボソンの量子回路を実験することができる系であると言える。フェルミ統計の量子回路を流れるフェルミオン流に対する帰結が伝導度の量子化であった。これに対して、ボソン統計の場合は、8.6.1 節で見たように、粒子のバンチングが生じるのが特徴で、その帰結として、ボース・アインシュタイン凝縮 (Bose-Einstein condensation, BEC) あるいは、その類似現象が存在する。レーザー発振現象のもととなった誘導放出も、ボソンのバンチングと類似現象であり、キャビティ中のレーザー光は一種の凝縮状態と考えられなくもない。しかし、誘導放出は非平衡開放系の現象であり、BEC は熱平衡系の現象であるので、その点は区別する必要がある [8, 9]。

図 8.24 は、BEC の観測のために使用されるキャビティの屈折率分布、また、中央付近に局在するモードの  $z$  方向電場エネルギー密度の分布を描いたもので、電子伝播の計算にも用いた T 行列法を用いて計算されたものである。このように、T 行列、S 行列は、フォトニック結晶など様々な波動伝播問題に使用される。

3次元理想気体の BEC については、付録 8B に簡単にまとめた。式 (8B.10) の臨界温度  $T_c$  の式からわかるように、粒子の質量が軽いほど、また、粒子密度が高いほど  $T_c$  は高くなる。逆に、質量、温度が決まっていれば、BEC を起こすための臨界粒子密度が定義されることになる。図 8.25(a) は、キャビティ系へのレーザー照射によって BEC が生じるプロセスを模式的に示したものである。プロセスの初期にはレーザーパルスによって、エネルギーの高い E-P が多数励起される。これらは、フォノン系にエネルギー放出し、「冷却」される。レーザーパルス強度がしきい値  $P_{th}$  より高いと、冷却に伴い、BEC を生じて最低エネルギー状態に多数の E-P が落ち込む。図 8.25(b) は、この様子を、キャビティからの漏洩光により測定したものである。

ここで注意しておかなければならないのは、この E-P 系は 2次元面内への閉じ込めモードであるため、付録 8B の 3次元の BEC は適用できないことである。2次元以下の空間次元においては、Mermin-Wagner の定理 [11] にあるように、無限遠までコヒーレンスが続くような長距離秩序は生じない。代わって Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移が生じて距離のべきで減衰するような秩序が生じる [12]。実際に、BKT 転移を示す、渦対の発生なども観測されている。その他、E-P 系の BEC では非常に多くの現象が観測され、理論・実験共に盛んに研究が進められ



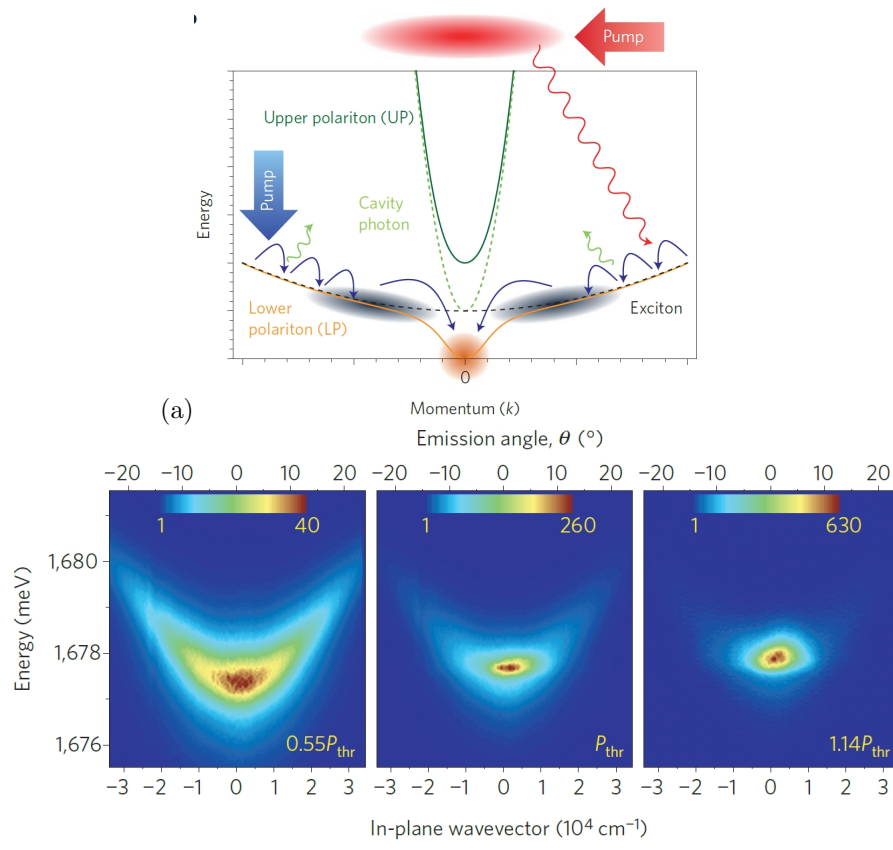


図 8.25 (a) マイクロ共振器励起子ポラリトンが BEC を生じる「冷却」過程を示す概念図。(b) 光学的に実測した分散関係空間内の E-P の分布。  $P_{th}$  は、BEC を起こすための密度を実現する励起パワー。 [9] より。

ている。

## 付録 7A : レーザダイオードと導波路

レーザーダイオード (laser diode, LD) の特に導波路構造について簡単に補足しておく。図のようなファブリ-ペロー型の LD を考え、導波路 (共鳴器) 長を  $L$  とする。共鳴条件は、 $m_j$  を整数、 $\bar{n}$  を屈折率、 $\lambda$  を真空中波長として

$$m_j \frac{\lambda}{\bar{n}} = 2L \quad (7A.1)$$

である。従って、共鳴条件を満たす波長間隔および周波数間隔は

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2L\bar{n}}, \quad \Delta\nu = \frac{c}{2L\bar{n}} \quad (7A.2)$$

である。通常  $\lambda \ll L$  であるから、キャリア注入が多い状態では発光波長領域がかなり広いことを考えると、通常  $L$  を精確に決める必要はなく、適当な波長を中心にマルチモードで発振する。

上では、光強度変化を単に  $I_0 \exp(-\alpha'z)$  と書いたが、 $\alpha'$  の内容を、光学利得  $g$  と物質固有の吸収係数  $\alpha$  を使って、 $I(z) = I_0 \exp((g - \alpha)z)$  と書く。2つの鏡の反射率をそれぞれ  $R_1$ 、 $R_2$  とすると、増幅が生じるための条件は

$$R_1 R_2 \exp[(g - \alpha)2L] > 1$$

である。これより、全体として増幅が生じる閾値光学利得  $g_{th}$  は

$$g_{th} = \alpha + \frac{1}{L} \ln \left( \frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (7A.3)$$

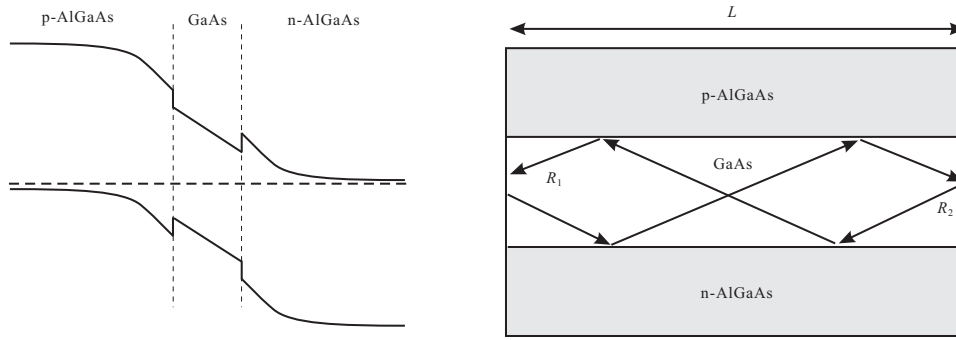


図 7A.1 左: 活性層にドーピング無しの GaAs, ドーピング層にそれよりもエネルギーギャップの大きな AlGaAs を使用した, LD 用 pn 接合の模式図. 右: 基板の端を劈開して半透過鏡にすることで GaAs 活性層を共鳴器構造とする.

である.

p, n 層は同じ物質 (屈折率  $\bar{n}_1$ ) とし, 活性 i 層の屈折率は  $\bar{n}_2$  で,  $\bar{n}_1$  よりも大きいとする.  $z$  軸を図のように取り,  $z$  軸方向へ伝播する電磁波を考える. モードとして TE (transverse electric), すなわち,  $z$  方向の電場がない ( $\mathcal{E}_z = 0$ ) とする. また,  $y$  方向へは一様とする. 以上の簡単化により, 電場は  $y$  方向のみ考えればよく,

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \mu_0 \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \mathcal{E}_y = 0. \quad (7A.4)$$

ここで, 透磁率は半導体中でも真空中とほとんど変化がないため,  $\mu_0$  とした.

導波路として考え,  $x$  方向には定在波,  $z$  方向には伝播する解を考えると, 活性層内 ( $|x| \leq d/2$ ) で,

$$\mathcal{E}_y(x, z, t) = A \cos(\kappa x) \exp[i(\omega t - \beta z)] \quad (7A.5)$$

が得られる. ただし,

$$\kappa^2 = \mu_0 \epsilon \epsilon_0 \omega^2 - \beta^2 = \bar{n}_2^2 k_0^2 - \beta^2, \quad k_0 = \frac{\omega}{c^* \bar{n}_2}. \quad (7A.6)$$

一方, 活性層外 ( $|x| > d/2$ ) では,  $|x| \rightarrow \infty$  に対して減衰する波になるはずであるから,  $x = \pm d/2$  での  $\mathcal{E}_y$  の値の接続を考えると,

$$\mathcal{E}_y(x, z, t) = A \cos\left(\frac{\kappa d}{2}\right) \exp\left[-\gamma\left(|x| - \frac{d}{2}\right)\right] \exp[i(\omega t - \beta z)] \quad (7A.7)$$

となる. (7A.4) を満たすため,

$$\gamma^2 = \beta^2 - \bar{n}_1^2 k_0^2 \quad (7A.8)$$

である. また, Maxwell 方程式より, 磁場の  $z$  方向成分が  $x = \pm d/2$  で連続となるためには

$$\tan\left(\frac{\kappa d}{2}\right) = \frac{\gamma}{\kappa} = \frac{\sqrt{\beta^2 - \bar{n}_1^2 k_0^2}}{\sqrt{\bar{n}_2^2 k_0^2 - \beta^2}}. \quad (7A.9)$$

以上より,  $\kappa, \gamma, \beta$  が決定される. 量子井戸の計算などと同様, 正接 (tangent) は  $\pi$  周期の関数であるから, 解は多数存在し, それぞれが, 離散モードを形成する.

## 付録 8A : ショット雑音

我々は情報を物理量の時間変化として表現し, 様々な輸送現象を用いて伝送する. 物理量は常に何らかのゆらぎを伴っており, 特に時間変化するものを雑音 (noise) と呼ぶ<sup>\*3</sup>. 雑音には, 信号伝送路に外部より混入する外部雑音と,

<sup>\*3</sup> ゆらぎとは, 複数回の同一測定に対して生じる測定値の分布の事であり, 測定対象のサンプリングのパラメーターは時間とは限らない. 同一方法で準備した複数の試料間の測定値の違いもゆらぎの一種である.

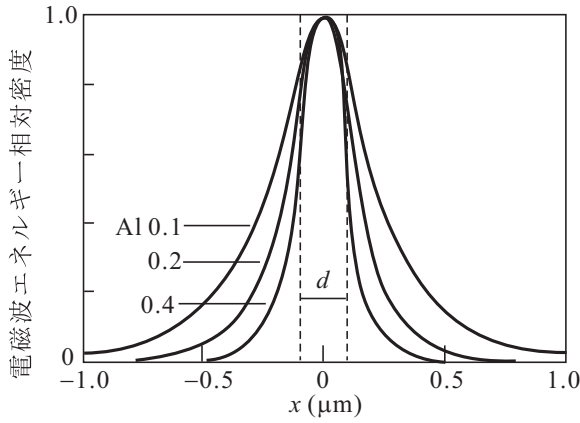


図 7A.2 p, n 層に (Al,Ga)As, 活性 i 層に GaAs を使用し,  $d$  として  $0.2\mu\text{m}$  を用いた場合の基本モードの電磁場エネルギー分布. Al 組成 0.1, 0.2, 0.4 の場合について描いている.

物理量自身に内在する内部雑音 (intrinsic noise) があり, 特に電子電流においては, 電子のランダムな熱運動に起因する熱雑音 (thermal noise) (Johnson-Nyquist 雑音) と電子の粒子性とその流れの乱雑性に起因するショット雑音とがその代表である.

時刻  $t_p$  に測定される 1 個の電子による電流  $J_p(t) = e\delta(t - t_p)$  を考えると,

$$J_p(t) = e \int_{-\infty}^{\infty} \exp[2\pi i f(t - t_p)] df = 2e \int_0^{\infty} \cos[2\pi f(t - t_p)] df \quad (8A.1)$$

となり, 周波数によらない一様な振幅  $2e$  を有している. ある周波数  $f$  の  $df$  幅につき, 時間 1 周期について平均  $\langle \dots \rangle$  を取ると, (8A.1) の被積分関数を  $j_p$  と書いて, 電流揺らぎは  $\delta J_p = \sqrt{\langle j_p^2 \rangle} df = \sqrt{2e} df$  である. 次に  $t_p, t_q$  の 2 個の電子電流  $J_{pq} = e[\delta(t - t_p) + \delta(t - t_q)]$  で考える. (8A.1) と同様に, Fourier 逆変換の形で  $J_{pq}$  を表したとすると, 2 つのデルタ関数を表すための 2 つの指数関数間に位相差  $\phi = f(t_q - t_p)$  があるから, 被積分関数の 2 乗を取る際に

$$j_{pq}^2 = j_p^2 + j_q^2 + 2j_p j_q \cos \phi \quad (8A.2)$$

と最後に干渉項が付く. しかし,  $t_q - t_p$  をランダム変数とした 2 電子電流を多数用意して平均 ( $\dots$  で表す) すれば干渉項は消え,  $\overline{j_{pq}^2} = 2(\sqrt{2e})^2$  となる. 多数のランダムな電子による電流は, この多数のサンプリングと等価であるから, 単位時間当たり平均  $N$  電子の電流とすれば, 平均電流  $J = eN$  であるから, 電気通信系の記法に習い, 帯域  $\Delta f$  に対する電流揺らぎは

$$\langle (\delta J)^2 \rangle / \Delta f (\equiv S_{\text{Poisson}}) = N \times 2e^2 = 2eJ \quad (8A.3)$$

となる. 電流揺らぎの 2 乗が電流平均値に比例するのは, ポアソン分布の分散が平均値 (単位時間当たり電子数  $N$ ) に等しくなることによる. 特にこの完全にランダムな場合をポアソン雑音と呼ぶ.

一方, 電子が等間隔で流れてきた場合には, 電流のゆらぎはない (サンプリングのタイミング等により, 電荷に直して  $e$  だけの変化はあるが, これもランダムな変化ではない). 実際, 間隔  $\tau$  のデルタ関数列を  $\delta_\tau(t)$  と書くと, 周期  $\tau$  の周期関数であることから, 区間  $[-\pi/\tau, \pi/\tau]$  のフーリエ級数展開ができる.

$$\delta_\tau(t) = \frac{1}{\tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-in \frac{2\pi}{\tau} t\right). \quad (8A.4)$$

したがって, そのフーリエ変換は

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{\delta_\tau(t)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in(2\pi/\tau)t} \right] e^{i\omega t} dt = \frac{1}{\tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i\left(\omega - n \frac{2\pi}{\tau}\right)t\right] dt \\ &= \frac{2\pi}{\tau} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\omega - n \frac{2\pi}{\tau}\right) = \frac{2\pi}{\tau} \delta_{2\pi/\tau}(\omega) \end{aligned} \quad (8A.5)$$

となって,  $\omega$  空間でもデルタ関数列になり, ランダムな変化の条件である連続スペクトルが現れない. すなわち, ショット雑音が消失していることがわかる.

## 付録 8B : ボース・アインシュタイン凝縮

Bose-Einstein Condensation (BEC) \*4: 自由度間の相互作用によらない相転移 (量子統計力学的相転移) と呼ばれている。

相互作用による相転移は直感的にわかり易い面があるが、相転移は必ずしも相互作用を要するものではなく、様々な要因のせめぎ合いによって「相」の変化が起こることがある。その代表が BEC である。

ボース系の場合、粒子間の力に相当する相互作用は存在しないにもかかわらず、その統計的な性質から同じ状態にできるだけ多数の同種粒子が入ろう、とする傾向が生じる。2 粒子の場合について考えてみよう。2 粒子系の場合波動方程式の解を  $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  とすると、系の波動関数  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  は

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)] \quad (8B.1)$$

と対称化される。したがって、 $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  が得られる確率は

$$|\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 = \frac{1}{2} [|\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 + |\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)|^2 + \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)^* \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) + \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)^*] \quad (8B.2)$$

となって、 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$  という条件に対して、後半の 2 つの干渉項が強調する効果を持つことがわかる。低温で  $\lambda \sim l$  となったとき、結局この傾向を満足するためには  $k = 0$  の状態に粒子が入り込む必要があることから BEC が発生する。

$$E_k = \frac{p^2}{2M} = k_B T : \text{Bose 統計}$$

$$\begin{aligned} \Delta p &\sim \sqrt{M k_B T} \\ \therefore \lambda &= \frac{h}{\Delta p} \sim \frac{h}{\sqrt{M k_B T}} \end{aligned} \quad (8B.3)$$

すなわち、温度が下がると系を代表するドブロイ (de Brogli) 波長は  $\sqrt{T}$  に反比例して長くなる。波動関数の空間的なオーバーラップが大きくなると、同種粒子はお互いに区別がつかなくなり、全系の波動関数は粒子の交換に対して対称 (Boson) になろうとする。結果、ある温度を境として、位相空間  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  内での凝縮が起こる。これが BEC である。

### 8B.1 理想気体のボース・アインシュタイン凝縮

spin 0 の理想 Bose 気体を考える。Bose 分布

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} - 1} \quad (\beta \equiv (k_B T)^{-1}) \quad (8B.4)$$

で、 $\mu = 0$  を次のように定義しよう。 $T = 0$  では (8B.4) より基底状態にすべての粒子が落ち込む。そこで、

$$\mu(T = 0) = 0 \quad (8B.5)$$

とする。有限温度では、系の粒子数を  $N$  とすると、

$$N = \sum_i f(\epsilon_i)$$

であるから、

$$N \rightarrow \int f(\epsilon) \mathcal{D}(\epsilon) d\epsilon \quad (?)$$

\*4 BEC という略記は、Bose-Einstein Condensation と Bose-Einstein Condensate (ボース・アインシュタイン凝縮体) の両方に使われる。紛らわしいようだが、使ってみるとそれ程混乱することはない。

としたいところである。この時、基底状態の粒子数  $N_0$  は

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\mu\beta} - 1} \sim \frac{1}{-\mu\beta} = -\frac{k_B T}{\mu} \rightarrow \mu \sim -\frac{k_B T}{N_0} \quad (8B.6)$$

となるはずである。この線に沿って計算すると、3次元理想気体では、

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{より} \quad \mathcal{D}(\epsilon) = \frac{m^{3/2} V}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sqrt{\epsilon} \quad (8B.7)$$

であるから、

$$N = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} - 1} d\epsilon = \frac{(m k_B T)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} V \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^{x-\alpha} - 1} dx \quad (8B.8)$$

である。ただし、 $x \equiv \epsilon\beta$ 、 $\alpha \equiv \mu\beta$ とした。ここで、定積分の部分を  $I(\alpha)$  と書くことにすると、 $I$  は

$$I(0) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \sim 2.6 \quad (8B.9)$$

で、 $\alpha < 0$  に対して、 $\alpha$  の絶対値が大きくなると減少する関数である。したがって、 $T \rightarrow 0$  で (8B.8) の  $N$  のとり得る最大値はどんどん小さくなってしまい、数え落としているものがあるのは明らかである。もちろん、これが基底状態に落ち込むマクロな粒子数である。

(8B.8) から

$$I(\alpha) = \frac{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}}{(m k_B T)^{3/2}} \frac{N}{V}$$

であるから、これが、(8B.9) を超える低温で異常（基底状態の粒子数増加）が起こる。この臨界温度  $T_c$  は

$$T < T_c \equiv \frac{2\pi \hbar^2}{m k_B} \left[ \frac{N}{\zeta(3/2)V} \right]^{2/3} \quad (8B.10)$$

と見積もられる。

ここで、 $l \equiv (V/N)^{1/3}$  は粒子間の平均距離であるから、(8B.10) は数係数を無視すると、

$$l = \frac{h}{\zeta(3/2)\sqrt{2\pi m k_B T_c}} \sim \lambda(T = T_c) \quad (8B.11)$$

である。すなわち、Bose-Einstein 凝縮は、平均の de Broglie 波長が粒子の平均間隔程度になった時に起こることがわかる。

$T_c$  以下では、基底状態の粒子数  $N_0$  を入れて

$$N = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{(\epsilon-\mu)\beta} - 1} d\epsilon + N_0 \quad (8B.12)$$

とする。(8B.6) より、 $T < T_c$  では  $N_0$  がマクロな数となるため  $\mu = 0$  である。したがって、

$$N_0 = N - \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\epsilon\beta} - 1} d\epsilon = N \left[ 1 - \frac{V}{N} \frac{(m k_B T)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} I(0) \right] = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \quad (8B.13)$$

ちょうど、強磁性転移で転移点以下で自発磁化が急速に有限の値を獲得するのと同じである。

$T < T_c$  で系の全エネルギーを計算する。

$$E = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon \quad (8B.14)$$

$$\text{ここで } T < T_c \text{ では } \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \text{ より}$$

$$E = \frac{3}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} V (k_B T)^{5/2} \quad (8B.15)$$

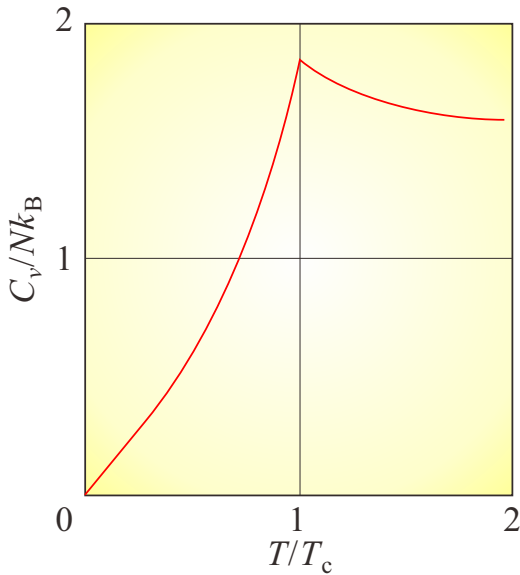


図 8B.1 理想ボース気体の定積比熱の温度依存性.  $T_c$  はボース・アインシュタイン凝縮の転移温度.

これより, 定積熱容量は

$$C_v = \frac{15}{4} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} V k_B^{5/2} T^{3/2} \quad (8B.16)$$

となる.

$C_v$  は  $T_c$  でカuspを示し, これが相転移であることを示している.

## 8B.2 ボース誘導

すでに, 8.6.1 節で 2 粒子について述べたことと本質的に同じであるが, BEC やレーザー発振などで, あたかも「駆動力」のような役割を果たしているボース誘導 (bosonic stimulation) について,  $N$  粒子について見ておこう. ボース粒子系で, 1 粒子状態  $\varphi_{\text{ini}}$  にある粒子が摂動を受けて別の 1 粒子状態  $\varphi_{\text{fin}}$  に遷移する過程を考える.  $\varphi_{\text{fin}}$  がすでに  $N$  個の粒子で占有されている場合, 遷移確率は  $\varphi_{\text{fin}}$  がまったく空の場合に比べてどうなるか, が問題である. 始状態を

$$\psi_+^{(i)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{(N+1)N! \prod_l n_l!}} \prod_{m=1}^N \hat{R}_{m,N+1} \det^{(+)}\{\varphi_i(\mathbf{r}_j)\} \varphi_{\text{ini}}(\mathbf{r}_{N+1}) \quad (8B.17)$$

と表す.  $\det^{(+)}$  は, 行列式の各項の符号をすべて + にしたもので, パーマネントと呼ばれる. 終状態  $\psi_+^{(f)}$  は  $\varphi_{\text{ini}}$  を  $\varphi_{\text{fin}}$  と交換することで得られる. 摂動ハミルトニアン  $\hat{H}_1$  の行列要素を  $\langle \varphi_{\text{fin}} | \hat{H}_1 | \varphi_{\text{ini}} \rangle = a$  とする.

$\varphi_i$  ( $i \leq N$ ) が  $\varphi_{\text{fin}}$  と直交しているとする,  $\langle \psi_+^{(f)} | \hat{H}_1 | \psi_+^{(i)} \rangle$  の中で, ゼロでない,  $a$  を与える項は  $(N+1)N! \prod_l n_l!$  個である. これは, 規格化定数分母の 2 乗と同じで, 結局  $\langle \psi_+^{(f)} | \hat{H}_1 | \psi_+^{(i)} \rangle = a$  となる.

一方,  $\varphi_i$  ( $i \leq N$ ) がすべて  $\varphi_{\text{fin}}$  であるとする, と,

$$\psi_+^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{(N+1)}} \prod_{m=1}^N \hat{R}_{m,N+1} \varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_1) \cdots \varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_N) \varphi_{\text{ini}}(\mathbf{r}_{N+1}) \quad (8B.18)$$

と書ける.  $\det^{(+)}$  の  $N!$  個の項がすべて  $\varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_1) \cdots \varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_N)$  となり, 規格化定数分母の  $N!$  と割り切れている. これに対して終状態は

$$\psi_+^{(f)} = \varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_1) \cdots \varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_N) \varphi_{\text{fin}}(\mathbf{r}_{N+1}) \quad (8B.19)$$

であるから,  $\langle \varphi_{\text{fin}} | \hat{H}_1 | \varphi_{\text{ini}} \rangle = a\sqrt{N+1}$  となり, フェルミの黄金則より, 遷移確率は  $N+1$  倍であることが示された.

## 参考文献

---

- [1] S. Datta, “Electron Transport in Mesoscopic Systems” (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [2] 勝本信吾 「メゾスコピック系」 (朝倉書店, 2002)
- [3] Y. Gefen, Y. Imry, and M. Ya. Azbel, Phys. Rev. Lett. **52**, 129 (1984).
- [4] A. Yacoby, R. Schuster, and M. Heiblum, Phys. Rev. B **53**, 9583 (1996).
- [5] A. Aharony, O. Entin-Wohlman, T. Otsuka, H. Aikawa, S. Katsumoto and K. Kobayashi, Phys. Rev. B **73**, 195329 (2006).
- [6] M. Hashisaka, Y. Yamauchi, S. Nakamura, S. Kasai, K. Kobayashi, and T. Ono, J. Phys.: Conf. Ser. **109**, 012013 (2008).
- [7] K. Ogawa, T. Katsuyama and H. Nakamura, Phys. Rev. Lett. **64**, 796 (1990).
- [8] 山本喜久, 宇都宮聖子, 日本物理学会誌 **67**, 96 (2012).
- [9] T. Byrnes, N.-Y. Kim, and Y. Yamamoto, Nat. Phys. **10**, 803 (2014).
- [10] H. Deng, H. Haug, and Y. Yamamoto, Rev. Mod. Phys. **82**, 1489 (2010).
- [11] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [12] P. Minnhagen, Rev. Mos. Phys. **59**, 1001 (1987).

## 8.7 単電子効果と量子閉じ込め

本章の最後に、量子ドットを介して生じる単電子効果、0次元系への量子閉じ込め効果について調べよう。

### 8.7.1 単電子効果

量子ドットの伝導を考える際に、まず重要になるのが単電子効果である。これは、電磁氣的に孤立した系に電荷(電子)を付け加えることで有限の静電エネルギーが変化し、これによるエネルギー増加が温度揺らぎよりも大きい場合に電子の移動過程が禁止されるクーロンブロッケード (Coulomb blockade) 効果を指す。ドットの静電エネルギーを、キャパシタ  $C$  で代表すると、電子1個の帯電エネルギーは  $E_c = e^2/2C$  で、 $C$  が小さければ大きな値を取り得る。前節で見たような現実の量子ドットでも、トンネル接合の障壁内は電子の波動関数振幅が極めて小さく、第1近似としては電子は電極内にいるか、ドット内にいるかの2種類と考えて良い。すなわち、量子ドットの電子数は整数値(離散的な値)を取り、キャパシタ近似は現実的と考えられる。従って、量子ドットを通した電気伝導の最も簡単な過程として、ドットの電子数を1増加させて減少させるもの、逆に1減少させてから増加させるものの2つが考えられる。

最も簡単な一定相互作用モデルを採ろう。ドット内のどの電子を対として取っても同じ定数のクーロン相互作用を行うとし、これを  $U$  とすると、 $N$  個の電子を含むドットのクーロン相互作用は

$$E_{cN} = {}_N C_2 U = \frac{N(N-1)U}{2} = \frac{U(N-1/2)^2}{2} - \frac{U}{8} \quad (8.59)$$

となる。 $N \rightarrow N+1$  の変化に伴うクーロンエネルギー変化は

$$\Delta E_+(N) = (N-1)U \quad (8.60)$$

となる。他のエネルギーをすべて無視すると、 $\Delta E_+(N)$  は  $N$  番目の電子の電気化学ポテンシャルであり、(8.60)より、これは  $N$  に対して等間隔に並んでいる。

### 8.7.2 クーロン振動、クーロンダイヤモンド

$N$  個の電子に対する量子ドットの電気化学ポテンシャルを  $\mu_N$  とすると、電極と平衡な状態の電子数を  $N_0$  とし、 $\mu_{N_0} < E_F < \mu_{N_0+1}$  である。 $\mu_{N_0}$  が  $E_F$  と一致する時、電子は電極からドットにトンネルで入り込み、また抜け出ることができるので、量子ドットを通した、ソース・ドレイン電圧 ( $V_{sd}$  がゼロ付近の電気伝導度 ( $G(0)$ ) は有限値を取る。それ以外の場合、ポテンシャル  $E_F$  の電子がドットにトンネルする、あるいはドット内の、ポテンシャル  $\mu_{N_0}$  の電子が電極にトンネルする過程にはいずれも余分な有限のエネルギーが必要となり、先に述べたクーロンブロッケード効果によってトンネルが禁止される。図 8.26(a), (b) より、 $G(0)$  が有限となる条件は  $V_g$  に対して等間隔で現れるから、 $G(0)$  を測定しながら  $V_g$  を掃引すると、図 8.26(c) のように  $G(0)$  のピークが等間隔に現れる。これをクーロン振動と呼ぶ。

一定相互作用モデルと同じことを図 8.27(a) のような簡単な回路モデルでやってみる。電子の電荷を  $-e$  とする。

$$Q_1 + Q_2 = -eN, \quad Q_1 = CV_d, \quad Q_2 = C_g(V_d - V_g) \quad (8.61)$$



で、静電エネルギーは、

$$E = \frac{1}{2}CV_d^2 + \frac{1}{2}C_g(V_d - V_g)^2 \quad (8.62)$$

であるが、この内、第2項は、ゲート電極につないだ電源が、電圧0から $V_g$ へ変化するまでに行った仕事を積分したものである。熱力学的にこのようなプロセスの進行・停止を考える際にはこのように外部から自動的に与えられるエネルギーを差し引いた残りであるエンタルピー (enthalpy)  $H = U - PV$  を考える。 $PV$  に対して第2項がこのように外部からのエネルギーに相当し、(8.61), (8.62) より

$$H(N, V_g) = \frac{(Ne - C_g V_g)^2}{2(C + C_g)} \quad (8.63)$$

となる。すなわち、図 8.27(b) のように、 $N$  に応じてパラボラが並んでおり、その交点でクーロンピークが生じる。

次にゲート電圧をある位置に固定し、またドレイン電圧をゼロ電位に固定し、ソース電圧を掃引したとする。このような実験について、もっとも簡単なモデルを図 8.28 に示した。クーロンピークが生じる位置では、ソース・ドレインのフェルミ準位  $E_F$  とドットの最上位化学ポテンシャル位置が一致しており、(a) と (c) ではドットの電子数が1だけ違っている。(b) の位置で  $V_g$  を止めると、 $E_F$  位置にドットの化学ポテンシャルがないため、電流はブロックされる。ソース電圧を上げ、従ってソースの  $E_F$  を下げると、(d) の点で一旦外れた (a) で伝導に使っていた化学ポテンシャル位置がソース・ドレインの  $E_F$  の間に入ってくるので、伝導が現れる。下げると、同様に (e) の点で (c) で伝導に使っていた化学ポテンシャル位置がソース・ドレイン間に入って伝導が現れる。結局黄色い平行四辺形の内部でクーロンブロックが生じ、外部では伝導が生じることになる。この平行四辺形をクーロンダイヤモンド

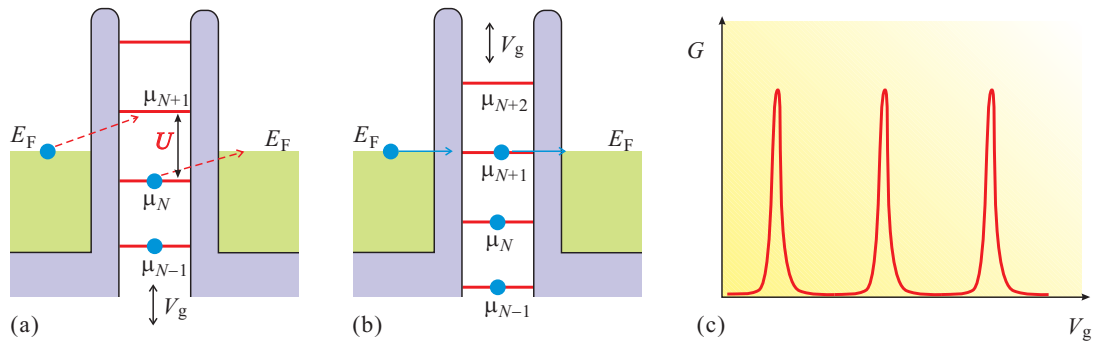


図 8.26 (a) 一定相互作用モデルを使って電気伝導を考える際の簡単な模式図。ドットの化学ポテンシャルは相互作用の大きさ  $U$  で等間隔に並ぶ。ソース・ドレインのフェルミ準位  $E_F$  とこの等間隔ポテンシャルが一致していない時は、電子のトンネルに伴って有限なエネルギーが必要となり、トンネルは禁止される (クーロンブロック)。 (b) ゲート電圧  $V_g$  によって離散的化学ポテンシャルがシフトし、そのどれかと  $E_F$  が一致するとトンネル、従って電気伝導が可能になる。 (c) (a), (b) の過程が繰り返される結果、 $V_g$  に対して量子ドット伝導度  $G$  は等間隔の鋭いピークの連なりとなる (クーロン振動)。

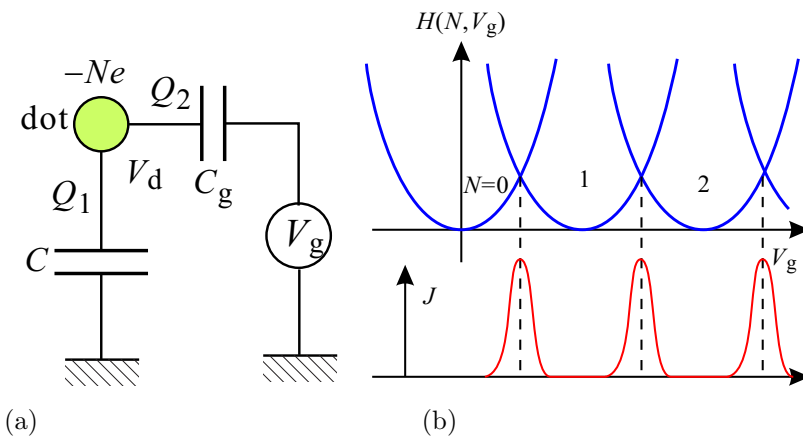


図 8.27 (a) 量子ドットを (自己) キャパシタンス  $C$  と、ゲートキャパシタンス  $C_g$  で表した、簡単な帯電効果のモデル。 (b) このモデルでの  $V_g$  に対するエンタルピー  $H(N, V_g)$  の様子。

(Coulomb diamond) と呼んでいる\*1.

図 8.29 にクーロンドiamondの実測例をカラープロットで示した. Diamondの大きさが不揃いなのは, 主に次に述べる量子閉じ込めによる軌道エネルギー離散化の効果である. また,  $V_g$  に対して大きさが単調に変化しているが, これは回路的には主に  $V_g$  によりドットの大きさが変化しており, 有効な静電容量が単調に変化することによるものである. いずれも「主に」と断ったように, この他にも様々な効果がDiamondの大きさを決める. 逆にDiamondの大きさその他細かな測定結果から量子ドットの様々な物理的性質を調べることができる [2].

Diamondの外側に, 筋状の構造が見えているのは, ドット内の量子閉じ込め準位離散化(次節)によるものである. また, この構造のオーバーラップによってはっきりしなくなっているが, 可能な化学ポテンシャル準位の増加によっても外側にもタイル状にDiamondが現れ, これはクーロン階段 (Coulomb staircase) 構造と呼ばれている. 実験で見えているDiamondは, 図 8.28 と違って, 縦の境界が垂直ではなく傾いている. これは, ソースに加えた電圧が, ソースとドットとの間のキャパシタンスを通じてドットの電位にも影響を与えているためである.

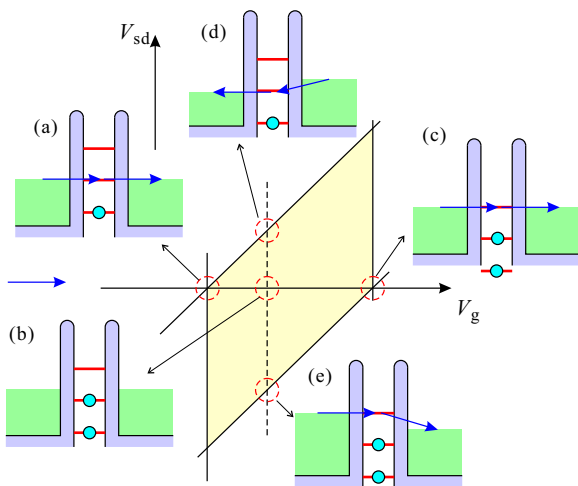


図 8.28 クーロンドiamondの簡単な説明. ソースのみにバイアス電圧を加えた場合. 黄色く着色した部分がクーロンドiamond (クーロンブロックされた領域). (a), (c) ゼロバイアスで, ゲート電圧によりドットの化学ポテンシャルを調整することで, 伝導が生じる. (b) では, 上記の共鳴条件からずれているため, クーロンブロックにより伝導は生じない. しかし, ソースにバイアスを加えると, (d) では (a) と同じ化学ポテンシャル位置を使って, (e) では (c) と同じ位置を使って伝導が生じる. 結局黄色く着色した部分で伝導が禁止される.

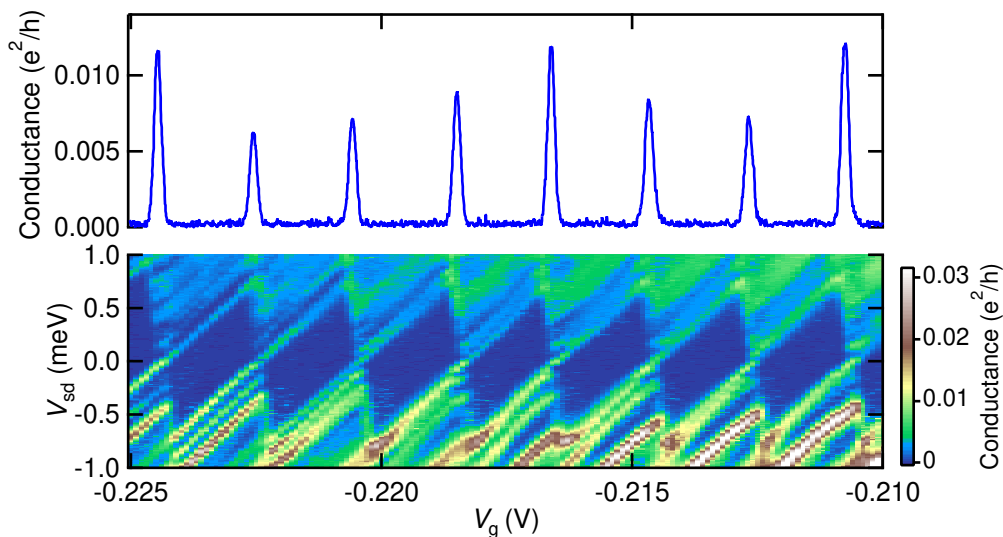


図 8.29 ヘテロ接合から作製した量子ドット伝導に現れたクーロンドiamond構造. 横軸はゲート電圧 ( $V_g$ ). 上図は零バイアス伝導度でクーロン振動が現れている. 下図は  $V_g$ - $V_{sd}$  平面に伝導度をカラープロットしたもので, Diamond構造が生じている. Diamondの外側に見える筋状の構造は, 励起状態を通じた伝導によって生じている.

\*1 平行四辺形 (parallelogram) なのに菱形 (diamond) とは変だ, と思われたであろうが, 対称な電源配置で対称形の場合には菱形になることから来ている.

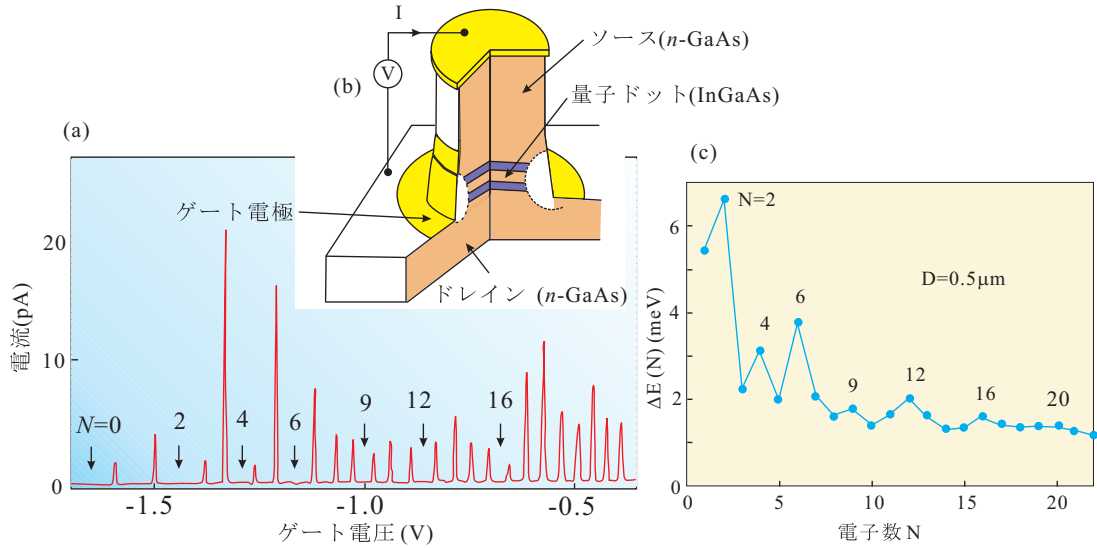


図 8.30 縦型量子ドット (構造模式図は (a) の挿入図) のクーロン振動. (a) ゲート電圧に対してドットの電流をプロットしたもので,  $N = 0$  と記された所より負電圧側ではクーロンピークは生じない. (b) 電子数に対してクーロンピーク間隔をプロットした. データは, 文献 [?] より.

### 8.7.3 量子閉じ込め

次に, 閉じ込めによる軌道エネルギーの離散化が無視できない場合を考えよう. 軌道エネルギー最低準位から数えて  $i$  番目の 1 電子準位 (縮退準位はそれぞれすべて縮重分の数の準位として数える) エネルギーを  $\epsilon_i$  とする.  $N$  に関係のない項を無視すると, エンタルピー  $H$  は,

$$H(N) = \frac{(Ne - C_g V_g)^2}{2C_s} + \epsilon_N \quad (8.64)$$

であり, パラボラの交差点は

$$\begin{aligned} \Delta H(N, N+1) &= H(N+1) - H(N) = \frac{e}{C_s} \left\{ \left( N + \frac{1}{2} \right) e - C_g V_g \right\} + \Delta \epsilon_N \quad \Delta \epsilon_N \equiv \epsilon_{N+1} - \epsilon_N \\ V_{gX}(N, N+1) &= \frac{1}{C_g} \left\{ \left( N + \frac{1}{2} \right) e + \frac{C_s}{e} \Delta \epsilon_N \right\}. \end{aligned} \quad (8.65)$$

であるから, 式 (8.65) と比べ, クーロン・ピーク位置が  $\Delta \epsilon_N$  に比例してシフトする. これにより量子ドット中のエネルギー準位分光を行うことができる. これを 付加エネルギー分光 (addition energy spectroscopy) と呼ぶ. 縮退があるとき  $\Delta \epsilon_N = 0$  であり, スピン (Kramers) 縮退位置がわかれば, これを元に定量的な分光ができる.

2次元の調和振動子閉じ込めポテンシャルを実現した有名な例を示そう. この実験では, 2次元的な量子井戸を障壁層で挟み, 上下の金属的にドーピングした層をソース・ドレイン電極としている. 上下方向は強く閉じ込められており, この方向の励起状態は考えなくて良い. 図 8.30(a) がクーロン振動で, と記されたピークを最後にそれより負側の  $V_g$  ではピークが現れない. これは量子ドット中に電子がいなくなったことを示す. この領域を電子数ゼロとして, ピークごとに電子数が 1 増えることからドット内電子数を正確に決めることができる.

2次元調和振動子を復習しておく, 2次元面が  $xy$  平面となるように座標軸を取り, 面内の閉じ込めポテンシャル  $V(x, y)$  と離散エネルギー固有値は,  $\omega_0$  を閉じ込め強さを表すパラメータとして

$$V(x, y) = \frac{m\omega_0^2}{2}(x^2 + y^2), \quad E_{n_h} = \hbar\omega(n_h + 1) \quad (n_h = 0, 1, 2, \dots) \quad (8.66)$$

と等間隔準位が得られる. 等方的ポテンシャルの束縛固有状態は, 角運動量量子数  $l$  と動径方向運動の量子数  $n_r$  で指数付けすることができ, 上の場合,  $n_h = 2n_r + |l|$  である.  $n_h$  に対して  $(n_r, l)$  の可能な組み合わせは  $n_h + 1$  だけあるので,  $E_{n_h}$  はスピンを考えると  $2(n_h + 1)$  重に縮退している.

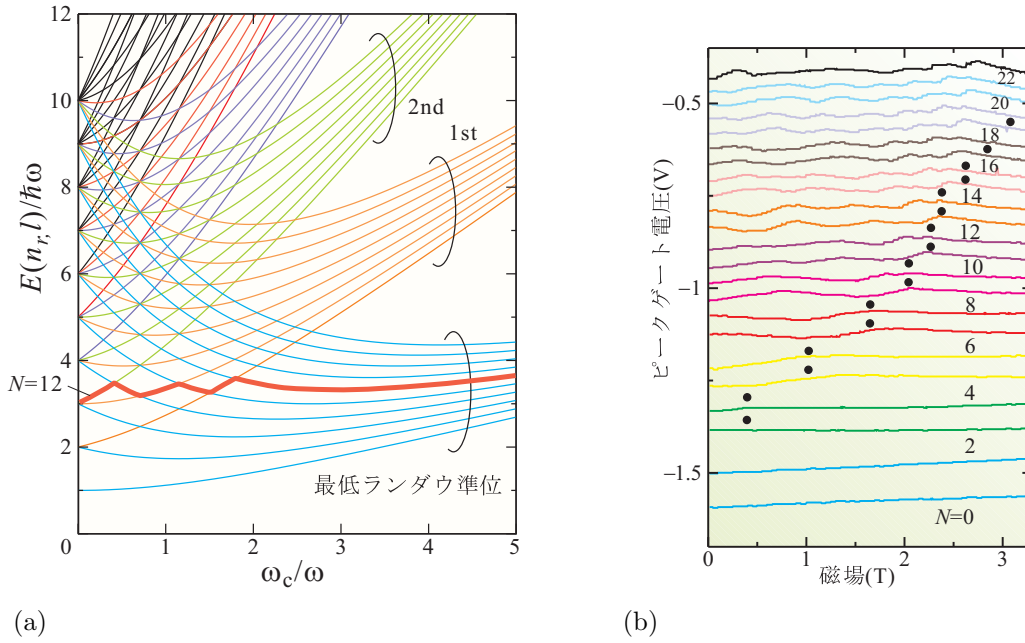


図 8.31 (a) フォック-ダーウィン状態エネルギーを、零磁場で 10 番目の状態までについて磁場の関数として描いたもの。高磁場でランダウ準位へと収束する。収束先の準位によって色分けされている。赤く太い線は、電子数  $N = 12$  の基底状態が取るエネルギーをトレースしたもの。(b) 図 8.30 の量子ドットに垂直磁場を加えてクーロンピーク位置の動きを調べた結果。黒丸で示したのは、ジグザグ振動の最後のピーク位置を表す式 (8.69) を使い、 $N = 3 \sim 6$  のピーク位置に合うように  $\omega$  を決めて計算した位置。

図 8.30(a) の最も簡単な解析としてピーク間隔を電子数  $N$  に対して図 8.30(b) にプロットした。 $N = 2, 6, 12$  の所に明瞭なピークが現れている。これは、 $\sum_{j=0}^{n_h} 2(n_h + 1) = (n_h + 1)(n_h + 2)$  の電子数で殻構造を取ることを反映している。ピークが周囲よりも高くなっている分が、 $n_h$  が 1 つ変化する際の軌道エネルギーの変化分  $\hbar\omega_0$  に相当し、皆同じ高さになるはずだが、実際には主に一定相互作用モデルの誤差を反映して  $N$  と共に小さくなっている。更にこれらのやや高いピークの丁度中間  $N = (n_h + 2)^2$  (4.9) にも小さいながらピーク構造が見られる。これは、縮退準位がある時に、相関によって同じ向きのスピンを持った電子がそれぞれの準位を 1 個ずつ占めていく方がエネルギーが下がる、というフントの規則が現れたものである。このように、ポテンシャルや電子数の情報を押さえた上で実験を行えることから、量子ドットを人工原子と呼ぶこともある。

この系に 2 次元面に垂直な磁場を加えてみる。ゼーマン効果はしばらくは無視しよう。磁場の軌道に対する効果は角運動量  $l$  と磁場の内積と、サイクロトロン運動による 2 次元調和振動子閉じ込めとして現れ、後者により有効閉じ込めポテンシャルは

$$V_{\text{eff}}(x, y) = \frac{m\Omega^2}{2}(x^2 + y^2), \quad \Omega \equiv \sqrt{\omega_0^2 + (\omega_c/2)^2} \quad (8.67)$$

と変化する。 $\omega_c$  はサイクロトロン角振動数で、磁束密度  $B$  に対して  $\omega_c = eB/m$  である。 $(n_r, l)$  に対応する固有エネルギーは、

$$E(n_r, l) = \hbar\Omega(2n_r + |l| + 1) + \hbar\omega_0 l/2 \quad (8.68)$$

となるので、一般の磁場では軌道縮退は解けて、角運動量によって準位が分裂する。(8.68) に属する状態をフォック-ダーウィン状態と呼ぶ。(8.68) は磁場に対して図 8.31(a) のように変化し、 $B \rightarrow \infty$  で  $n_L \equiv n_r + (|l| + l)/2$  と置くと、 $E(n_r, l) = \hbar\omega_c(n_L + 1/2)$  と、ランダウ量子化準位に収束する。

図 8.31(a) のように準位位置は磁場で上下し、沢山の準位交差が生じる。電子数が定まっている場合、エネルギーの低い準位から順に電子を詰めていったものが基底状態となるから、軌道エネルギーは磁場に対して交差点で折れ曲がり、ジグザグ状に変化する。図 8.31(a) に  $N = 12$  の場合について太い線で示した。このジグザグ運動は、電子がすべて最低ランダウ準位へと収束する準位に収納されたところで終わる。言い換えると最後の交差点は強磁場極限で

最低ランダウ準位に  $N$  個まで電子を詰めた準位を表す線と,  $(n_r, l) = (0, 1)$  の線との交点である. 前者は (ゼーマン分裂を無視しているので) スピン縮退により,  $(n_r, l) = (0, -\text{int}(N/2))$  ( $\text{int}(x)$  は  $x$  以下の最大整数) である. この条件は

$$2\hbar\Omega + \hbar\omega_c/2 = \hbar\Omega(\text{int}(N/2) + 1) - \hbar\omega_c\text{int}(N/2)/2$$

$$\therefore \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2 = \text{int}(N/2) - 2 + \frac{1}{\text{int}(N/2)} \quad (8.69)$$

で与えられる.  $N$  が大きくなると上式の最終項は無視できるから,  $N$  に対してクーロンピークがほぼ等間隔に並んでいるとすると, ジグザグ運動の終端点は磁場に対して放物線的に動くように見えるはずであり, 図 8.31(b) には実際にそのような様子が見られる.  $N = 3 \sim 6$  のピークに合うように  $\omega$  を決めて, その他の  $N$  に対して予想される終端位置に黒丸を打って見ると, 図のように,  $N = 14$  付近まではかなり良い一致をしていることがわかる.

## 8.8 量子ドットと量子回路

次に, 量子ドットを量子細線で結合した量子回路について見ていこう. この時, 量子ドットが伝導度に及ぼす影響は, 透過確率と位相シフトを通してであり, これは共鳴散乱の特性である. そして, 単電子効果は共鳴散乱の化学ポテンシャル位置に対して影響を及ぼしている. そこで, 単電子効果はいったん無視をし, 量子ドットを純粋に共鳴器として扱うことがもっとも簡単な近似である.

### 8.8.1 量子ドットと散乱実験

メゾスコピック系の電気伝導実験は, 固体中の散乱実験の一種と見ることができる, と述べた. このことが如実に現れるのが量子ドット量子回路においてである. 例えば, 電子線を原子に散乱させる実験を行うと, 入射波の連続的な状態と, 原子の離散的準位軌道との間でファノ効果 (Fano effect) が生じるが, 同じ効果を量子ドット量子回路でも調べることができる.

ファノ効果は, 入射波と散乱波が干渉して全体の波の透過率が決まる一方, 散乱波は離散的準位軌道による共鳴散乱によって位相シフトが急激に  $\pi$  だけ変化することから, 透過スペクトルに特徴的な反共鳴を含む歪みが生じる効果を言う. より具体的には, 透過率のエネルギー依存性は,

$$T(\tilde{\epsilon}) \propto \frac{(\tilde{\epsilon} + q)^2}{\tilde{\epsilon}^2 + 1}, \quad \tilde{\epsilon} \equiv \frac{E - E_0}{\Gamma} \quad (8.70)$$

で良く近似される.  $q$  はファノ・パラメタと呼ばれ,  $q$  の絶対値が大きいほど線形の非対称性が大きく,  $q$  の符号によって歪む「向き」が変わる.  $q = 0$  では対称なディップ形状となる.

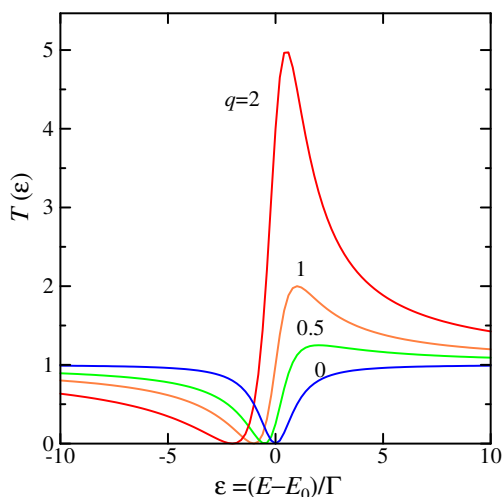


図 8.32 ファノ共鳴に現れる共鳴線形

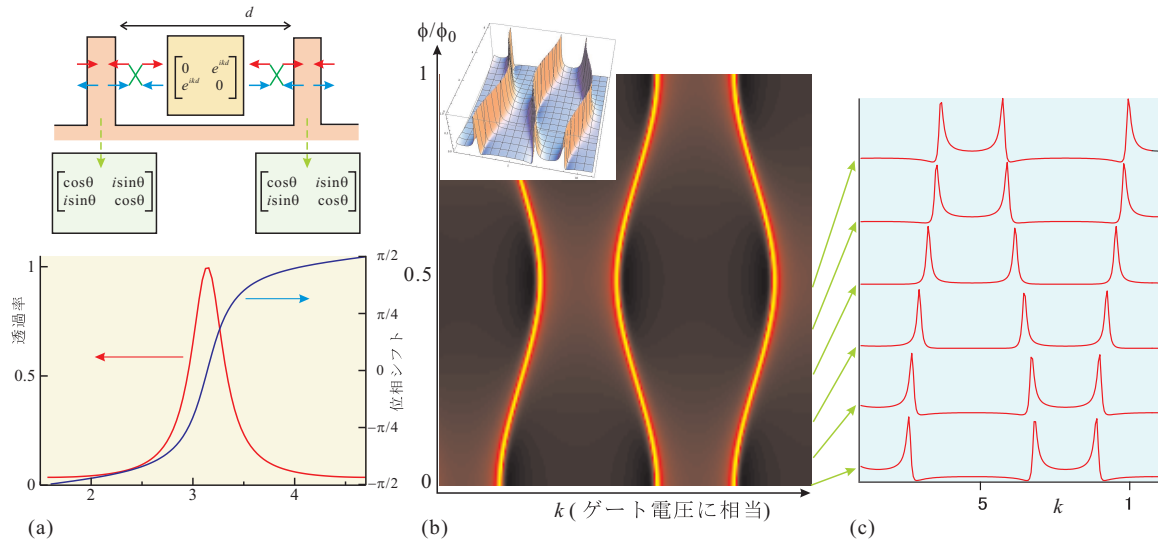


図 8.33 (a) 上：2重障壁モデル。下：量子ドット透過率(赤線)と位相シフト(青線)。\$k\$ は、ゲート電圧に相当。障壁の反射率は 0.7。 (b) 右上挿入図の AB リング + 量子ドット系の伝導度を \$k\$ (ゲート電圧相当) とリングを貫く磁束 \$\phi\$ に対してカラープロットしたもの。黒→赤→黄の順に伝導度が高くなる。図 8.33(a) の AB リングモデルの \$\mathbf{S}\_w\$ を (a) で得られた S 行列に置換し、\$\mathbf{S}\_{AB}\$ に有限反射率を導入したモデルで計算した。ドットの反射率は、0.7、反対側の「参照腕」の反射率は 0.82 に設定した。 (c) (b) の透過率を \$\phi/\phi\_0 = 0, 0.01, 0.19, 0.29, 0.38, 0.48\$ について、それぞれ \$k\$ の関数として下から順にプロットした。

ここでは、ファノ効果透過形状の導出などは行わない [2]。が、等価なことを量子ドット系でモデル化し、数値計算に乗せる手立てを考えよう。「連続状態」として量子細線の 1 次元バンド、「離散状態」として量子ドット中の量子閉じ込みによる離散準位を対応させる。入射波と散乱波とを干渉させなければならないので、入射波を二手に分けて一方を量子ドットを通し、他方をそのまま透過させて量子ドット経由後に干渉させる構造とする。このために、AB リングの片方に量子ドットを経由する経路を採用する。量子ドットは共鳴器として扱い、1 次元の 2 重障壁とする。これはすでに T 行列を用いて扱ったが、ここでは、S 行列を用いて図 8.33 のようなモデルを考えよう。すなわち、障壁およびドット内部の S 行列として

$$S_b = \begin{pmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad S_d = \begin{pmatrix} 0 & e^{ikd} \\ e^{ikd} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.71)$$

を採用する。\$k\$ は波数、従って運動エネルギーを代表しているの、ゲート電圧に相当すると考えてよい。このモデルについて、T 行列での計算と同じであるが、合成 S 行列を計算して \$k\$ に対する透過率と位相シフトを数値計算すると、図 8.33(a) のようになり、共鳴伝導ピークのところで位相が \$\pi\$ だけ回っていることがわかる。これは、共鳴現象には共通の変化である。共鳴とは複素平面上で \$\text{Re}(z) < 0\$ に極があるような応答を表し、実軸上からこの極を望む角は、\$-\pi/2\$ から \$\pi/2\$ と変化することから \$\pi\$ シフトが直感的に理解される。

次に、AB リング部分を S 行列で表す。三叉路部分の S 行列を対称に取り、

$$S_t = \begin{pmatrix} 0 & -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \\ -1/\sqrt{2} & -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (8.72)$$

とする。AB 位相については、片側の経路に

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_{AB}} \\ e^{-i\theta_{AB}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \theta \equiv 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} = \frac{e}{\hbar} \phi \quad (\phi \text{ はリングを貫く磁束。}) \quad (8.73)$$

という S 行列で表される導体を挿入することで導入する。反対側の経路に、(8.71) で表される量子ドットを挿入する。計算される透過率は式としては複雑な形をしているが、数値計算をしてみると、図 8.33(b), (c) に示したように、ファノ効果が現れている。

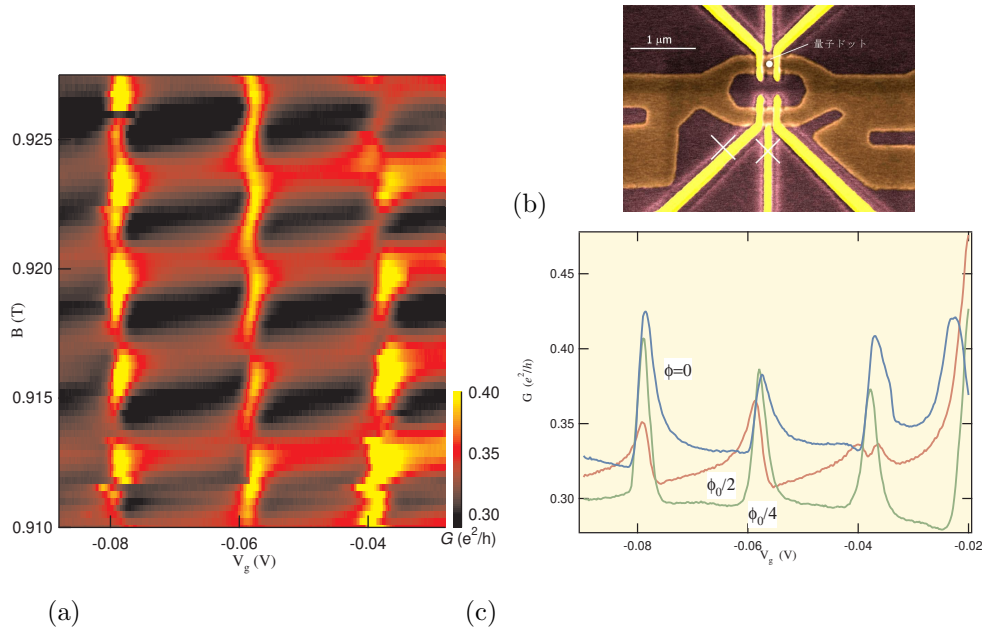


図 8.34 (a) AB リングに量子ドットを埋め込んだ構造で測定した伝導度をゲート電圧と磁場との関数としてカラープロットしたもの. (b) 実験に使用した試料の電子顕微鏡写真. ×印をつけたゲートはこの実験では使用していない. (c) 3つの代表的な磁場におけるクーロン振動を示した. 基準のデータについて  $\phi = 0$  とした [1].

更に、このファノ効果の歪の方向 ((8.70) のパラメタ  $q$ ) が (c) に示したように磁束量子  $\phi_0$  周期で変化している。このことは、透過線形に現れている歪が干渉波の相対位相に依存していることを示しており、図 8.33(a) に現れた共鳴位置での急激な  $\pi$  位相シフト変化を反映しているものであることがわかる。

図 8.34 に実際の実験結果を示している。ファノ線形と、ファノパラメタ (歪の方向) が AB リングを貫く磁束に対して期待したように変化していることがわかる。

## 8.8.2 量子ドットと近藤効果

電極の多体系と量子ドットとの相互作用がもたらす現象として、もう1つ近藤効果を取り上げる。ただし、時間の関係で詳細は略す。付録 G に、これも簡単なものだが、7年前に低温物理学で紹介した際のノートを再録したものを付けておく。低温ではほとんどの自由度が死んでしまい、伝導体は何も残らない空洞になるわけである (電子の「導波管」はマイクロ波の導波管同様、空洞でもあることになる) が、フェルミ準位上で縮退がある場合は例外となる。金属のフェルミ球自身もその例外であるが、ここにもう1つの縮退自由度が存在し、この縮退自由度とフェルミ面の電子の自由度との間に量子もつれ (quantum entanglement) が生じると、近藤効果 (Kondo effect) が生じる。「縮退自由度」として最も考えやすいのが時間反転対称性によって生じるクラマース縮退、すなわちスピンの縮退であり、このため、電子数が奇数個の量子ドットが実験に適している。

近藤効果は初めは磁性不純物が存在する金属の低温での抵抗上昇として問題になり、近藤淳がこれに理論的解答を与えたが、この際に2次の摂動項に発散を発見した。これは近藤問題 (Kondo problem) として、固体物理の枠を超える物理学の大問題となった。この解決のために、アンダーソン不純物モデルが提出され、繰り込み群理論 (renormalization group theory) が開発され発達した。素粒子論のクォーク閉じ込め問題に適用されて漸近的自由 (近藤効果の低温強結合化の逆側のフローに相当) の概念とともに、量子色力学の成立に寄与するなど非常に大きな世界の扉を開くものとなった。

付録 G に示したように、量子ドット系の近藤効果とは一口に言って縮退局在系とフェルミ面との多体共鳴効果により、トンネルハミルトニアン  $H_T$  の効果が異常増大することである。量子ドットの場合、 $H_T$  が表す過程は、物理的にはドットを通して電子が透過することを表している。従って、 $H_T$  の効果が増大することは伝導度が増大するこ

とを表す。ここで、2重障壁とのアナロジーを思い出すと、近藤多体共鳴によってドットを通した伝導は異常増大し、クーロンブロッケードによって本来の伝導度が非常に小さくなっている場合でも最終的な透過率は1(ユニタリ)になる。この場合の伝導度は、次節の Landauer の公式の所で述べるように  $2e^2/h$  とユニバーサルな値になる。

近藤効果に非常に特徴的なのは、それがフェルミ面で生じているため、常にフェルミ面と共鳴状態にあると言うことである。従って、最も単純には電子数奇数のクーロンの谷においては伝導度は近藤効果のユニタリ極限により  $2e^2/h$  となり、偶数の谷ではクーロンブロッケードにより0となる。図 8.35 に、以上の考察から考えられる伝導度の振舞いと、実際に量子ドットで測定された近藤効果の様子を示した。

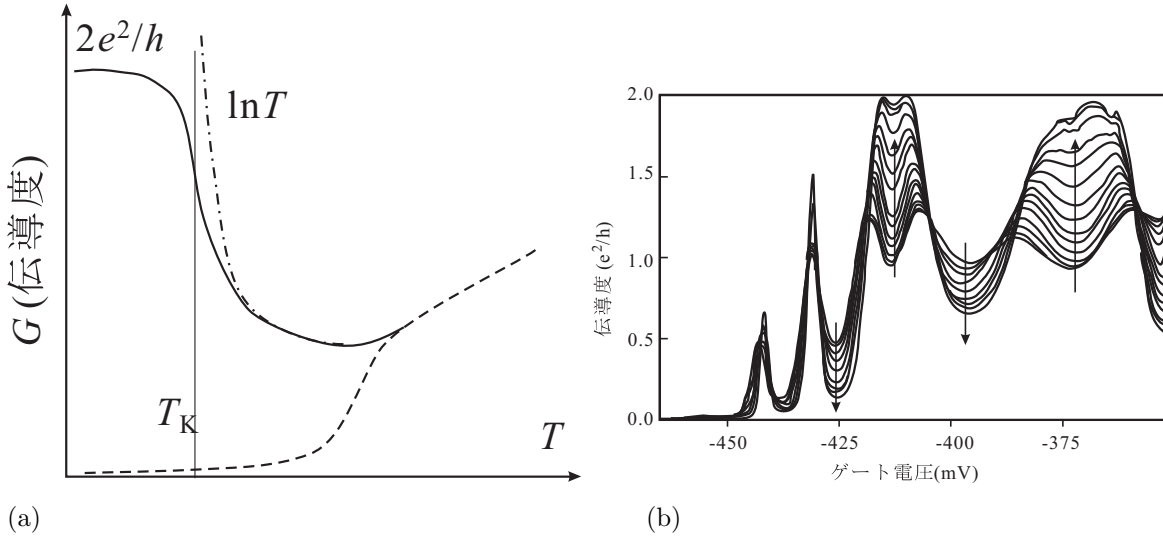


図 8.35 (a) 量子ドットで近藤効果が生じたときのドットを通した電気伝導度を温度の関数として模式的に描いたもの。実線がドットの電子数が奇数の場合で近藤効果が生じて温度低下と共に伝導度が  $\ln T$  に比例して上昇し、 $T_K$  より下がると飽和し、ユニタリ極限 ( $2e^2/h$ ) に達する。電子数が偶数の場合は伝導度はクーロンブロッケードによりゼロとなる(破線)。(b) 量子ドットの実験に現れた近藤効果。矢印は温度低下を表し、電子数奇数の谷では低下と共に伝導度は増加、偶数の谷では逆が生じていることがわかる。

## 付録 8C：近藤効果

不純物アンダーソンモデルで、電子がドット内に1個だけいる状態 ( $n = 1$ ) が基底状態になっている状態を考える。この時、ドットはスピン  $1/2$  を持ち、一種の磁性不純物と捉えることができる。電子1個を外部からドットに付け加える際に必要な余分なエネルギーを  $\Delta E^+$ 、取り除く方を  $\Delta E^-$  とする。

$$\Delta E^+ = \mu_2 - \mu = \epsilon_0 + U - \mu, \quad \Delta E^- = \mu - \mu_1 = \mu - \epsilon_0 \quad (8C.1)$$

である。これらのエネルギー差から、不確定性関係から許される時間  $\hbar/\Delta E^\pm$  程度は、このような励起状態が存在可能であり、これを中間状態とする  $H_T$  の2次過程によるトンネルは可能である。その振幅は

$$\frac{-\gamma_L^* \gamma_R}{\Delta E^-}, \quad \frac{\gamma_L^* \gamma_R}{\Delta E^+} \quad (8C.2)$$

となる。このような高次のトンネル過程を同時トンネル (co-tunneling) 現象と呼ぶ。近藤効果は、この同時トンネルによるトンネル確率振幅が異常増大する現象と捉えることもできる。

まず、ハミルトニアン

$$H = H_{\text{leads}} + H_{\text{dot}} + H_T \quad (8C.3)$$

に対して、次のユニタリ変換を考える。

$$\begin{cases} c_{k\sigma} = (\gamma_L^* c_{L,k\sigma} + \gamma_R^* c_{R,k\sigma})/\gamma \\ \bar{c}_{k\sigma} = (-\gamma_R c_{L,k\sigma} + \gamma_L c_{R,k\sigma})/\gamma \end{cases}, \quad \gamma^2 \equiv \gamma_L^2 + \gamma_R^2 \quad (8C.4)$$



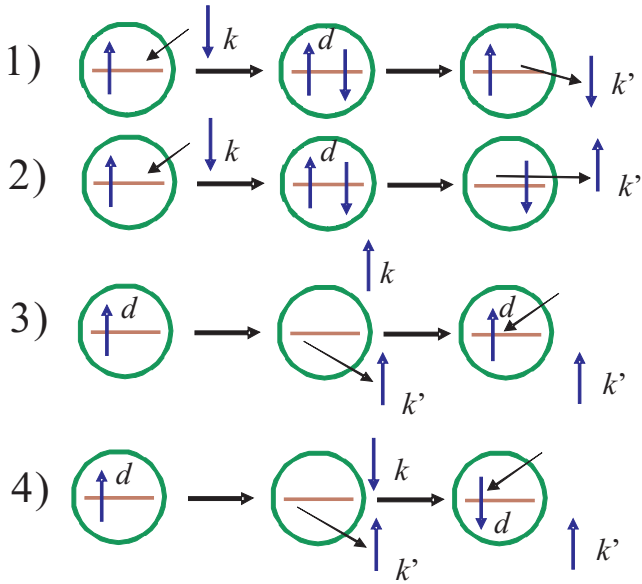


図 8C.1 初期状態としてドット中に上向きスピ  
電子がいた場合に考え得る 2 次のトンネルプロセ  
ス. これら 1)~4) は式 (8C.8), (8C.9) の 1)~4)  
に相当する.

この時, トンネルハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_T &= \sum_{k,\sigma} [(\gamma_L c_{L,k\sigma}^\dagger + \gamma_R c_{R,k\sigma}^\dagger) d_\sigma + \text{h.c.}] \\
 &= \sum_{k,\sigma} [\gamma c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{h.c.}]
 \end{aligned} \tag{8C.5}$$

となり,  $\bar{c}_{k\sigma}$  はドットとの結合に関係しないので無視することができる. 結局この変換をすることで, 2つの電極を考え, 左右電極からの電子のトンネルを独立に考えていたのを, 1つの演算子にまとめてしまい, 「フェルミ面を持つ系とドットとの電子のやりとり」という描像に繰り込んだことになる. 左右リードを持つ量子ドットと, 金属中の磁性不純物というかなり大きく異なる系であったが, この変換により少なくとも形式的には同じになったことになる\*2. 書き換えた不純物 Anderson 模型をもう一度書き下すと

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_\sigma^\dagger d_\sigma + \sum_{k\sigma} (\gamma c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{h.c.}) + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \tag{8C.6}$$

である. 基底状態でドット中に電子が 1 個だけ存在する条件は

$$\epsilon_d < E_F < \epsilon_d + U \tag{8C.7}$$

である. この条件下で, 電極の伝導電子 ( $s$  電子) とドットの電子 ( $d$  電子) との相互作用項 ( $V_{kd}$  の入った第 3 項) を摂動として取り扱おう. 1次摂動はドットの電子数を変えてしまうために存在せず, 2次摂動, すなわち co-tunneling 過程を考える.

ドットの電子がスピン  $\uparrow$  を持っている状態 ( $\psi_\uparrow$  と書く) に対する摂動過程は, 次の 4 つが考えられる (Pauli 原理により最初の電子が出て行かない限り,  $\downarrow$  電子しかドットに入れない).

- 1)  $k \downarrow \rightarrow d \downarrow \rightarrow k' \downarrow$
- 2)  $k \downarrow \rightarrow d \downarrow, d \uparrow \rightarrow k' \uparrow$  (下向きスピン電子がドットに飛び込み, 上向きスピン電子が飛び出す)
- 3)  $d \uparrow \rightarrow k' \uparrow, k \uparrow \rightarrow d \uparrow$  (上向きスピン電子が飛び出し, 上向きスピン電子が飛び込む)
- 4)  $d \uparrow \rightarrow k' \uparrow, k \downarrow \rightarrow d \downarrow$  (上向きスピン電子が飛び出し, 下向きスピン電子が飛び込む)

\*2 ただし, 物理的な意味はかなり違っているところがある. 金属中不純物の場合,  $c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  は不純物散乱を表しているが, 量子ドットの場合は, 同時トンネリングを介した透過および反射を表している. なお, 不純物の場合は  $k$  が 3次元というのも大きな違いであるが, これについては, 散乱波を部分波展開することで 1次元の問題に帰着できる (ペーテ仮説による厳密解の求解にはこれを用いる) ので, 数学的等価性には影響しない.

それぞれの過程に対応する有効ハミルトニアンは、2次摂動で次のようになる

$$1) \rightarrow -\frac{\gamma^2}{\Delta E^+} c_{k'\downarrow}^\dagger d_\downarrow d_\downarrow^\dagger c_{k\downarrow}, \quad 2) \rightarrow -\frac{\gamma^2}{\Delta E^+} c_{k'\uparrow}^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger c_{k\downarrow}, \quad (8C.8)$$

$$3) \rightarrow \frac{\gamma^2}{\Delta E^-} d_\uparrow^\dagger c_{k\uparrow} c_{k'\uparrow}^\dagger d_\uparrow^\dagger, \quad 4) \rightarrow \frac{\gamma^2}{\Delta E^-} d_\downarrow^\dagger c_{k\downarrow} c_{k'\uparrow}^\dagger d_\uparrow. \quad (8C.9)$$

同様に  $\psi_\downarrow$  に対して4つの摂動過程が存在し、これらの有効ハミルトニアンは上で  $\uparrow\downarrow \rightarrow \downarrow\uparrow$  とすることで得られる。これらを足しあげ、次のように表す。

$$\begin{aligned} & \sum_{k\sigma} \frac{\gamma^2}{\Delta E^-} d_\sigma^\dagger d_\sigma + \sum_{kk'\sigma} \frac{\gamma^2}{\Delta E^+} c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \\ & + \sum_{kk'} \gamma^2 \left( \frac{1}{\Delta E^+} + \frac{1}{\Delta E^-} \right) (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} d_\downarrow^\dagger d_\uparrow + c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} d_\uparrow^\dagger d_\downarrow). \end{aligned} \quad (8C.10)$$

ここで、第1項は、過程3)で  $k = k'$  の場合である。 $k$  はフェルミ球の外側にあるので、十分低温でフェルミ縮退しているとし、 $c_k c_k^\dagger = 1$ ,  $c_k^\dagger c_k = 0$  とした。第2項は過程1)である。 $d_\downarrow \psi_\uparrow = 0$  より、 $d_\downarrow d_\downarrow^\dagger = 1$ ,  $d_\downarrow^\dagger d_\downarrow = 0$  を用いた。過程3)の残りとして2),4)が第3項である。ここで、

$$c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} d_\downarrow^\dagger d_\downarrow = \frac{1}{2} (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - d_\downarrow^\dagger d_\downarrow) + \frac{1}{2} (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger d_\downarrow)$$

と変形してみる。すると、ドットのスピン演算子を  $\hat{S}$  と書いて

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - d_\downarrow^\dagger d_\downarrow), \quad \hat{S}_+ = d_\uparrow^\dagger d_\downarrow, \quad \hat{S}_- = d_\downarrow^\dagger d_\uparrow$$

であるから、(8C.10)の第2項、第3項の和は次の2つ ( $H_d, H_{sd}$ ) の和に書き換えられる。

$$H_d = \sum_{kk'\sigma} \gamma^2 \left[ \frac{1}{\Delta E_k^+} - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\Delta E_{k'}^+} + \frac{1}{\Delta E_{k'}^-} \right) \right] c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (8C.11)$$

$$H_{sd} = \sum_{kk'} \gamma^2 \left[ \frac{1}{\Delta E_k^+} + \frac{1}{\Delta E_{k'}^-} \right] \left[ \hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right] \quad (8C.12)$$

上で、係数部分の  $k$  依存性を無視し、

$$J = \gamma^2 \left( \frac{1}{\Delta E^+} + \frac{1}{\Delta E^-} \right) \quad (8C.13)$$

とおくと、

$$H_d = \sum_{kk'} \left( -\frac{J}{2} \right) c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (8C.14)$$

は通常のポテンシャル散乱であり、スピンの依存しない形になる。一方、

$$\begin{aligned} H_{sd} &= J \sum_{kk'} \left[ \hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right] \\ &= J \sum_j \left[ (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)(\hat{s}_{xj} - i\hat{s}_{yj}) + (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)(\hat{s}_{xj} + i\hat{s}_{yj}) + 2\hat{S}_z \hat{s}_{zj} \right] \\ &= 2J \sum_j \hat{s}_j \cdot \hat{S} \end{aligned} \quad (8C.15)$$

は、伝導電子スピン  $\mathbf{s}_j$  とドットスピンとの交換相互作用を表している。これはしばしば  $sd$  ハミルトニアンと呼ばれるもので、本来は希薄磁性不純物系での電子スピン ( $s$ )-局在スピン (多くは  $d$  電子であるため、 $d$ ) の相互作用を表すものであるが、(8C.4)の変換により、量子ドット-リード系も同じハミルトニアンで近似できることがわかった。

透過を表すハミルトニアン  $H_T$  としては通常のポテンシャル散乱  $H_d$  は考えないこととし、 $H_{sd}$  をとる。すると、上に示したように、電極電子部分を加えた有効ハミルトニアン

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \sum_{kk'} \left[ \hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right]. \quad (8C.16)$$

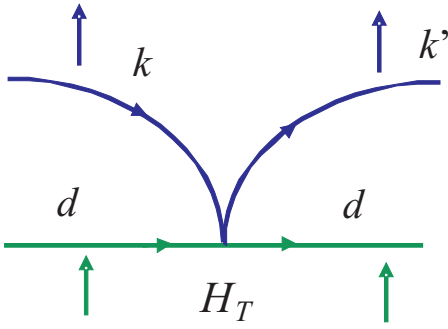


図 8C.2  $H_T$  の 1 次で電子がドットに散乱を受け、 $k \rightarrow k'$  と変化する過程をダイアグラムとして描いたもの。時間軸は左から右へと流れている。  $d$  はドットを表し、上下を向いた矢印はスピンを示している。

が得られる (Schrieffer-Wolff 変換)。

近藤が行った計算は、有効ハミルトニアン (8C.16) に対して Born 近似の 2 次までを計算する、というものである。すなわち、(8C.16) 中の  $J$  の項を摂動として 2 次まで ( $\gamma$  については 4 次) 扱う。左右の電極間の遷移を与える演算子  $\hat{T}$  は、次のように与えられる (以降は  $H_T = H_{sd}$ )。

$$\hat{T} = H_T + H_T \frac{1}{\epsilon - H_0 + i\delta} H_T + \dots \quad (8C.17)$$

この時、 $L \rightarrow R$  のトンネル確率は

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = 2 \sum_{k, k'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle Rk' | \hat{T} | Lk \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_{Rk'} - \epsilon_{Lk}) f(\epsilon_{Lk} - \mu_L) [1 - f(\epsilon_{Rk'} - \mu_R)] \quad (8C.18)$$

となる。

$|k \uparrow\rangle \rightarrow |k' \uparrow\rangle$  の散乱を考える。  $J$  の 1 次の摂動は図 8C.2 で表され、

$$\langle d \uparrow; k' \uparrow | \hat{T}^{(1)} | d \uparrow; k \uparrow \rangle = J/2 \quad (8C.19)$$

である。もちろん、 $H_T$  の過程にはトンネルが 2 回必要であるから、 $\gamma$  に関しては 2 次で (従って  $J$  は  $\gamma^2$  に比例する)、これは、(8C.2) の同時トンネル過程に相当する。

$J$  の 2 次  $\langle d \uparrow; k' \uparrow | \hat{T}^{(2)} | d \uparrow; k \uparrow \rangle$  には 3 種類のプロセスが存在する (図 8C.3, 図 8C.4)。最初の 2 つはスピン反転を伴わないもので、中間の伝播プロセスとして電子によるもの (図 8C.3(a)) と電子ホール対によるもの (図 8C.3(b)) によってこの 2 種類に分かれている\*3。この 2 つの寄与は

$$\begin{aligned} & \sum_q \left(\frac{J}{2}\right)^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_q + i\delta} [1 - f(\epsilon_q)] + \sum_q \left(\frac{J}{2}\right)^2 \frac{-1}{\epsilon - (2\epsilon - \epsilon_q) + i\delta} f(\epsilon_q) \\ &= \sum_q \left(\frac{J}{2}\right)^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_q + i\delta} \\ &= \left(\frac{J}{2}\right)^2 \int_{-D}^D d\epsilon' \nu \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + i\delta} \quad \nu : \text{Density of states} \\ &= \left(\frac{J}{2}\right)^2 \nu \left[ \ln \left| \frac{D + \epsilon}{D - \epsilon} \right| - i\pi \right]. \end{aligned} \quad (8C.20)$$

これは、電子正孔のバランスによって結果に発散などの異常は生じていない。ここで、金属中の電子状態については、エネルギー軸上で  $[-D, D]$  に一様な状態密度  $\nu$  のバンドがある、という極めて粗い、というより抽象的な近似を行っているが、現象の本質を見るためにはこのようなモデルが都合がよい。

図 8C.4 に示した過程では途中でスピン反転散乱が生じているが、(a) では、角運動量の保存のためにはドットスピンの  $3/2$  にならなくてははいけなくなり、この過程は存在しないことがわかる。(b) は電子-正孔対で中間状態を伝播し

\*3 ここで「ホール」(正孔)と呼ぶものは、フェルミの海から電子を 1 個引き抜いてできた孔状態である。半導体物理においてしばしば呼称される、伝導帯から電子を引き抜いて得られる正孔状態とは、一般に有効質量の符号など大きく異なるものである。

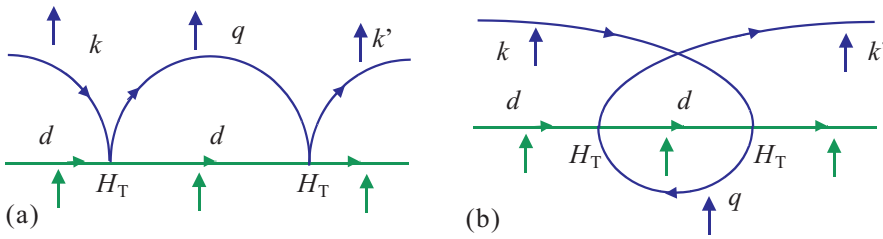


図 8C.3  $H_T$  の 2 次のプロセスの中でスピン反転散乱を伴わない過程. (a) 中間状態を電極中の電子励起として伝播する過程. (b) 中間状態として電子-ホール対が生成し伝播する. ホールは, 電極中の電子と 2 番目の散乱で対消滅する.

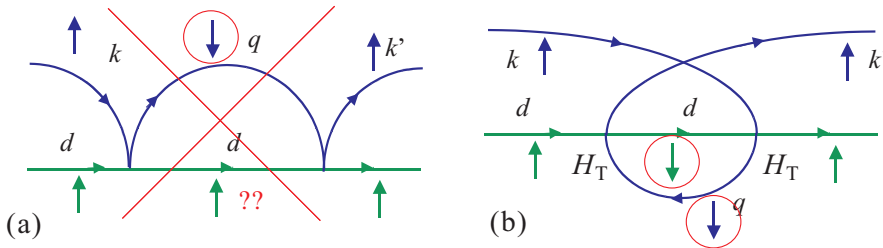


図 8C.4  $H_T$  の 2 次のプロセスの中でスピン反転散乱を伴う過程. (a) 中間状態を電極中の電子励起として伝播する過程であるが, 角運動量保存のためにはドットスピンの  $3/2$  にならねばならず, この過程は存在しない. (b) 中間状態として電子-ホール対が生成し伝播する.

ており, この寄与は

$$\sum_q J^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_q + i\delta} f(\epsilon_q) = J^2 \nu \int_{-D}^D \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + i\delta} f(\epsilon') d\epsilon$$

$$\approx \begin{cases} -J^2 \nu \ln |\epsilon|/D & |\epsilon| \gg k_B T \\ -J^2 \nu \ln k_B T/D & |\epsilon| \ll k_B T \end{cases} \quad (8C.21)$$

この項が近藤が発見した異常項であり, 温度低下あるいは小さな  $\epsilon$  に対して対数発散する. この異常によって生じる様々な効果を近藤効果と呼ぶ.

まず, この項のよって来たところを考えておこう. スピン反転散乱がない場合に異常項が出なかった理由は, 電子と正孔との対称性によって異常項が打ち消し合ったためであった. すなわち, 電子, 正孔それぞれに限定すれば, 異常は発生しており, その原因はフェルミ面という巨大な非対称性の存在である. 絶対零度においては, 電子にとってはフェルミ球の内部は入り込めない, 事実上全く状態のない領域であるのに対して, フェルミ面直上はほとんど無限に状態が縮退している. スピン反転を含まない過程においてこの非対称性を見事に打ち消してしまうのが, 電子-正孔対称性である. これに対して, スピン反転を含む過程においては, スピン角運動量が絡むために電子による中間状態の伝播過程が消えてしまい<sup>\*4</sup>, フェルミ面での非対称性が結果に反映された結果, 異常が現れる.

摂動の結果が, 異常(発散)を与えた, ということは, 発散条件に近い状況では摂動による取り扱いが破綻していることを示している. そこで, この問題を取り扱うためには発散を取り扱うための様々な手法が必要となる. むしろ, この近藤問題を取り扱うために繰り込み群を始め, 様々な手法が開発されてきたと言っても良い. ここではもちろん, これらの詳細には立ち入らない. その後の長年の研究で明らかになったことについて低温の極限についてごく簡単に述べておく.

$sd$  ハミルトニアン (8C.15) において, ドットスピンと伝導電子スピンとの間に反強磁性的な相互作用が働いたことを思いだそう. その原因にはスピン反転の項が影響している. すなわち, ドットスピンは co-tunneling を介したいわゆる交換相互作用によって, 反平行なスピンを持つ電子を引きつけ, 平行なスピンを持つ電子を遠ざける. これ

<sup>\*4</sup> これは, 数式的には  $\hat{S}_+$  と  $\hat{S}_-$  の非可換性 (交換関係から  $\hat{S}_z$  が出てくる) から生じており, このような量子効果が生じている, という言い方もできる.

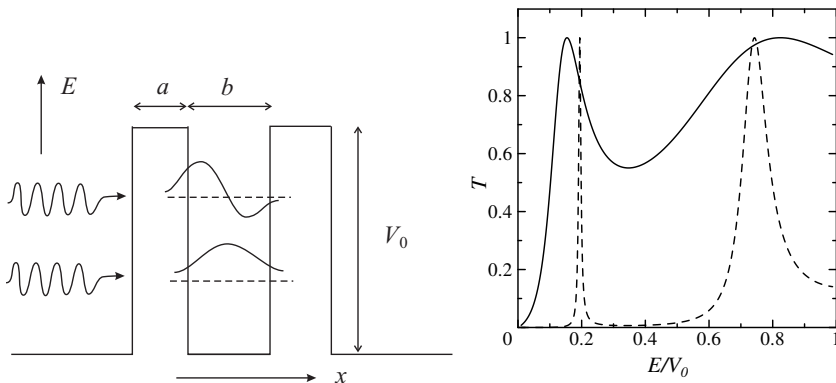


図 8C.5 左図：2重障壁ポテンシャルの模式図．縦軸はエネルギー，横軸は空間座標．破線位置に準束縛状態ができ，共鳴トンネル位置となる．入射波の波長は本来イラストよりずっと長い．右は透過率の計算例． $k_0 \equiv \sqrt{2mV_0/\hbar}$ として， $k_0 a$  が 0.5(実線)，2.0(破線)の場合， $k_0 b$  を 5.0 に固定．

は，遠方から見ると，伝導電子のスピンの雲がドット(不純物)スピンの纏い付くように見えるであろう．近藤効果は，低温でその効果が異常に強くなることを示している．このようにしてできあがるスピン分極の雲を近藤雲(Kondo cloud)と呼ぶ．ただし一方，ドット周辺のスピン分極の合計がドットスピンをちょうど打ち消す程度になれば，遠方からはドットスピンは見えなくなるため，それ以上ドットスピン周辺でスピン分極が生じることはなくなる．これをユニタリ極限と呼ぶ．

この現象は，多体の共鳴効果という捉え方も可能である．一体の共鳴効果(系のポテンシャル形状による共鳴効果)の代表として，2重障壁構造の共鳴トンネル現象を思いだそう．2重障壁構造においては，障壁高さがいかに高く，トンネル確率がいかに小さくても，入射波のエネルギーが共鳴エネルギーの所では，2つの障壁でコヒーレントな反射と透過によって，反射波は無限個の打ち消し合う波の重ね合わせになり，透過波は無限個の強め合う波の重ね合わせになる結果，最終的な透過率は1となる．この「共鳴エネルギー位置」は，両側の障壁が無限に厚いとした場合(この場合，障壁に挟まれた領域は「量子井戸」となる)の束縛エネルギー位置付近である．障壁が有限の場合に戻ると電子の障壁間での平均滞在時間が異常増大する，「準束縛状態」のエネルギーである．この場合は，準束縛状態に入ってもいずれは外界に漏れ出ていくため，障壁外側のこのエネルギーの自由電子とは共鳴状態にある．障壁外側のフェルミ面がこの状態に当たると，伝導を担うフェルミ面の電子が透過率1で2重障壁構造を透過するため，電気伝導度がピーク構造を示す．読者に思い出してもらうため，図 8C.5 にポテンシャル模式図と透過率の計算例を示した．

近藤効果もこれに多くの共通点を有していることがわかるであろう．一体共鳴効果が無限回の反射を基礎にしていたのに対して，近藤効果の場合は，フェルミ面上の無限のエネルギー縮退が類似現象を引き起こしている．一体共鳴の場合，軌道効果であったから準束縛状態により存在確率の偏りが生じたが，近藤効果の場合は，スピン間に働く力であるため，電子密度に偏りは生ぜず，スピン偏極の局在状態(近藤雲)が生じる．近藤雲の場合，一体共鳴と決定的に違うのは，フェルミ面の異常によって生じている状態であるため，常に共鳴位置がフェルミ準位にあることである．

準束縛状態には電子が有限時間しか止まらないため，平均滞在時間を  $\tau_a$  として，寿命幅  $\hbar/\tau_a (= \hbar\Gamma)$  ( $\Gamma$  はトンネル頻度)を持つ．近藤状態には共鳴幅はあるのか？またそれはどの程度であろうか．今，高温から次第に温度を下げていくと，温度によるエネルギー幅が共鳴幅より非常に大きい間は共鳴ラインの寄与は温度にはあまり依存しないであろう．逆に温度幅が共鳴幅より十分狭くなると，この場合もまた温度依存性が失われる．近藤効果の場合の共鳴幅を表すエネルギースケールは，温度換算で近藤温度と称され，良く  $T_K$  と記される．近藤温度をきちんと見積もるには(8C.21)の摂動では不十分で，スケーリングなど何らかの形で高次の寄与を取り込まなければならない．が，高温側で，(8C.21)の温度変化のある項が摂動を考えない場合の  $J$  とほぼ同程度になる温度がそうであろう，とすると，

$$-J^2 \nu \ln k_B T_K / D \sim J$$

より，

$$k_B T_K \sim D e^{-J\nu}$$

と見積もることができる．上の粗い見積りを見ると，反強磁性結合の元来の強さ  $J$  が大きくなると，指数関数的に  $T_K$  は下がる．これは共鳴以前の束縛エネルギー，2重障壁構造で言えば，障壁高さが高いことを示しており，トンネル確率の減少によって寿命幅が狭くなることと対応している．状態密度  $\nu$  についても同じである．これに対して，

バンド幅  $D$  が大きくなると,  $T_K$  は高くなる, すなわち, 共鳴幅は広がる. 実は, 今の簡単なモデルでは,  $J$  と  $D$  は独立ではないがそれは別として,  $D$  によって共鳴幅が広がってしまうのは, 非対称性の強いフェルミ面付近の過程以外に, バンドの深い内部の  $q$  を用いた過程の割合も増えてくるためと解釈することができる.

## 参考文献

---

- [1] K. Kobayashi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 256806 (2002); Phys. Rev. B **68**, 235304 (2003).
- [2] 勝本信吾, 「半導体量子輸送物性」 (培風館, 2014).
- [3] 近藤 淳, 「金属電子論」 (裳華房, 1983), 芳田圭, 「磁性」 (岩波書店, 1991)
- [4] Yu. V. Nazarov and Y. M. Blanter, “Quantum Transport” (Cambridge, 2009).



## 第9章 量子ホール効果

1次元よりも高い次元の系の伝導は、1次元伝導チャネルの高次元的な接続によって理解できる場合がある。一方、ランダウ量子化の場合は、磁場による連続的な2次元の座標自由度の混じりが重要であり、2次元以上の系であることを取り入れた扱いが必要である。

### 9.1 磁場中の2次元電子系

ハミルトニアンを次のように書く。

$$\mathcal{H} = \frac{m}{2} \mathbf{v}^2 = \frac{(\mathbf{p}_c + e\mathbf{A})^2}{2m} \equiv \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} = \frac{\pi_x^2 + \pi_y^2}{2m}. \quad (9.1)$$

$$\boldsymbol{\pi} \equiv \mathbf{p}_c + e\mathbf{A}. \quad (9.2)$$

$\boldsymbol{\pi}$  は動的運動量であり、実空間速度に  $\mathbf{v} = \boldsymbol{\pi}/m^*$  と対応している。 $\boldsymbol{\pi}$  と座標及び成分間の交換関係は

$$[\pi_\alpha, \beta] = -i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad (\alpha, \beta = x, y), \quad [\pi_x, \pi_y] = -i\frac{\hbar^2}{l^2} \quad (9.3)$$

と  $x, y$  成分が交換しない。これは古典的には磁場によって軌道が曲がり、 $x, y$  成分間に移り変わりが生じて独立にならないことに対応する。 $l$  は磁気長 (magnetic length) と呼ばれ、

$$l \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\phi_0}{\pi B}} \quad (9.4)$$

と定義される。磁束量子が貫く円の半径の  $1/\sqrt{2}$  で、最小ランダウ半径とも呼ばれる。係数  $1/\sqrt{2}$  は後出の式 (9.9) でゼロ点エネルギー項が  $\hbar\omega_c/2$  であることに対応する。

ガイド中心  $(X, Y)$  の演算子  $\hat{\mathbf{R}}$  を、実空間座標演算子を  $\hat{\mathbf{r}}$  として次のように定義する。

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{R}} + \frac{l^2}{\hbar}(\pi_y, -\pi_x). \quad (9.5)$$

第2項は古典解 (このノートでは示していない) に習ったものである。 $\pi_x, \pi_y$  の交換関係より、

$$[X, Y] = il^2 \quad (9.6)$$

である。ハミルトニアンは  $(X, Y)$  によらないので、 $(X, Y)$  は時間変動しない「運動の恒量」である一方、交換関係 (9.6) より、 $X, Y$  間には不確定性が生じる。以上より、この系の正準共役な物理量の組として、 $(\mathbf{r}, \mathbf{p}_c)$  以外に、 $\mathbf{R}, \boldsymbol{\pi}$  が取れる。

### 9.1.1 ランダウ量子化

ハミルトニアンが (9.1) のように  $\pi$  について 2 次式で調和振動子的である\*1ことから、演算子

$$a = \frac{l}{\sqrt{2\hbar}}(\pi_x - i\pi_y), \quad a^\dagger = \frac{l}{\sqrt{2\hbar}}(\pi_x + i\pi_y) \quad (9.7)$$

を導入すると、

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad \mathcal{H} = \hbar\omega_c \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (9.8)$$

と調和振動子形に書くことができ、離散的エネルギー準位

$$E_n = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (9.9)$$

が得られる。これは、磁場による量子閉じ込めにより (角) 運動量が離散化し、エネルギー準位が離散化したものと考えられる。このような磁場による量子化をランダウ (Landau) 量子化と呼ぶ。

### 9.1.2 ガイド中心

$\mathbf{R}$  はハミルトニアン (9.1) と交換するので (9.9) は  $\mathbf{R}$  にはよらず、 $\mathbf{R}$  の自由度分縮退している。一様な磁場のみがかかった状態は空間の並進対称性が存在し、 $\mathbf{R}$  の自由度によって固有関数による基底セットではこの並進対称性が担保されている。縮退がある場合、基底セットを様々に取れる。今の場合、 $\mathbf{R}$  の成分が交換しないため、対角化の対象により基底の様相は大きく変わる。

ここでは、 $X$  を対角化する波動関数を考えることにする。これにはランダウゲージ  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$  を取るのが便利である。シュレディンガー方程式は (9.1) より、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\psi &= \frac{(\mathbf{p}_c + e\mathbf{A})^2}{2m} \psi = \frac{-1}{2m} \left[ \frac{\hbar^2 \partial^2}{\partial x^2} - \left( -i\frac{\hbar \partial}{\partial y} + eBx \right)^2 \right] \psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2 \nabla^2 - 2i\hbar e B x \frac{\partial}{\partial y} + e^2 B^2 x^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (9.10)$$

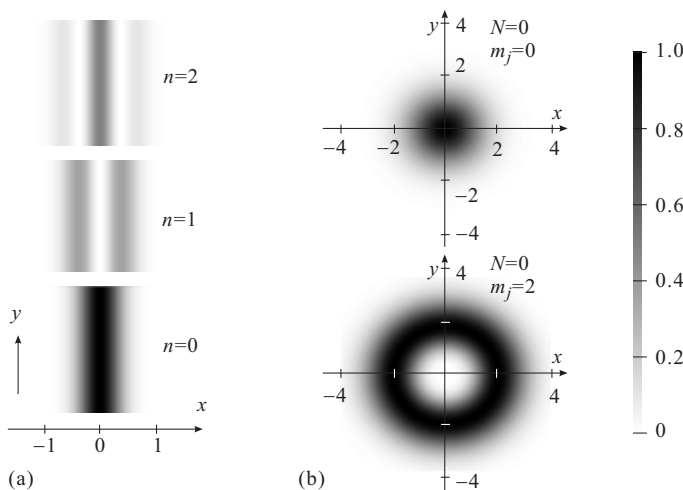


図 9.1 (a)  $X$  を対角化する固有状態 (9.12) の確率密度  $|\psi_{nk}(\mathbf{r})|^2$  を 3 つの  $n$  について濃淡プロットしたもの。長さの単位は  $l_B$ 。  $x$  方向の広がりは  $\sqrt{2n+1}l_B$  程度。(b) 本文にはないが  $X^2 + Y^2$  を対角化する固有状態についての同様なプロット。  $N = 0$  の場合、原点を中心とする半径  $|\sqrt{2}|m_j|l_B$  の円の周りに分布する。

\*1 正準共役な演算子である  $\pi_x, \pi_y$  それぞれの 2 次の和であり、 $p^2/2m + m\omega_c^2 x^2/2$  という調和振動子ハミルトニアンと同じと見ることができる。



と書き下ろされる.  $\mathbf{r}$  と正準共役な  $\hbar\partial/i\partial\mathbf{r}$  は  $\mathbf{p}_c$  に対応する. ハミルトニアン中に演算子  $y$  が含まれていないことから,  $y$  部分は平面波となり, 変数分離形  $\psi(\mathbf{r}) = u(x)\exp(iky)$  を上式に代入すると,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{(eB)^2}{2m} \left( x + \frac{\hbar}{eB}k \right)^2 \right] u(x) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_c^2}{2} (x + l^2k)^2 \right] u(x) = Eu(x) \quad (9.11)$$

となる. これは,  $x = -l^2k$  を中心とする 1 次元調和振動子の方程式であり, 固有値は (9.9), 固有関数は

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) \propto H_n \left( \frac{x - x_k}{l} \right) \exp \left( -\frac{(x - x_k)^2}{2l^2} \right) \exp(iky) \quad (x_k \equiv -l^2k) \quad (9.12)$$

と与えられる.  $H_n$  は  $n$  次のエルミート多項式である.  $X = x_k = -l^2k = -l^2p_y/\hbar$  で,  $X$  が定まり,  $y$  に関しては平面波で全空間に広がっている. すなわち,  $Y$  が不確定な状態である. 式 (9.12) について  $X$  の変化を無視した  $y$  方向の群速度  $\partial E/\partial k = 0$  であるから, (9.12) は  $y$  方向の進行波ではない.  $\partial X/\partial k$  がゼロでないため,  $X$  にエネルギーが依存する状況が生じると,  $y$  方向への運動が生じる.

図 9.1(a) に (9.12) による確率密度を濃淡プロットした.  $x$  方向は, 1 次元調和振動子,  $y$  方向は一様に伸びた形状になる. また, ここでは示さなかったが,  $X^2 + Y^2$  を対角化するように固有状態を選ぶこともできる. この場合は, 図 9.1(b) のように,  $x, y$  両方向に局在した形状となる. 同じ固有状態に属する固有関数であるにも関わらず, これほど異なる外観を示すのは, 無論多くの縮退があるためであり, この縮退が, 実空間座標の一種である  $\mathbf{R}$  の自由度によることもその要因である.

## 9.2 整数量子ホール効果

### 9.2.1 シュブニコフ・ド・ハース (SdH) 振動

2次元電子系に垂直磁場を印加していく過程を考える. ランダウ量子化 (9.9) によって, エネルギー準位は図 9.2 のように磁場に対して原点を中心とする放射状に広がる (扇ダイアグラム). 電気伝導測定の実験条件下で電子はこれらの準位をどう占有するだろうか? 外部の粒子溜め (電源) につながっていることを考えると,  $E_F$  が一定となるが, この視点から見ると, 一般に図 9.2 の原点の位置が磁場に対して変化する. 図 9.2 の原点は,  $xy$  面内の運動エネルギーがゼロ, すなわち  $z$  方向の量子化準位位置である. ??節で行った単純な近似の範囲内ではこの位置は  $N_{\text{dep}}$  のイオン化不純物を作るポテンシャルを遮蔽するように決まっているから,  $xy$  方向自由度の状態密度が変化すると, 外部から与えた  $E_F$  までを占有している電子の面密度が  $N_{\text{dep}}$  となるように  $z$  方向の波動関数に変化し, 図 9.2 の原点位置も変化する. 図 9.2 が止まって見えるような視点からは  $E_F$  が磁場変化するように見える. 以下, この視点 (電子の面密度  $n_s$  が一定) で考えることにする.

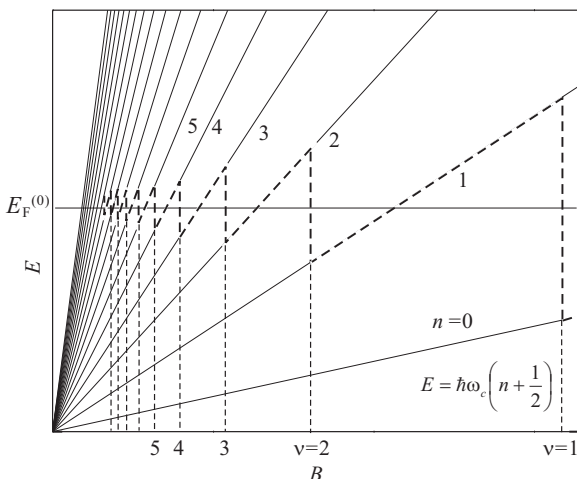


図 9.2 ランダウ準位 (9.9) の振舞いを示した. 2次元電子密度  $n_s$  一定の条件下でこのフレームから見た  $E_F$  の動きを破線 で示した.  $E_F^{(0)}$  はゼロ磁場の値.

ランダウ準位あたりの状態面密度  $n_L$  を求める.  $y$  方向の幅  $W_y$ ,  $x$  方向の幅  $W_x$  の領域内で式 (9.12) の波動関数が取りうる状態数を数える.  $y$  方向は平面波であるから,  $W_y$  が定める  $k$  空間での  $k$  の「存在間隔」は  $2\pi/W_y$  である. 一方,  $x$  方向を  $0 \leq X \leq W_x$  と区切ると,  $-W_x/l_B^2 \leq k \leq 0$  であるから, 面積  $S = W_x W_y$  内の状態数は,

$$\frac{W_x/l_B^2}{2\pi/W_y} = \frac{S}{2\pi l_B^2} \quad \therefore n_L = \frac{1}{2\pi l_B^2} = \frac{eB}{h} = \frac{B}{\phi_0}, \quad (9.13)$$

すなわち, 磁束密度を磁束量子で測った数になっている. 電子系が何個のランダウ準位を占めているかは,

$$\nu = \frac{\phi_0 n_s}{B} \quad (9.14)$$

で (端数も含めて) 測られ, これを**充填率**と呼ぶ.

絶対零度では電子は低いランダウ準位から占有して行き, 占有された中で最も高いランダウ準位に  $E_F$  がロックされる. 磁場を増加させていくと  $\nu$  がちょうど整数になるところで最上位だった準位が空になり,  $E_F$  は下の準位 ( $E = \hbar\omega_c(\nu - 1/2)$ ) に落ちる. 以上から, 図 9.2 で見ると  $E_F$  は破線のように振動する. この振動現象, およびこれによって発生する電気抵抗の振動現象を**シュブニコフド・ハース振動** (Shubnikov-de Haas, SdH 振動) と呼ぶ.

## 9.2.2 波動関数の局在

完全な証明はされていないが, ポテンシャル乱れがあり, 時間反転対称性を有してスピン軌道相互作用もない2次元電子系ではすべての状態が空間的に局在すると信じられている. 磁場が印可されると時間反転対称性が失われアンダーソン局在の意味での局在は解消されるが, 更に磁場が強くなりサイクロトロン半径がポテンシャル乱れの特徴的長さよりも短くなると別の意味での局在が発生する.

その様子を模式的に図 9.3(a) に描いた. サイクロトロン運動している電子に電場を印可すると電場と垂直方向に加速されて「蟹の横這い」運動を生じるが, ポテンシャルの凹凸についてこれを考えると図のように, ポテンシャルの等高線上に捕えられて周回運動をする状態となり, 全体としては局在状態となる. 空間閉じ込めは, フォック-ダウウィン状態で見たと同じようにランダウ準位をエネルギー空間で広げる効果があり, 図 9.3(b) のように, デルタ関数だった状態密度が広がりを持つことになる. 一方, 図 9.3(a) で見ると, ポテンシャルの谷と山の境のところで, 空間的に閉じないような非常に稀な等高線が存在する可能性があることがわかる. このような (古典的には) 等高線に沿って移動する状態は広がった状態ということになる. このような状態は, 実際ランダウ準位の中心に1つだけ存在することがわかっている. これも模式的に描くと, 図 9.3(b) のようになる.

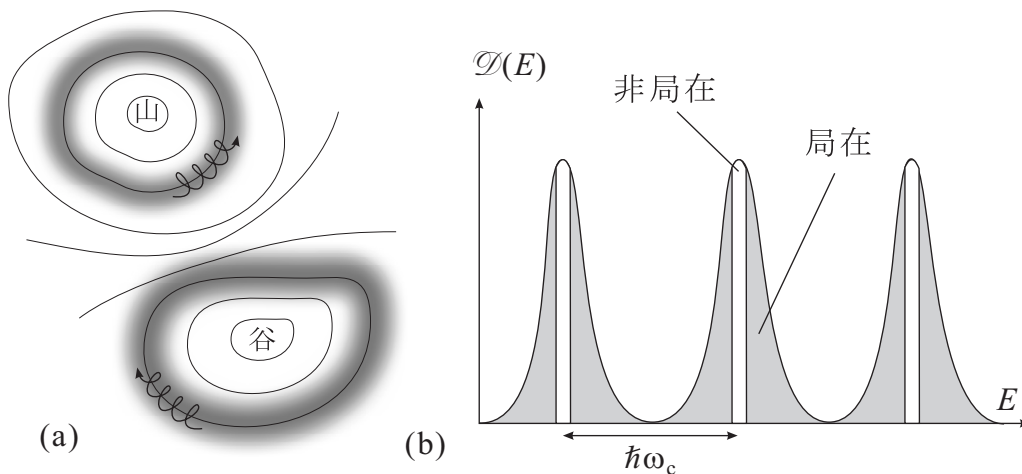


図 9.3 (a) 強磁場中で不純物ポテンシャルによりランダウ準位波動関数が局在する様子を模式的に描いた. 図 9.1(a) の形の波動関数が, 不純物ポテンシャルの等ポテンシャル線の上に束縛される. 回転しながらドリフトする様子を描いた線は, 古典的軌道を描いたもの. (b) ランダウ準位のエネルギー分布が (a) に不純物ポテンシャルにより広がり, 影で示したように局在する. 非局在状態は, ポテンシャルの山谷の間, ランダウ準位の中心付近に存在する.

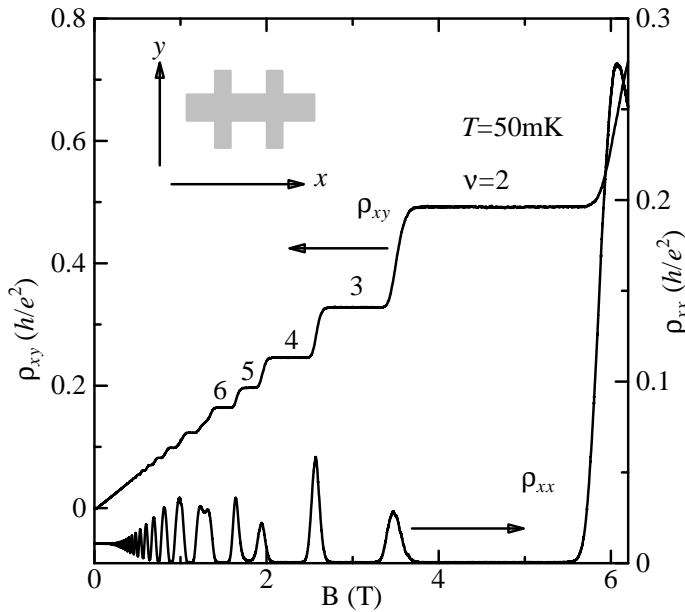


図 9.4 整数量子ホール効果の実験例. Al-GaAs/GaAs 2次元電子系を図中に示したホールバー形状とし、長手 ( $x$ ) 方向に電流を流して、 $x$  方向の 2 つの端子に現われる電圧から  $\rho_{xx}$ 、 $y$  方向の対向電極に現われる電圧から  $\rho_{xy}$  を得る.

### 9.2.3 整数量子ホール効果の特徴

図 9.4 は整数量子ホール効果 (IQHE) の測定例で、このように、強磁場電気伝導において、磁場を変化させると弱磁場での古典的ホール効果から外れて明瞭な階段構造が現れる。この階段の高さが精確に

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{n} = \frac{1}{n} (R_K) \approx \frac{2.5812 \times 10^4}{n} (\Omega), \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (9.15)$$

となる。図 9.4 からわかるように、この領域では  $\rho_{xx} = 0$  となる。すなわち、超伝導状態と同じく、電圧なし (すなわちエネルギー散逸なし) に電流が流れている。

### 9.2.4 端状態による説明

強くランダウ量子化したエネルギー準位が図 9.3(b) のように局在していると考えると、図 9.4 の実験結果は、 $\rho_{xx} = 0$  の超電流は  $E_F$  がランダウ準位中心間のエネルギーギャップ領域、あるいは局在準位領域にある時に流れ、 $E_F$  が非局在状態位置 (ランダウ準位中心) にある時は  $\rho_{xx}$  が有限となり  $\rho_{xy}$  には量子化値間の遷移が生じる。すなわち、量子化-超電流は 2次元電子の大部分 (バルク) が絶縁体状態で生じる。

これを端状態の伝導で説明するのが「端状態モデル」である。図 9.4 中に示したような有限幅の試料においては、端状態が生じる\*2。これを反映したモデルとして、 $x$  方向は幅  $W$  の井戸的なポテンシャル  $V(x)$  で閉じ込められ、 $y$  方向に無限に伸びた 2次元電子系に  $z$  方向に強い磁場を印加し、 $y$  方向に電流を流す状況を考える。

波動方程式は式 9.10 に  $V(x)$  を加えたものになる。図 9.5 は、この「樋」型のポテンシャルに磁場による閉じ込めが加わった状況を描いた。試料の十分内部では  $V(x) = 0$  で、ランダウ量子化が生じる一方、端の近傍では、 $V(x)$  の影響で、調和振動子ポテンシャルの幅が狭くなり、有効的な  $\omega_c$ 、従ってエネルギー固有値は上昇する。ガイド中心  $X$  が波動関数の幅  $\sqrt{2n+1}l_B/2$  程度に近づいたところで  $n$  番目のランダウ準位が上昇し始める。この上昇が生じている位置では、

$$\langle v_y \rangle = dE/\hbar dk = -(l_B^2/\hbar)dE/dX \quad (9.16)$$

\*2 端と端をつないだ試料 (平面的につないだものはコルビノ型と呼ばれる) では、端が生じない。

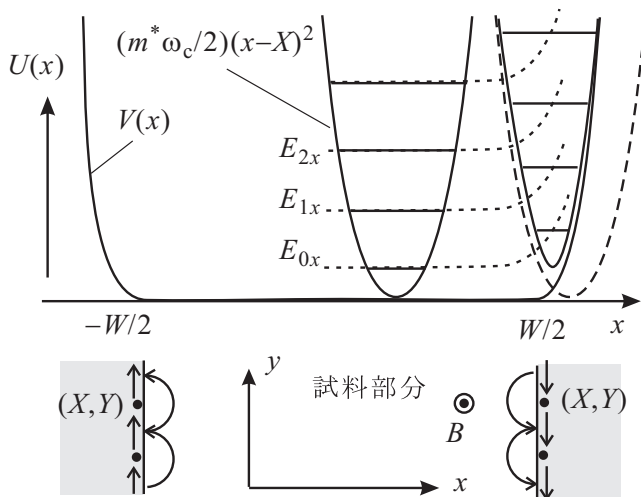


図 9.5 「種」ポテンシャル  $V(x)$  がある場合の強磁場下 2 次元電子系の  $x$  方向ポテンシャル  $U(x)$ . 端状態の形成を破線で示した.  $U(x)$  は磁場による調和振動子ポテンシャルと  $V(x)$  との和になる. 下は古典描像であるスキッピング軌道の模式図.

が有限になり, 端に沿った運動が可能になる. これは, 図 9.5 の下に模式的に示したように, 古典的には端にぶつかりながら走るスキッピング軌道に対応している. このような状態を端状態 (edge states) と呼ぶ. 端状態では電子の進む方向は磁場の向きによって決まっている.

端状態波動関数を  $y$  方向の長さ  $L_y$  に対して規格化すれば, この状態の運ぶ電流は  $j = (e/L_y)\langle v_y \rangle$  である. 1 つのランダウ準位に属する片方の端状態の集合に着目する. これらは, 端の電気化学ポテンシャル  $\mu$  までの状態が電子で占有されているから, バルクでのランダウ準位位置より高い適当な基準値  $E_0$  よりエネルギーが高い端状態の運ぶ, ランダウ準位あたりの電流は, 式 (9.13) と (9.16) より, 次のようになる.

$$J = \int_{X_0}^{X_\mu} \frac{L_y dX}{2\pi l_B^2} \frac{e}{L_y} \langle v_y \rangle = \frac{e}{h} \int dX \frac{dE}{dX} = \frac{e}{h} (\mu - E_0). \quad (9.17)$$

フェルミ準位が非局在状態間の局在状態位置にある時, 平衡状態では試料の  $x$  方向の両端で化学ポテンシャルは等しいから, 両端を大きさが同じで向きが反対の電流が流れ, バルク状態は局在しているので  $y$  方向に流れる全電流はゼロとなる (遠方にある  $y$  の端を考えると, 試料を環状電流が流れていることになる).  $y$  方向に電流  $J_y$  を流す境界条件を与えると, 図 9.6 のようにこれは A 端, B 端の端状態を流れる電流  $J_A, J_B$  の差であるから, (9.17) より, 各端の電気化学ポテンシャル  $\mu_A, \mu_B$  に差が発生する. これが, ホール電圧である. この時,

$$\sigma_{xy} = \frac{J_y}{V_x} = \frac{e(J_A - J_B)}{\mu_A - \mu_B} = \frac{e^2}{h} \quad (9.18)$$

これはランダウ準位が 1 つの時の伝導度であるから, ランダウ準位が  $\nu$  個あれば  $\sigma_{xy}$  はこの  $\nu$  倍になり, IQHE が説明された.

これは,  $x$  と  $y$  がクロスしている部分があるだけで, ランダウアー公式の導出とほとんど同じである. QPC の時はそれ程精確な量子化が得られなかったのに, IQHE では極めて精確になるのは端電流の方向性 (カイラリティ) と幾何学的効果である. QPC では反対向きのチャンネルが空間的に重なっているため, 電子の向きを反転させる散乱が容易に起こる. それに対し, IQHE の場合, 端状態間にはマクロな空間的隔たりがあって反転散乱確率は天文学的に

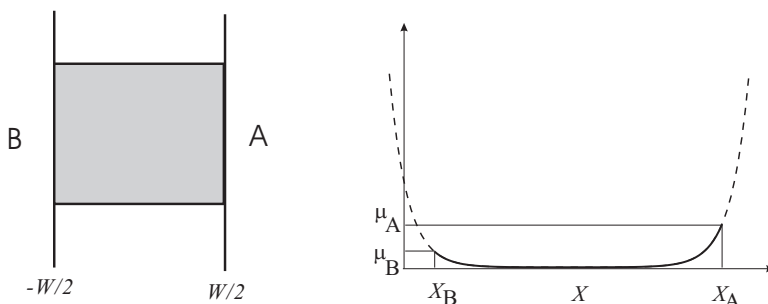


図 9.6 端電流モデルで整数量子ホール効果を考える時のランダウ準位とその占有状態の模式図.

低く、透過率は1である。従って、試料幅を狭めて端状態間の散乱を起こりやすくすると IQHE の量子化も精確でなくなると考えられ、実験でも確かめられている。

上の簡単なモデルでは試料内部にホール電場がかかる可能性を無視していたが、ホール電場によりバルクに  $dE/dX$  が生じると電流が流れることになる。しかしこの場合でもこれらの電流は、上で言えば  $\mu_B$  以下で試料断面で積分すると相殺してゼロになるので  $J_y$  には寄与せず、上述の量子化議論は変わらず成立する。

## 9.3 トポロジカル不変量による説明

引き続き整数量子ホール効果の理論的な理解を考えるが、やや新しい概念を必要とする部分があるため、節を改める。以下、文献 [4] に沿って説明する。

### 9.3.1 磁場中のブロッホ電子

磁場中の2次元電子系についてブロッホ電子の概念を拡張して、扱うことを考える。9.1節の扱いが、完全な自由電子を考えていたのに対して強束縛模型を考えるのに近い。2次元直角格子を考え、格子ベクトル  $\mathbf{R}$  だけの並進操作をする演算子を  $T_{\mathbf{R}}$  と書く。

$$T_{\mathbf{R}}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}).$$

$f(\mathbf{r})$  を平面波  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  で展開し、 $T_{\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  より、 $T_{\mathbf{R}}$  は

$$T_{\mathbf{R}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}\cdot\mathbf{p}\right) \quad (9.19)$$

のように書くことができる。 $T_{\mathbf{R}}$  は、磁場がない時の格子のハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  とは交換し、これらの同時対角化状態がブロッホ状態である。

次に一様な磁場がかかった場合

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \quad (9.20)$$

を考える。 $V(\mathbf{r})$  は格子ポテンシャルで、 $T_{\mathbf{R}}$  で不変であるが、ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  は一般にそうは行かず、

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) + \nabla g(\mathbf{r})$$

である。これは無論、サイクロトロン運動で運動量が保存しなくなるためである。そこで、「並進操作」を変更することを考えてみる。磁気並進演算子 (magnetic translation operator) として、(9.19) の  $\mathbf{p}$  を  $\mathbf{p} + e\mathbf{A}$  で置き換えたもので定義する。ここで、対称ゲージ  $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$  を取ると、磁気並進演算子  $T_{BR}$  は

$$T_{BR} \equiv \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}\cdot\left[\mathbf{p} + \frac{e}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{B})\right]\right\} = T_{\mathbf{R}} \exp\left[\frac{ie}{\hbar}(\mathbf{B} \times \mathbf{R})\cdot\frac{\mathbf{r}}{2}\right] \quad (9.21)$$

と書くことができる。この  $T_{BR}$  は  $\mathcal{H}$  と交換するので、これら2つの同時対角化固有状態を考えることができる。ただし、ランダウ量子化でガイド中心座標が相互に交換しなかったのと同様に、磁気並進演算子の各座標要素は一般には交換せず、

$$T_{BRa}T_{BRb} = \exp(2\pi i\phi)T_{BRb}T_{BRa}, \quad \phi = \frac{eB}{h}ab \quad (9.22)$$

と交換に際して位相因子が付く。ここで、 $a, b$  はそれぞれ単位ベクトルの長さであり、したがって、 $\phi$  は単位胞を貫く磁束を磁束量子  $h/e$  で測ったものである。 $\phi$  が有理数  $p/q$  であれば、格子が並進ベクトルを連続集合か離散集合に限定したように、互いに交換する限定磁気並進演算子を考えることができる。考えやすくするため、拡大単位胞 (磁気単位胞, magnetic unit cell) を考え、元の単位ベクトル  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  に対し、磁気単位ベクトル  $q\mathbf{a}, \mathbf{b}$  を考え、格子ベクトル  $\mathbf{R}'$  を

$$\mathbf{R}' = n(q\mathbf{a}) + m\mathbf{b} \quad (9.23)$$

のように表すことにする。すると、この磁気単位胞を  $p$  本の磁束量子が貫いていることになり、磁気並進演算子  $T_{BR'}$  の各要素は交換する。

そこで、 $\psi$  を  $\mathcal{H}$  と  $T_{BR'}$  の両方を対角化する固有状態とする。  $T_{BR'}$  の各要素  $T_{qa}$  と  $T_b$  (簡潔のため  $BR'$  を略記) の固有値は

$$T_{qa}\psi = e^{ik_1qa}\psi, \quad (9.24a)$$

$$T_b\psi = e^{ik_2b}\psi \quad (9.24b)$$

と書くことができる。  $k_1, k_2$  は、一般化結晶運動量であり、還元ゾーン記法では第1磁気ブリルアンゾーン (magnetic Brillouin zone)  $0 \leq k_1 < 2\pi/qa, 0 \leq k_2 < 2\pi/b$  に制限することができる。固有状態はブロッホ関数形に

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (9.25)$$

と書くことができる。  $n$  はバンド指数、  $\mathbf{k}$  は一般化運動量である。ただし、  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の条件がゼロ磁場とは異なっている。

$$u_{n\mathbf{k}}(x+qa, y) = \exp\left(i\frac{\pi py}{b}\right) u_{n\mathbf{k}}(x, y), \quad (9.26a)$$

$$u_{n\mathbf{k}}(x, y+b) = \exp\left(-i\frac{\pi px}{qa}\right) u_{n\mathbf{k}}(x, y). \quad (9.26b)$$

$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を振幅と位相因子とに分けて  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})| \exp[i\theta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})]$  と書くと、

$$p = -\frac{1}{2\pi} \oint dl \cdot \frac{\partial \theta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial l} \quad (9.27)$$

となる。積分は、磁気単位胞の縁に沿って反時計回りに行う。

### 9.3.2 線形応答によるホール伝導度

$\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  摂動では、平面波部分を「ハミルトニアン」演算子に繰り込んで、格子周期関数  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  に対する方程式を考えた。同じことを磁場中の強束縛模型についても考えることができる。磁気ブロッホ関数 (9.25) に (9.20) のハミルトニアンを作用させるが、正準運動量演算子に対して、  $\mathbf{p}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(\hbar\mathbf{k} + \mathbf{p})$  であることに注意して計算すると、

$$(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hbar\mathbf{k} + \mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

であるから、

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \quad (9.28)$$

と書くことができる。

(9B.3) のホール伝導度に対する久保公式を考える。前節で見た磁気ブロッホ関数を固有状態として取り、  $\alpha, \beta$  などの量子数を表す指数をバンド指数と波数  $(n, \mathbf{k})$  で指定する。分子の積分をするために、速度演算子  $\mathbf{v}$  は磁場のために  $\mathbf{v} = (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})/m$  となる点に注意して、  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow |n, \mathbf{k}\rangle$  のようにブラケット表示を使い、

$$\langle n, \mathbf{k} | \mathbf{v} | m, \mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int_0^{qa} dx \int_0^b dy u_{n\mathbf{k}}^* \mathbf{v} u_{m\mathbf{k}'} \equiv \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle n | m \rangle \quad (9.29)$$

とする。積分は  $\mathbf{k}$  空間での周期性から磁気単位胞について行えば十分である。規格化は磁気単位胞について行い、

$$\int_0^{qa} dx \int_0^b dy |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = 1$$

とする。

(9.28) の  $\mathbf{k}$  依存ハミルトニアンを使うと,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  として, 次のように書くことができる.

$$\langle n|v_x|m\rangle = \frac{1}{\hbar} \left\langle n \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right| m \right\rangle, \quad (9.30a)$$

$$\langle n|v_y|m\rangle = \frac{1}{\hbar} \left\langle n \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \right| m \right\rangle. \quad (9.30b)$$

更に,

$$\left\langle n \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathbf{k}}}{\partial k_j} \right| m \right\rangle = (E_m - E_n) \left\langle n \left| \frac{\partial u_m}{\partial k_j} \right\rangle = -(E_m - E_n) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_j} \right| m \right\rangle, \quad j = x, y \quad (9.31)$$

である.

久保公式 (9B.3) へ代入することで次の表式が得られる.

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -i \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f(E_{n\mathbf{k}}) \sum_{m(\neq n)} \left[ \frac{\langle n\mathbf{k} | \partial \mathcal{H}_{\mathbf{k}} / \partial k_x | m\mathbf{k} \rangle \langle m\mathbf{k} | \partial \mathcal{H}_{\mathbf{k}} / \partial k_y | n\mathbf{k} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} - \text{c.c.} \right] \\ &= -i \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f(E_{n\mathbf{k}}) \sum_{m(\neq n)} \left[ \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \right| m \right\rangle \left\langle m \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right| m \right\rangle \left\langle m \left| \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \right\rangle \right] \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \frac{2\pi}{i} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f(E_{n\mathbf{k}}) \left[ \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial k_y} \right| \frac{\partial u_n}{\partial k_x} \right]. \end{aligned} \quad (9.32)$$

ここで, ベクトル場  $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$  を

$$\mathbf{A}_{n\mathbf{k}} = \int d^2r u_{n\mathbf{k}}^* \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} = \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (9.33)$$

で定義する (実空間積分). ここで,  $T = 0$ ,  $E_F$  はランダウバンドの間にあるとし,  $\mathbf{k}$  の和を積分で書くと,

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{2\pi i} \sum_{E_n < E_F} \int_{\text{MBZ}} d^2k [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{n\mathbf{k}}]_{k_z} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{2\pi i} \sum_{E_n < E_F} \int_{\text{MBZ}} d^2k [\text{rot}_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{n\mathbf{k}}]_{k_z} \quad (9.34)$$

となる. 積分は, 磁気ブリルアンゾーン上で行う.

ここで, 磁気ブリルアンゾーンは, トポロジカルには長方形ではなく 2次元トーラス  $T^2 = S^1 \times S^1$  と考えることができる. というのは, ブリルアンゾーンの端,  $k_x = 0$  と  $k_x = 2\pi/qa$ , また  $k_y = 0$  と  $k_y = 2\pi/b$  は同じ点となるからである. もし,  $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$  がこのトーラス上のすべての点で 1 値の値を有していたとすると, (9.34) から計算される  $\sigma_{xy}$  はストークスの定理から 0 となる.  $\sigma_{xy} \neq 0$  となるためには,  $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$  がトリビアルでないトポロジを有していなければならない. ここで, 磁気ブリルアンゾーンがトーラスであることも重要である. 積分をする母体のトポロジが連続的に 1 点に収縮可能であるとする, その上で定義された  $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$  がトリビアルでないトポロジを持つことができないからである.

$\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$  のトポロジを見るために, 局所ゲージ変換を考える.  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  が Schrödinger 方程式 (9.28) の解であったとすると, 任意の連続関数  $f(\mathbf{k})$  を使って

$$u'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp[i f(\mathbf{k})] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (9.35)$$

とした  $u'$  もまた解であり, これらは物理的に全く同等である. 式 (9.33) の定義から, この変換は

$$\mathbf{A}'_{n\mathbf{k}} = \mathbf{A}_{n\mathbf{k}} + i \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \quad (9.36)$$

に相当する.

以上のゲージ変換に起因する不定性を除くため,  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の位相を 1 つに固定したとする. しかしそれでも, 磁気ブリルアンゾーン全体で位相を固定することはできない.  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  が 1 点  $\mathbf{k}_0$  でゼロになるとする. 図 9.7 のように, 磁気ブリルアンゾーンを  $\mathbf{k}_0$  を含む領域  $H_I$  とそれ以外の領域  $H_{II}$  に分割する.  $H_I$  内でゼロ点が存在する場合には図のようにゼロ点の周りに回転するような位相を考える必要がある. 一方,  $H_{II}$  は境界でトーラス接続されることからこれとは異なる位相を考える必要があり, 結局 2 つの領域で異なるゲージを取ることになる.

バンド  $n$  の寄与のみを考えることとし,  $n$  も省略すると, (9.34) の積分の部分は, ストークスの定理を 2つの領域に用いて,

$$I = \frac{1}{2\pi i} \left[ \int_I d^2k [\text{rot} \mathbf{A}]_{k_z} + \int_{II} d^2k [\text{rot} \mathbf{A}]_{k_z} \right] = \oint_{\partial H} (\mathbf{A}^{II} - \mathbf{A}^I) \cdot \frac{d\mathbf{k}}{2\pi i} \quad (9.37)$$

となる. 領域 II の外周上の積分はトーラス境界条件のため消える (同じ線上を往復して積分していることになる). 境界  $\partial H$  上では, ゲージ変換により

$$u_{\mathbf{k}}^I = u_{\mathbf{k}}^{II} e^{i\theta(\mathbf{k})} \quad (9.38)$$

と表されるはずである. (9.33) の定義を思い出しながら計算すると,

$$I = \oint_{\partial H} [\langle u_{\mathbf{k}}^{II} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\mathbf{k}}^{II} \rangle + (i \nabla_{\mathbf{k}} \theta) \langle u_{\mathbf{k}}^{II} | u_{\mathbf{k}}^{II} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}}^{II} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\mathbf{k}}^{II} \rangle] \cdot \frac{d\mathbf{k}}{2\pi i} = \frac{\Delta_{\partial H} \theta}{2\pi} \quad (9.39)$$

となり, 境界 1 周での位相変化  $\Delta_{\partial H} \theta$  は  $2\pi$  の整数倍でなければならないから,  $I$  は整数に限られる. これを  $\nu_C$  と書くと,  $E_F$  以下のバンド数を  $n_B$  として,

$$\sigma_{xy} = n_B \nu_C \frac{e^2}{h} \quad (9.40)$$

となって, ホール伝導度が  $e^2/h$  の整数倍になることが示された. 式 (9.40) を **TKNN 公式** (Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs) と呼ぶ.  $\nu_C$  はチャーン数 (Chern number) と呼ばれ, ランダウバンドの場合, 1 となることがわかっており<sup>\*3</sup>, 以上から (9.18) と同じ結果が得られた.

チャーン数は, 波動関数位相の特異点, ゼロ点の数に相当し, トポロジカル不変量 (topological invariant) と呼ばれる量の一種である. エネルギーバンドのトポロジカルな性質に起因する量であり, トーラスを球面に变化させるためには穴をつぶす行為が必要であると同様, バンドギャップを一旦つぶさない限り他のトポロジーを持つバンドに移行することはできない. このため, TKNN 公式で表されるホール伝導度は大変安定で細かな試料の性質によらず精確な値を示す. また, ここで出てきた  $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$  は付録 H で示したベリー接続,  $\text{rot} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}$  はベリー曲率に相当するものである. この点は, トポロジカル絶縁体の項で再度述べる.

### 9.3.3 ラフリンの思考実験

ラフリン (Robert Laughlin) が考えたのは, 図 9.8(a) のように 2DEG をくると半径  $R$  の円筒状に丸め, 円筒の端に円状の電極をつける, という試料である. 磁場は円筒の芯から外部に向かって出ており, 2DEG に垂直に印加されている. 図のように  $x, y$  軸を取ると, 電流は  $x$  方向に流れ,  $y$  方向は閉じてしまっているため, 「端」が存在しない. 更に, 円筒の中心に細長いソレノイドを通し, 電流を流すことでこの中に磁束  $\Phi$  を通す. この磁束は直接

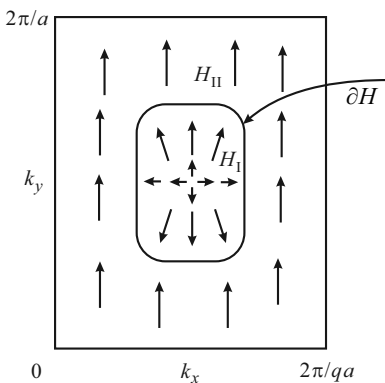


図 9.7 磁気ブリルアンゾーン中にゼロ点がある場合, 本文中のように波動関数位相を決めた場合の位相の様子を模式的に描いたもの.

<sup>\*3</sup> 計算は一般のトポロジカル絶縁体などに比べれば簡明だが, ファイバー束の理論などを要し, この議論ほど簡単でないで略す. 物理的なモデルを用いての議論については次節を参照.



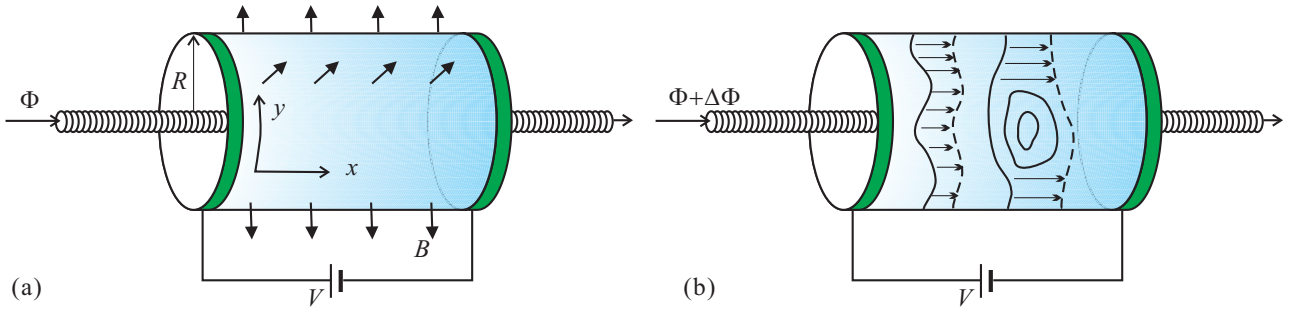


図 9.8 (a) Laughlin の思考実験で使用された「丸められた」2次元系. 2DEG は半径  $R$  の円筒状に丸められ, 2DEG への磁場  $B$  は放射状になって垂直に印加されている. これに, AB 位相を与えるための無限に細長いソレノイドが円筒中心を通っている. 電場は円筒長手方向 ( $x$  方向) にかける. (b) ソレノイド中の磁束を  $\Phi$  から  $\Delta\Phi$  だけ増加させたときの波動関数の変化を模式的に描いたもの.

2DEG に触れることはないが, 2DEG 上, 円筒を一周する軌道に対しては AB 位相を与える. 垂直磁場, およびソレノイド磁場を与えるベクトルポテンシャルは, ランダウ・ゲージを用いて,

$$\mathbf{A} = (0, Bx), \quad \mathbf{A}_\Phi = \left(0, -\frac{\Phi}{2\pi R}\right) \quad (9.41)$$

と書く. 波動関数として, (9.12) の形を取ると,  $y$  方向に系を丸めたため, 波動関数はこれを一周する形になる.

$y$  方向の電流は

$$j_y = \frac{1}{L_x} \frac{\partial \mathcal{E}_t}{\partial \Phi} \quad (9.42)$$

と表される.  $\mathcal{E}_t$  は,  $x$  方向の規格化距離  $L_x$  分の円筒上の電子系の全エネルギーである<sup>\*4</sup>. ベクトルポテンシャルはランダウゲージで  $\mathbf{a} = (0, Bx - \Phi/L_y, 0)$  と表すことができる. 磁場下 2次元電子系のハミルトニアンを基準  $\mathcal{H}_0$  に取ると, この磁束が入った効果はこのハミルトニアンに対して

$$k_y \rightarrow k_y - \frac{2\pi}{L_y} \frac{\Phi}{\phi_0}, \quad \left(\phi_0 \equiv \frac{h}{e}\right) \quad (9.43)$$

と変換することで取り込まれるが, これは, ガイド中心の  $X$  座標が

$$X \rightarrow X + \left(\frac{\Phi}{\phi_0}\right) \frac{L_x}{N_\phi} \quad (9.44)$$

のように変化することを意味している.

貫通磁束の変化  $\Phi \rightarrow \Phi + \Delta\Phi$  は  $X$  の変化  $\Delta X = (L_x/N_\phi)\Delta\Phi/\phi_0$  となる. すなわち,  $\Delta\Phi$  が  $\phi_0$  の整数倍 ( $q$  とする) であれば,  $\Delta X = qL_x/N_\phi = 2q\pi l_B^2/L_y$  となり,  $x$  方向の固有状態の間隔のちょうど  $q$  倍で  $q$  だけ隣の固有状態に移っていくことになり, 磁束増加分は波動関数の位相に吸収される.  $N$  個の Landau 準位が完全に占有されている場合,  $\nu = N$  の時,  $\Delta\Phi = \phi_0$  の変化を考えると,  $x$  方向の電場  $E$  がある時のエネルギー変化は  $\Delta\mathcal{E} = -eE\Delta X N_e$  ( $N_e = \nu N_\phi = NN_\phi$ ) である.

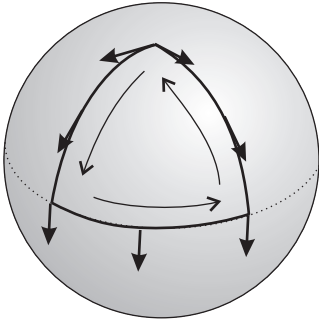
ここで次のように仮定しよう. すなわち, 量子 Hall 状態 (Fermi 準位が Landau 準位の間であって, Landau 準位がちょうどすべて埋まっている) では, 電流値は  $y$  方向の境界条件にはよらない, すなわち  $\Phi$  の絶対値にはよらない, とする. そうであれば, (9.42) での微分を差分で変更して

$$j_y = \frac{1}{L_x} \frac{\partial \mathcal{E}_t}{\partial \Phi} = \frac{1}{L_x} \frac{\Delta \mathcal{E}_t}{\Delta \Phi} = \frac{1}{L_x} \left(-eE \frac{L_x}{N_\phi}\right) \frac{N_e}{\phi_0} = N \frac{e^2}{h} E \quad (9.45)$$

が示された. すなわち, Hall 伝導度  $\sigma_{xy} = j_y/E_x$  は  $e^2/h$  の整数倍に量子化されている. 1 個のバンドあたりの伝導度が  $e^2/h$  であることから, 間接的ながらランダウサブバンドのチャーン数が 1 であることを示したことになる.

<sup>\*4</sup> ここではこの表式は簡便に次のように考えておく. 円筒のインダクタンス  $\mathcal{L}$ , 電流  $J$  に対して磁場エネルギー  $\mathcal{E}_H = \mathcal{L}J^2/2 = \Phi^2/2\mathcal{L}$  で,  $\partial \mathcal{E}_H / \partial \Phi = \Phi/\mathcal{L} = J$  規格化の長さを  $L_x$  とすると,  $J = L_x j_y$  より, 表式を得る.

## 付録 9A : ベリー一位相



ベリー一位相に対応する古典的な例として良く挙げられるのが左図のような球面上のベクトルの移動である。3次元空間でベクトルを平行移動させて適当な軌道を描き元の点に戻すとベクトルに変化は生じない。ところが、「平行移動」について、ベクトルが球面内になければいけない(ベクトルがその点での球の接平面内になければいけない)という条件を付け、3次元空間での平行という条件を捨てて球面上で交わらない円に接するという条件に変更すると、左図のように、元の点に戻った時ベクトルの向きは一般に変化している。この変化角がベリー一位相に相当する。

この時、ベクトルの向きの変化角を  $\alpha$ 、周回曲線を  $C$  とすると、 $\alpha$  は、「あるベクトル量」 $\mathbf{A}$  の  $C$  上の線積分で表すことができる。この  $\mathbf{A}$  をベリー接続 (ベリー接続は、点が移動した時のベクトルの変化の条件、今の場合は球面上に射影するなど、により異なる) と呼び、また、これは、ストークスの定理により、

$$\alpha = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \int_S \text{rot} \mathbf{A} \cdot d\boldsymbol{\sigma}$$

と  $C$  で囲まれた面  $S$  上の積分で書くことができる。この  $\text{rot} \mathbf{A}$  を、ベリー曲率と呼ぶ。

時間に依存するハミルトニアン  $H(t)$  の固有値、固有関数を

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \quad (9A.1)$$

のように書く。両辺の時間微分を取り、固有関数  $\langle k|$  を作用させると、

$$\langle k(t)|\partial|n(t)\rangle/\partial t \equiv \langle k(t)|\dot{n}(t)\rangle = \frac{1}{E_n(t) - E_k(t)} \left\langle k(t) \left| \frac{\partial H}{\partial t} \right| n(t) \right\rangle. \quad (9A.2)$$

$$\therefore \langle \dot{n}|n\rangle + \langle n|\dot{n}\rangle = 0 \quad \therefore \text{Re}(\langle n|\dot{n}\rangle) = 0. \quad (9A.3)$$

$H(t)$  に対する Schrödinger 方程式の解  $\psi(t)$  を  $|n(t)\rangle$  で展開する。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n(t)\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E'_n(t') dt'\right), \quad (E'_n(t) \equiv E_n(t) - \hbar\eta_n(t), \quad \eta_n(t) = i\langle n|\dot{n}\rangle). \quad (9A.4)$$

Schrödinger 方程式に代入すると、

$$\sum_n i\hbar \left( \dot{c}_n|n\rangle + c_n|\dot{n}\rangle - \frac{i}{\hbar} E'_n c_n|n\rangle \right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E'_n(t') dt'\right] = \sum_n c_n H|n\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E'_n(t') dt'\right]. \quad (9A.5)$$

$\langle k|$  を作用させると、式 (9A.2) より、

$$\frac{dc_k}{dt} = \sum_{n \neq k} \frac{\langle k|\partial H/\partial t|n\rangle}{E_k - E_n} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t (E'_k(t') - E'_n(t')) dt'\right] c_n. \quad (9A.6)$$

$\psi(0) = |m(0)\rangle$  から出発し、 $H(t)$  が時間  $T$  の間十分ゆっくりと断熱的に変化したとすると  $|\psi(t)\rangle = |m(t)\rangle$  であり、他の固有状態は系に混じり込まない。 $H$  の時間変化をパラメーター集合  $\{\mathbf{R}_i\}$  (ベクトル  $\mathbf{R}$  で表す) の時間変化  $\{\mathbf{R}_i(t)\}$  とする。時間  $T$  で  $t=0$  で元のパラメーター  $\mathbf{R}(0)$  に戻る変化 (ループ軌跡) を考える。

$$|\psi(t)\rangle = |m(\mathbf{R}(t))\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E'_m(t') dt'\right] = |m(\mathbf{R}(t))\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'\right] e^{i\gamma_m(t)}, \quad (9A.7)$$

$$\text{ただし } \gamma_m(t) = \int_0^t \eta_m(t') dt' = i \int_0^t \langle m(\mathbf{R}(t'))|\dot{m}(\mathbf{R}(t'))\rangle dt'. \quad (9A.8)$$

$\gamma_m$  は (9A.3) からわかるように、実数である。ループ軌跡について見ると、 $t \rightarrow \mathbf{R}$  の変数変換を行い、

$$\gamma_m(T) = i \int_0^T \langle m(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} m(\mathbf{R}(t)) \rangle \cdot \dot{\mathbf{R}}(t) dt = i \oint_C \langle m(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} m(\mathbf{R}(t)) \rangle \cdot d\mathbf{R}(t) = \gamma_m(C). \quad (9A.9)$$

$\nabla_{\mathbf{R}}$  は  $\mathbf{R}$  空間での勾配である。以下、添字の  $R$  は略す。上式は、断熱変化をした後元の点に戻ると、ベリー位相  $\gamma_m(C)$  が波動関数に加わることを意味する。更に、ストークスの定理を使うと、

$$\gamma_m(C) = -\text{Im} \oint_C \langle m(\mathbf{R}) | \nabla m(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} = -\text{Im} \int_S [\nabla \times \langle m(\mathbf{R}) | \nabla m(\mathbf{R}) \rangle] \cdot d\mathbf{S} \quad (9A.10)$$

という形が得られる。

## 付録 9B : ホール伝導度の久保公式

20 世紀前半から中盤にかけて展開された線形応答理論の中でも究極の形と言えるのが久保公式 (Kubo formula) である。久保公式には数学的に同等な表現が色々あるが、ここでは中野-久保と呼ばれるものを導入する。2 次元系を考え、 $y$  方向の電場  $E$  によって摂動  $eEy$  が加わったとする。摂動が入る前の固有状態を  $|\alpha\rangle$  のように書き、1 次摂動展開状態  $|\alpha'\rangle$  を

$$|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \beta | eEy | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_\beta} |\beta\rangle \quad (9B.1)$$

と書く。Hall 伝導度を考えるため、各  $|\alpha'\rangle$  による  $x$  方向の電流への寄与を足し上げることで、 $x$  方向の電流密度は摂動の 1 次で

$$j_x = \frac{1}{L^2} \sum_{\alpha} f(E_{\alpha'}) \langle \alpha' | \hat{j}_x | \alpha' \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{\alpha} f(E_{\alpha}) \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | (-ev_x) | \beta \rangle \langle \beta | eEy | \alpha \rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} + \text{c.c.} \quad (9B.2)$$

と書かれる。 $f(E)$  はフェルミ分布関数、 $L^2$  は規格化の面積である。また、摂動項が奇関数なので 1 次のエネルギー摂動項はなく  $E_{\alpha'} = E_{\alpha}$  である。

$$\langle \beta | v_y | \alpha \rangle = \langle \beta | \hat{y} | \alpha \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \beta | [y, \mathcal{H}] | \alpha \rangle = -\frac{i}{\hbar} (E_{\alpha} - E_{\beta}) \langle \beta | y | \alpha \rangle$$

により、この  $\langle \beta | y | \alpha \rangle$  を上に代入して、

$$\sigma_{xy} = \frac{j_x}{E} = \frac{e^2 \hbar}{iL^2} \sum_{\alpha} f(E_{\alpha}) \sum_{\beta} \frac{\langle \alpha | v_x | \beta \rangle \langle \beta | v_y | \alpha \rangle}{(E_{\alpha} - E_{\beta})^2} + \text{c.c.} \quad (9B.3)$$

が得られる。

## 付録 9C : 分数量子ホール効果

量子ホール効果から様々な新しい現象・アイデアが生じたが、その代表格、分数量子ホール効果について簡単に述べておこう。

### 9C.1 分数量子ホール効果の実験

分数量子ホール効果 (Fractional Quantum Hall Effect, FQHE) は、移動度の高い 2DEG での実験で発見された。これは、整数量子ホール効果でプラトー構造が現れるホール伝導度  $\sigma_{xy} = nG_q$  ( $n$  は整数) に対して

$$\sigma_{xy} = fG_q, \quad f = \frac{m}{n} \quad (n : \text{odd integer}, m : \text{integer}) \quad (9C.1)$$

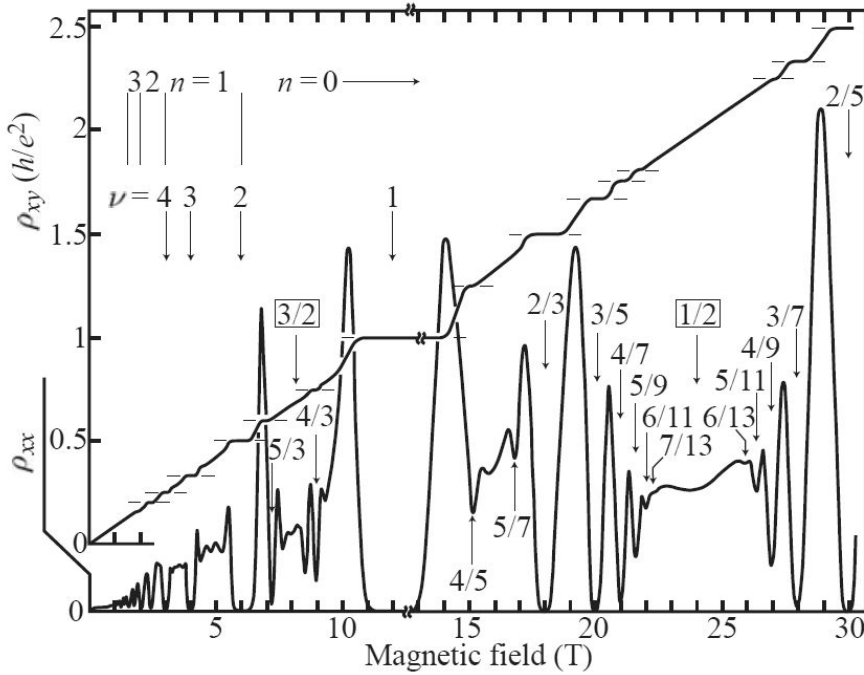


図 9C.1 分数量子ホール効果測定の代表例.

の位置に量子化プラトーが生じる，というものである。

測定の代表例とされるものが図 9C.1 である。IQHE も当然見えてはいるが， $\rho_{xy}$  においては，プラトーの広さはそれほど顕著ではなく，むしろ古典論的な磁場に比例するラインに乗っていて，(9C.1) に相当する位置に短いプラトーが現れている。これに対して， $\rho_{xx}$  の磁場変化は大変劇的であり，(9C.1) 位置の短いプラトーの所でも  $\rho_{xx} = 0$  に落ちるため，非常に激しい振動が現れている。IQHE が終了した充填率  $\nu < 1$  の領域でも FQHE の為に変細かい振動が現れており，特に  $\nu = 1/2$  を中心に対称的な形状になっていることがわかる。

FQHE は移動度に変敏感であり，移動度の低い試料では観測することができない。また，IQHE に比べても更に低温でのみ観測され，活性化エネルギーは高々数 K のオーダーである。一般に磁場が強い方が観測が容易である。

その物理に進むために，まず，電子間相互作用と電子の局在について簡単に考えておく。強磁場下の 2 次元電子が不純物による乱雑なポテンシャル中にある場合，この電子は，端状態的になって不純物ポテンシャルの等高線に沿って運動する。局在状態は，閉じた等高線に沿って閉軌道を運動する状態であるが，電子間相互作用は不純物ポテンシャルに対してゆらぎを与えるため，軌道が閉じなくなって局在が解ける可能性がある。

## 9C.2 ラフリン (Laughlin) 状態

FQHE が生じている時の電子状態は，このような電子間相互作用が強く影響した一種の電子液体状態であることがその後の研究により明らかにされてきた。そのような多体状態に対して，BCS 以来とも言える，簡潔な形で非常に良い近似の多体の波動関数を書き下ろしたのがラフリン状態と呼ばれるものである。

IQHE の時と同様，磁場  $B$  中の  $xy$  平面 2 次元電子系を考える，今度は都合により対称ゲージ  $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2)$  を取る。 $xy$  面を複素平面で表す。また，距離を磁気長で測ることとし  $z = (x - iy)/l$  とすると，電子間相互作用を加えたハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_j \left[ \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 + V(z) \right] + \sum_{j < k} \frac{e^2}{|z_j - z_k|} \quad (9C.2)$$

と表すことができる。

まずは，ポテンシャルと電子間相互作用がない場合の最低ランダウ準位の 1 電子波動関数を考えてこれに電子を詰めて多体の関数を作り，これが電子間相互作用の項を小さくするように取ることを考える。 $X^2 + Y^2$  を対角化，従っ

て、角運動量の固有状態となる波動関数は

$$\phi(z) = p(z) \exp\left(-\frac{|z|^2}{l^2}\right) \quad (9C.3)$$

と書くことができる。  $p(z)$  は  $z$  の多項式である。今、系の電子数を  $N_e$  として、これから多体の波動関数を作ると

$$\psi(z_1, \dots, z_{N_e}) = f(z_1, \dots, z_{N_e}) \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4}\right) \quad (9C.4)$$

と書くことができる。パウリ原理によって、多項式  $f$  は  $(1, \dots, N_e)$  の交換に対して反対称でなければならない。

$f$  の一般項は、(係数)  $\times \prod_i z_i^{m_i}$  という形をしているが、これは、この項が  $i$  番目の電子が  $m_i \hbar$  という角運動量を持った状態を表していることを示している。すなわち、この項が表す状態は全角運動量  $\hat{M}$  が  $\sum_i m_i \hbar$  であり、これは  $\mathcal{H}$  と交換する保存量であるから、 $\psi$  も  $\mathcal{H}$  と  $\hat{M}$  を同じ対角化する状態であることが望ましい。そのためには  $f$  は斉次多項式である必要がある。

更に、相互作用項を小さくするために2体の相関を考える。  $i, j$  2電子間の距離は  $|z_i - z_j|$  であるから、 $f$  を  $z_i - z_j$  にのみ依存する関数  $g$  の積と考える。すなわち、

$$f(z_i, \dots, z_{N_e}) = \prod_{i>j} g(z_i - z_j). \quad (9C.5)$$

ここで、 $f$  の反対称性から、 $g(z) = z^q$  で  $q$  は奇数でなければならない。以上をまとめた

$$\psi_q(z_1, \dots, z_{N_e}) = \prod_{i>j} (z_i - z_j)^q \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4}\right) \quad (9C.6)$$

をラフリン状態という。

強磁場下2次元電子系には強い電子間相関に伴い、様々な基底状態が存在することが明らかになっているが、このラフリン状態は、その嚆矢として、分数量子ホール効果をよく説明する状態として現れたものである。関数形からもわかるように、電子間相互作用を下げるようにできており、厳密対角化を使った有限系での厳密解にも近いことが知られている。

### 9C.3 ラフリン状態の占有率

式(9C.6)のラフリン状態において、指数の前についている多項式について考えるとひとつの指数  $i$  で指定される電子座標  $z_i$  の最大べきは  $M = (N_e - 1)$  である。このべきの項が、電子  $i$  の角運動量が最大値  $M\hbar$  を取る状態を表しており、半径  $\sqrt{2M}l$  の円の周りに  $l$  だけ広がった ( $z$  平面では  $l = 1$  とする) 軌道を取る。  $N_e$  個のランダウ準位に対応する面積は  $2\pi l^2 N_e$  であるから、この項が表す状態の占有率は

$$\nu = \frac{2\pi l^2 N_e}{\pi \times 2Ml^2} = \frac{N_e}{M} = \frac{N_e}{(N_e - 1)q} \approx \frac{1}{q} \quad (9C.7)$$

であることがわかる。多数の項中で軌道半径が最も大きなものが、このように1つの電子に最大の角運動量を与えるタイプのものであるから、この項の占有率が  $\psi_q$  自身の占有率になると考えられる。すなわち、逆に言うと、占有率によって対応するラフリン状態の  $q$  が決定されてしまう。

## 9C.4 励起状態

(9C.6) からの励起について考える。各電子の角運動量が 1 だけ増加する状態を考え、 $\prod_i z_i \psi_q$  とする。

$$\prod_i z_i \psi_q = \prod_i z_i \sum A_{m_1, m_2, \dots} z_1^{m_1} z_2^{m_2} \dots z_{N_e}^{m_{N_e}} \exp\left(-\sum_j \frac{|z_j|^2}{4}\right) \quad (9C.8)$$

$$= \sum A_{m_1, m_2, \dots} z_1^{m_1+1} z_2^{m_2+1} \dots z_{N_e}^{m_{N_e}+1} \exp\left(-\sum_j \frac{|z_j|^2}{4}\right) \quad (9C.9)$$

と各項について展開した形に書く。この  $\prod_i z_i$  との積をとる操作は、各電子の角運動量を増加させると共に、原点\*5に波動関数のゼロ点を導入している。ゼロ点周りでは、最小ランダウ半径  $l$  程度の大きさで電子波動関数振幅が小さくなるので、負電荷密度が減少し、背景正電荷によりゼロ点付近に正電荷があるように見え、これを準粒子とみなすことができる。

ここで更に  $\prod_k (z_k - z_0)^q$  をかけて、点  $z_0$  に  $q$  個の準粒子を導入する。ここへ、更に  $z_0$  に 1 個の別の空間的広がりが  $l$  の電子を付け加える操作を行うと、

$$\prod_k (z_k - z_0)^q \prod_{i < j} (z_i - z_j)^q \exp\left(-\sum_l \frac{|z_l|^2}{4} - \frac{|z_0|^2}{4}\right) \quad (9C.10)$$

となり、結局これは 1 個だけ電子が多く、空間的に一様なラフリン状態に他ならない。 $q$  個の正電荷を持つ準粒子 (準正孔) と電荷  $-e$  の電子が対消滅してやや広がったラフリン状態が生じた形であるから、結局準粒子 1 個が持つ電荷を  $e/q$  と考えて良いことになる。

## 9C.5 複合フェルミオン描像

ラフリン状態 ( $\nu = 1/q$ ) では、電子は互いに距離を置こうとするので、ある電子の近傍だけ見れば、一様な磁場中に 1 個の電子があるように見える。 $\nu = 1$  のランダウ準位では、ちょうど 1 個の電子あたりに 1 量子磁束  $\Phi_0$  分の磁場がかかっているので、このラフリン状態では 1 個の電子あたりの磁束量子の数は  $q$  である。そこで、このような電子を、偶数 ( $2k$ ) 本の量子磁束を元々持っている「粒子」と考えてみる。このような粒子はラフリン波動関数に戻って考えればフェルミ統計に従うので、複合フェルミオン (composite fermion, CF) と呼ぶ。「複合フェルミオン」が感じる磁場は、磁束  $q - 2k$  本分ということになる。

すなわち、 $q - 2k = 1$  は CF の占有率を  $n$  として  $n = 1$  の IQH 状態とみなせる。同様に、 $1/(q - 2k) = n > 1$  の場合、 $n$  が整数のところではやはり IQH 状態が生じる。これらは、CF が広がった状態であるから、すなわち、電子波動関数が広がった状態であると考えられる。この時、元の電子の占有率  $\nu$  は

$$\nu = \frac{1}{q} = \frac{1}{2k + 1/n} = \frac{n}{2kn + 1} \quad (9C.11)$$

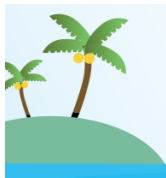
である。これは、 $k = 1$  に対して  $2/5, 3/7, 4/9, \dots$  という比較的観測されやすい FQH 系列を与える。更に、これらを次の基底状態とすることで、観測された FQH 状態を説明できる。すなわち、電子の FQH を CF の IQH として解釈することができる。 $\nu = 1/2$  まわりの  $\rho_{xx}$  が対称で電子のゼロ磁場状態に近く見えるのも、CF の SdH 振動として解釈することができる。

\*5 もちろん、これは  $\prod_i (z_i - z_0)$  とすれば、任意の点  $z_0$  にゼロ点を導入できる。

## 参考文献

---

- [1] K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [2] Z. F. Ezawa, “Quantum Hall Effects: Recent Theoretical and Experimental Developements”, (World Scientific, 2013).
- [3] M. Büttiker, Phys. Rev. B **38**, 9375 (1988).
- [4] M. Kohmoto, Ann. Phys. **160**, 343 (1985).
- [5] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [6] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).
- [7] D. J. Thouless, “Topological Quantum Number in Nonrelativistic Physics” (World Scientific, 1998).



## 第10章 スピントロニクス

今回は、「半導体」の最終回である。半導体スピントロニクスについて話をして終わりたいと思う。短い講義時間ではあるが、半古典的な扱いによるスピントロニクス、続いてスピン軌道スピントロニクス、スピンホール効果とトポロジカル絶縁体について考えたい。

### 10.1 スピン輸送の古典論

#### 10.1.1 スピントロニクスとは

これまで、半導体中の電子の輸送現象について、古典的そして量子的なものをいろいろと見てきた。電子は、電荷とスピンに伴う磁気モーメント、角運動量を持っているので、電子の移動に伴い、電荷以外にスピン角運動量も移動する。しかし、スピンのクラマース縮退を起こして、1つの空間移動自由度に対して2つのスピン自由度が縮退して存在していれば単一電子では角運動量が移動していても、多数電子の移動を考えれば全体としての角運動量移動は消滅し、考慮の対象外であった。電子が電荷モノポールであるために、その流れと蓄積を制御することでエレクトロニクスが大発展し、それが可能になる半導体という物質がその中心として活躍した。しかし、その微細化・高速化・低エネルギー消費化が限界に達しつつある今、電子の内部自由度であるスピンを情報蓄積・操作に使用しよう、というのがスピントロニクスである [1]。

元より、情報蓄積にはスピンの多体効果によって凍結した例である磁気ディスクやテープが使用されていたが、その読み出しに磁性多層膜やスピンバルブを用いた巨大磁気抵抗 (Giant magnetoresistance, GMR) 素子が使用されるようになり、「スピントロニクス」という言葉が次第に使われるようになった。

半導体がなぜエレクトロニクスの中心であったかと言えば、逆説のようであるがまずは、絶縁体であるからである。乱れのない結晶状態で電子が存在しない状況であることが最も重要であり、金属中で制御性良く電流を遮断するのは絶縁体中に伝導を導入するより数倍難しく、金属のエレクトロニクスでの役割は主に配線材であった\*1。一方、スピントロニクスにおいては、常磁性金属中にはスピンの存在せず、基本的に「真空」状態である。ある意味、常磁性金属もスピントロニクスでは半導体であり、半導体物理学の対象であるとも言える。

以上は決して牽強付会なたとえや言葉の遊びではない。エレクトロニクスにおいては、金属中にはその強力な遮蔽力により、ほとんど電場、すなわち化学ポテンシャルの傾斜が存在しない。これに対して、強磁性体との接触面に電流を流すと、スピンによって化学ポテンシャルが分離する、ちょうど半導体で準フェルミ準位が電子、正孔のそれぞれに付属して存在したことに対応する状況が生じる。また、金属中でもスピン流によって化学ポテンシャルの傾斜が発生するので、外部の測定回路には電圧として認識される。従って、半導体で見えてきた様々な物理が、形は少々異なるが、常磁性金属中のスピントロニクスでも発生する可能性がある。

\*1 しかし、電子回路、という概念そのものの成立は金属という物質の存在によっている。詳しくは、講師の「電子回路論」講義ノート第1回を見よ。



## 10.1.2 2 電流モデル

モット (Nevil Mott) が提唱したことになっている 2 電流モデル (two current model) は、電流をアップスピン ( $\uparrow$ ) とダウンスピン ( $\downarrow$ ) によるものに分けて考えるもので、伝導を決める様々な散乱に比べてスピン反転散乱頻度が十分低ければ成立する。スピンサブバンドを分離した場合  $\rho$  が  $\uparrow, \downarrow$  で異なるのは、状態密度や  $k_F$  などのパラメーターが異なるためである。  $\uparrow, \downarrow$  スピンチャンネルの抵抗をそれぞれ  $\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}$  とすると、全体の電気抵抗  $\rho$  は、  $1/\rho = 1/\rho_{\uparrow} + 1/\rho_{\downarrow}$  で求められる。拡散的伝導体では、磁性体・非磁性体とも、スピン拡散長が平均自由行程より長く ( $\lambda_F \gg l_F$ )、良く成立すると考えられる一方、弾道的伝導では、特にスピン軌道相互作用が強い場合、2 電流モデルの適用には問題がある。本節では古典伝導を扱い、2 電流モデルに立脚して考える。

ドルーデ伝導度を各スピンサブバンドに適用し、スピンごとに適用し、各スピンサブバンドの伝導度が  $\sigma_s = e^2 n_s \tau_s / m_s^*$  ( $s = \uparrow, \downarrow$ ) と求められる。全電流密度は  $\mathbf{j}_c$  はそれぞれ  $\uparrow$  と  $\downarrow$  スピン電子チャンネルの電流密度の和  $\mathbf{j}_{\uparrow} + \mathbf{j}_{\downarrow}$  で与えられ、その差分の  $\mathbf{j}_{p\uparrow} = \mathbf{j}_{\uparrow} - \mathbf{j}_{\downarrow}$  だけスピン偏極した電流が流れる。このスピン偏極電流 (spin-polarized current) 密度のスピン偏極度を次で定義する。

$$P_c = \frac{|\mathbf{j}_{\uparrow} - \mathbf{j}_{\downarrow}|}{|\mathbf{j}_{\uparrow} + \mathbf{j}_{\downarrow}|} = \frac{j_{p\uparrow(\downarrow)}}{j_c}. \quad (10.1)$$

各電流をドリフト項、拡散項に分けると次のようになる。

$$\mathbf{j}_{ps} = \sigma_s \mathbf{E} - e D_s (-\nabla \delta n_s). \quad (10.2)$$

## 10.1.3 スピン依存電気化学ポテンシャル

スピン注入 (あるいは流出) などによってスピンサブバンド間に非平衡が生じている場合でも、各サブバンド内のキャリア間散乱は十分頻繁で、局所的な熱平衡が保たれているとし、各スピンサブバンドの局所フェルミ運動エネルギー  $\epsilon_s$ 、熱平衡からのずれ  $\delta \epsilon_s$  を定義する。簡単のため、伝導度テンソル  $\sigma_s$  をスカラー  $\sigma_s$  で置き換える。静電ポテンシャル  $\phi$  を使って  $\mathbf{E} = -\nabla \phi$  と書き、アインシュタインの関係式  $\sigma_s = e^2 N_s(E_F) D_s$  (これは金属を考慮して低温極限から得られたものである)、  $\delta n_s = N_s(E_F) \delta \epsilon_s$  を用いることで、次を得る。

$$\mathbf{j}_{ps} = -\frac{\sigma_s}{e} \left[ e \nabla \phi - \frac{D_s \nabla \delta n_s}{\sigma_s} \right] = \frac{\sigma_s}{e} [-e \nabla \phi + \nabla \delta \epsilon_s]. \quad (10.3)$$

2 電流モデルの適用により各スピンに対しての局所電気化学ポテンシャル

$$\mu_s = -e \phi + \epsilon_s \quad (10.4)$$

が定義でき、各スピンサブバンドの電流密度は、これにより、

$$\mathbf{j}_{ps} = -\frac{\sigma_s}{-e} \nabla \mu_s \quad (10.5)$$

と表される。(以下電気化学ポテンシャル、は化学ポテンシャルと略記)

## 10.1.4 スピン流

スピン角運動量の流れ、スピン流 (spin current) の定義として、

$$\mathbf{j}^s(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2(-e)} (\mathbf{j}_{\uparrow} - \mathbf{j}_{\downarrow}) \quad (10.6)$$

が考えられる。スピン流は、本来局所スピン密度を示すベクトルと流れを示すベクトルにより構成されるテンソルであるが、ここでは、簡単のためスピン角運動量の磁化方向 ( $z$  方向とする) 成分の流れとしてスピン流を考えている。

また、一般には、ここで考えた電子の流れに伴うスピン流以外に、スピン波など交換相互作用によって流れるスピン流もある。

局所スピン角運動量密度を  $\mathbf{s}(\mathbf{r}, t)$ 、その  $z$  方向成分を  $s_z$  と置くと、スピン角運動量保存則は

$$\frac{\partial s_z}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j}^s = 0 \quad (10.7)$$

となる。スピン緩和が存在する場合は、(10.7) の右辺に緩和項を考える必要がある。緩和時間近似を用いると、

$$\frac{\partial s_z}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j}^s = \frac{\partial s_z}{\partial t} + \frac{\hbar}{2(-e)} \nabla \cdot (\mathbf{j}_\uparrow - \mathbf{j}_\downarrow) = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{\delta n_\uparrow}{\tau_\uparrow} - \frac{\delta n_\downarrow}{\tau_\downarrow} \right). \quad (10.8)$$

これに対して電荷  $\rho$  の保存則は次のようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_\uparrow + \mathbf{j}_\downarrow) = 0. \quad (10.9)$$

定常状態では、 $\partial \rho / \partial t = \partial s_z / \partial t = 0$  である。また、緩和時間  $\tau_\uparrow$  と  $\tau_\downarrow$  は、系全体としてスピン反転が生じていないという条件から、フェルミ準位状態密度  $N_s$  を使った詳細釣り合い

$$N_\uparrow \tau_\downarrow = N_\downarrow \tau_\uparrow \quad (10.10)$$

の関係にある。これらと、式 (10.8)、(10.9) より

$$\nabla^2 (\sigma_\uparrow \mu_\uparrow + \sigma_\downarrow \mu_\downarrow) = 0, \quad (10.11a)$$

$$\nabla^2 (\mu_\uparrow - \mu_\downarrow) = \frac{1}{(\lambda_{sf}^F)^2} (\mu_\uparrow - \mu_\downarrow) \quad (10.11b)$$

が得られる。平均スピン拡散長  $\lambda_{sf}^F$  は  $\uparrow, \downarrow$  スピンの拡散長  $\lambda_\uparrow^F, \lambda_\downarrow^F$  を用いて  $(\lambda_{sf}^F)^{-2} = (\lambda_\uparrow^F)^{-2} + (\lambda_\downarrow^F)^{-2}$  により定義する。(10.11b) は拡散方程式の形式になっており、スピン拡散方程式 (spin diffusion equation) と呼ばれる。

## 10.2 スピン注入と緩和

半導体中に光照射や pn 接合への順方向バイアス印可などによって少数キャリアを注入したのと同様、常磁性体中にスピンを注入する様々な方法が存在する。ここでは特に、強磁性体から常磁性体へのスピン注入 (spin injection) について述べる。少数キャリアの場合と同様、スピン注入は界面で生じ、バルク内部へ広がりつつ消滅 (緩和) する。

強磁性 (FM)-常磁性 (NM) の界面に垂直に電流  $j_c$  を流している状況を考える。FM, NM 各領域でのスピン  $s$  に依存する局所化学ポテンシャル (式 (10.5)) を、次のように書いてみる。

$$\mu_s^M = a^M + b^M x \pm \frac{c^M}{\sigma_s^M} \exp\left(\frac{x}{\lambda_{sf}^M}\right) \pm \frac{d^M}{\sigma_s^M} \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{sf}^M}\right). \quad (10.12)$$

ここで、M は、F(強磁性) または N(常磁性) の各領域を表す。  $x$  軸は面垂直方向に、界面を原点に取り、常磁性体側を正とする。  $\pm$  の複号は、+ が  $\uparrow$ 、- が  $\downarrow$  に対応している。右辺第 1, 2 項はスピンによらない部分で、この 2 項の和を  $\mu_0$  と書く。第 3, 4 項は、スピン依存部分が拡散方程式 (10.11) に従うことからこのように置いた。式 (10.12) が、(10.11) を満たしていることは容易に確認される。

係数  $a \sim d$  は以下の条件から決定する。2 電流模型は界面を通して成立しているとする、各スピンサブバンドで局所化学ポテンシャル  $\mu_s$  は界面でも連続、すなわち  $\mu_s^F(-0) = \mu_s^N(+0)$  である。  $\mu_0$  は  $\uparrow, \downarrow$  間に非平衡が生じている界面では連続である必要はないが、  $|x| \rightarrow \infty$  で界面から離れるに従い、FM, NM の両側で  $\mu_\uparrow, \mu_\downarrow$  の差はなくなり  $\mu_0$  に漸近するので、  $d^F = 0, c^N = 0$  である。また、式 (10.5) のスピンサブバンドの電流の和は全電流密度  $j_c$  と

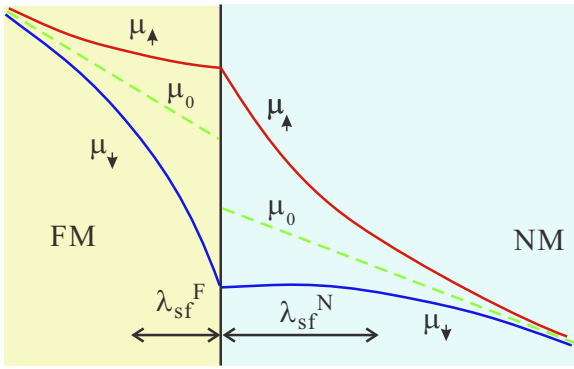


図 10.1 FM-NM 界面に FM 側から電子が流れるような電流の下でのスピン依存化学ポテンシャルの空間変化模式図。

なる。以上から F 中の状態密度スピン偏極  $P_F$  を用いて  $\mu_s^M$  は次のように得られる。

$$\mu_s^F = \frac{(-e)j_c}{\sigma^F} x \mp \frac{(-e)j_c P_F \lambda_{sf}^N (1 - P_F^2) \sigma^F}{2\sigma_s^F \sigma^N \left[ 1 + (1 - P_F^2) \frac{\sigma^F \lambda_{sf}^N}{\sigma^N \lambda_{sf}^F} \right]} \exp\left(\frac{x}{\lambda_{sf}^F}\right), \quad (10.13a)$$

$$\mu_s^N = \frac{(-e)j_c}{\sigma^N} x + \frac{(-e)j_c P_F \lambda_{sf}^N}{\sigma^N \left[ 1 + (1 - P_F^2) \frac{\sigma^F \lambda_{sf}^N}{\sigma^N \lambda_{sf}^F} \right]} \left[ 1 \mp \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{sf}^N}\right) \right]. \quad (10.13b)$$

複号上下は  $\uparrow, \downarrow$  に対応する。平衡状態 ( $j_c = 0$ ) での化学ポテンシャルを 0 に取った。図示すると、図 10.1(a) のようになる。

### 10.2.1 スピン注入と検出

電気伝導の制御を行う舞台として、元来絶縁体である半導体が適しているように、スピン流の操作や制御にも磁性体より非磁性体の方が適しているが、そのためには pn 接合で見た「キャリアの注入」に相当する非磁性体へのスピン注入 (spin injection) が必要である。図 10.1 のようにスピン流と電流が重なると、電氣的測定では電流の直接的効果とスピン偏極効果の分離が難しいため、実際のスピン注入実験では、非局所配置が多く使用される。

例を図 10.2 に示した。パーマロイ (Py)1 と銅 (Cu) との間に電流  $j_c$  を流すと、界面で図 10.1(a) のように  $\mu_\uparrow$  と  $\mu_\downarrow$  が分離し、スピン蓄積が生じる。電流は Py2-Cu 間には流れないが、スピン拡散は電流とは関係なく生じ、スピン流は Py2 方向にも流れて Py2 電極に到達するため、これによって Py2-Cu 間に電気化学ポテンシャルの差が生じ、電圧として検出される。検出される電圧は、式 (10.13) とスピン拡散式 (10.11b) から、次のように計算される。

$$V = \pm \frac{1}{2} e j_c P_{Py}^2 \frac{\rho^{Py} \rho^{Cu}}{\rho^{Py} + \rho^{Cu}} \exp\left(-\frac{L}{\lambda_{sf}^{Cu}}\right). \quad (10.14)$$

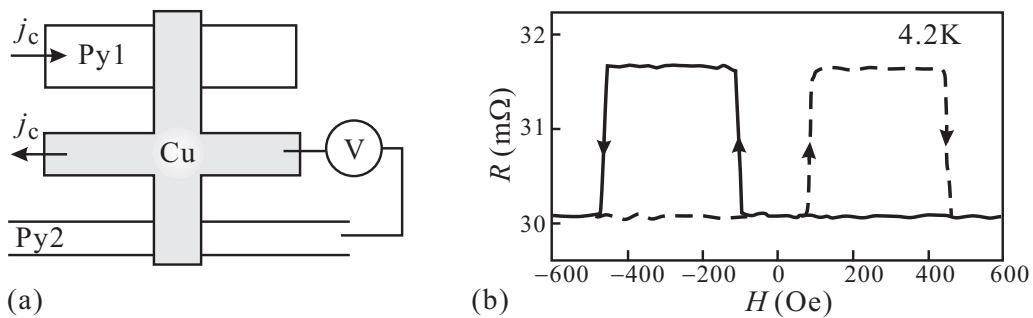


図 10.2 (a) スピン注入効果の非局所測定配置。電流  $j_c$  は Cu のクロス点を通して左へ抜けるが、Py1 より注入されたスピン流は Py2 へ達して界面にスピン蓄積することで  $\mu_0$  のステップを引き起こし、電圧  $V$  として検出される。(b) 測定された非局所抵抗。スピンバルブ的磁気抵抗は、Py1 と Py2 の形状の違いによる保磁力差によるもの。データは文献 [2] より。

図 10.2(b) が実験結果で, Py1 と Py2 は幅を変えてあるため, ストリップ方向の磁場に対する保磁力が違っており, これによってスピンの非局所磁気抵抗が現れている. 様々なパラメーター下の実験を (10.14) で解析することで,  $P_F$  や  $\lambda_{sf}$  などのパラメーターを得ることができる.

図 10.3(a) に半導体へのスピン注入で多用される非局所 4 端子配置の模式図を示した. 強磁性体を含む左側の 2 本の電極間に電流を流し, 右のやはり強磁性体電極を含む電圧端子でスピン流によって生じた電気化学ポテンシャル差を測定する. このような針状薄膜電極では, 外部磁場による磁化反転は, 形状磁気異方性のために電極の長手方向に磁場を印加して行う. 一方, 注入されるスピンの垂直な方向に磁場を印加すると, スピン磁気モーメントは歳差運動を生じる (付録 J). この時, 仮に電子がすべて完全にコヒーレントに回転し, 電子がスタートする位置も完全に揃っているとすると, 検出電圧はこの回転角度に応じて振動する. 拡散過程においては遍歴距離は広く分布する上に, 実際の試料では開始位置に幅があるから歳差回転が進むにつれて振動は急速に減衰する. これを Hanle 効果 (Hanle effect) と呼ぶ.

常磁性体中での  $x$  軸方向 1 次元のスピン拡散を考えると, 10.1 節の議論で,  $\sigma_s$ ,  $D_s$ ,  $\tau_s$  などのスピン依存が落ちる. (10.2) で, 非局所測定で拡散流のみであることを考え, ドリフト項を落とし, (10.8) の緩和時間近似を適用すると, 次のスピン拡散方程式

$$\frac{\partial s_z}{\partial t} = D \frac{\partial^2 s_z}{\partial x^2} - \frac{s_z}{\tau_{sf}} \quad (10.15)$$

が得られる. これによって Hanle 信号は

$$\Delta V = \pm \frac{j_c P_j^2}{e^2 N_{SC}} \int_0^\infty dt \varphi(t) \cos \omega t, \quad (10.16)$$

$$\varphi(t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{d^2}{4Dt}\right) \exp\left(-\frac{t}{\tau_{sf}}\right)$$

と書くことができる. ここで,  $d$  は注入電極と検出電極の距離,  $P_j$  は接合直下でのスピン偏極で,  $\omega = g\mu_B B/h$  はラーモア周波数 (付録 J) である.

図 10.3(b) に示したのは, Si に Fe 電極を用いてスピン注入を行い, Hanle 信号を測定したもので, (10.16) を用いてフィットすることができる. ここから  $\lambda_{sf}$  などのパラメーターを得ることができる.

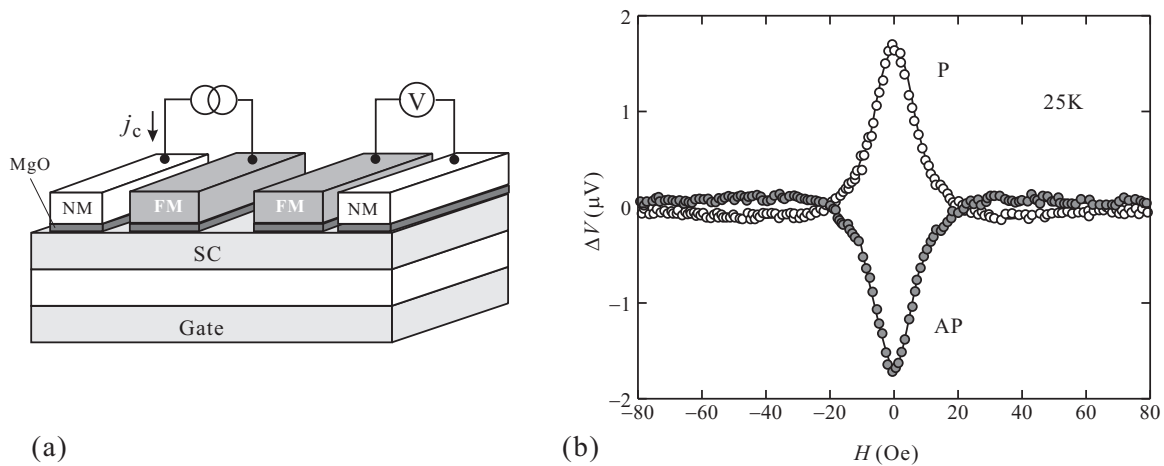


図 10.3 (a) 半導体 (SC) へのスピン注入を 4 端子非局所効果で検出するための電極配置. 左の強磁性体 (FM) と常磁性体 (NM) 間に電流  $j_c$  を流すことで, スピン流は右方向へも流れ, 右の FM 電極と NM 電極に生じる電気化学ポテンシャル (電位) 差として検出される. 注入効率を上げるため, MgO などの絶縁体障壁が用いられる. (b) 左と類似の構造で Si にスピン注入して面垂直磁場によってスピン歳差運動を生じさせて観測された Hanle 信号. 文献 [3] より.

## 10.3 スピン軌道相互作用

ここからは、電荷キャリアの意味で「半導体」に特有のスピン트로ニクスに入っていこう。スピン軌道相互作用 (spin-orbit interaction, SOI) については  $k$ - $p$  摂動の際に、特に III-V 族のような fcc 系半導体について導入されたと思う。SOI は、スピン트로ニクスにおいては、スピン自由度と軌道自由度従って電荷との間を結合するものとして重要である。ここで、特に価電子帯で強かった SOI が、伝導帯との混じりを通して伝導帯でも重要になる場合を見ておきたい。2次元電子系で代表的な2つのスピン軌道相互作用について考える。

### 10.3.1 バルク反転非対称, 構造反転非対称によるスピン-軌道分裂

結晶格子に空間反転対称性があると、 $\mathbf{k}$  と  $-\mathbf{k}$  の状態は縮退している。↑スピンを例にとると、 $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \uparrow)$ 。一方、磁性などが無い場合結晶系は時間反転対称性を持っているが、時間反転操作によって  $-\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}$  となると同時にスピンも反転する。この2つの縮退を合わせると、 $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(\mathbf{k}, \downarrow)$  であるから、空間反転対称性がある結晶では  $\mathbf{k}$  が有限であってもスピンによるエネルギーの分裂は生じない。

閃亜鉛鉱型の結晶形を見ると、[111] 方向に反転対称性がないことが明らかであり、エネルギー分散にスピン軌道相互作用に起因するスピン分裂が生じる。このような結晶形の反転非対称をバルク反転非対称 (bulk inversion asymmetry, BIA) という。BIA によって発生するスピン軌道相互作用をドレッセルハウススピン軌道相互作用 (Dresselhaus spin-orbit interaction) と呼ぶ。ドレッセルハウス相互作用は、BIA を考慮した  $k \cdot p$  摂動 (関連図書 [4], 文献 [5]) から導かれる。

$\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  の非対称による効果であるから、相互作用は、 $\mathbf{k}$  の奇数次の形をとるが、3次元のドレッセルハウス相互作用は  $\mathbf{k}$  の3次で与えられ、ハミルトニアンは [100], [010], [001] を  $xyz$  として、

$$\mathcal{H}_{\text{DSO}}^{3\text{d}} = \gamma \hbar^2 [k_x(k_y^2 - k_z^2)\sigma_x + k_y(k_z^2 - k_x^2)\sigma_y + k_z(k_x^2 - k_y^2)\sigma_z] \quad (10.17)$$

という形をしている。このような半導体に (001) 面に平行な2次元電子系を形成したとすると、 $z$  方向の自由度は平均化され、一部  $k$  の1次の項が現れる。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{DSO}}^{2\text{d}} &= \gamma \hbar^2 [k_x(k_y^2 - \langle k_z^2 \rangle)\sigma_x + k_y(\langle k_z^2 \rangle - k_x^2)\sigma_y] \\ &= \beta(k_y\sigma_y - k_x\sigma_x) + \gamma \hbar^2 (k_x k_y^2 \sigma_x - k_y k_x^2 \sigma_y). \end{aligned} \quad (10.18)$$

結晶形に由来する BIA に対し、ヘテロ接合のような周期性を破る構造の導入によっても反転対称性は失われる。これを構造反転非対称 (structure inversion asymmetry, SIA) と呼ぶ。接合面の SIA によって導入されるスピン軌道相互作用をラシュバスピン軌道相互作用 (Rashba spin-orbit interaction) と呼ぶ [6, 7]。ラシュバ相互作用は、界面に垂直 ( $z$  方向) に電場  $\nabla V$  が生じていると考え、式 (2.56) より

$$\mathcal{H}_{\text{RSO}} = \alpha \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_z) = \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) \quad (10.19)$$

となる\*2。注意すべきは「電場  $\nabla V$ 」である。この  $V$  は周期ポテンシャル以外に電子に働く (バンド不連続等によるものも含めた) 力すべてであり、伝導電子を2次元面に閉じ込めているものであるから、電子が2次元面に束縛されているということは  $z$  方向の重心運動に関するエーレンフェストの定理によって、 $z$  方向の  $\nabla V$  の期待値平均はゼロ、 $\langle (\nabla V)_z \rangle = 0$  である [8]。従って、電子系にかかる電場  $\nabla V$  によってラシュバ相互作用を導入することはできない。

$k \cdot p$  摂動のところで見たように、有限な  $\mathbf{k}$  によって伝導帯電子波動関数への価電子帯波動関数が混じりこむことによりスピン軌道相互作用が生じていた。その際には、伝導帯・価電子帯に共通のポテンシャル  $V$  を導入したが、両者

\*2 これから、「電場が生じていることは2次元電子系の両側に電荷が発生している事を意味し、電子と一緒に動く座標系からは環電流が生じていて磁場を発生し、その効果がラシュバ相互作用である」という直感的説明がしばしばなされるが、以下に見るようにこの説明は不正確である。

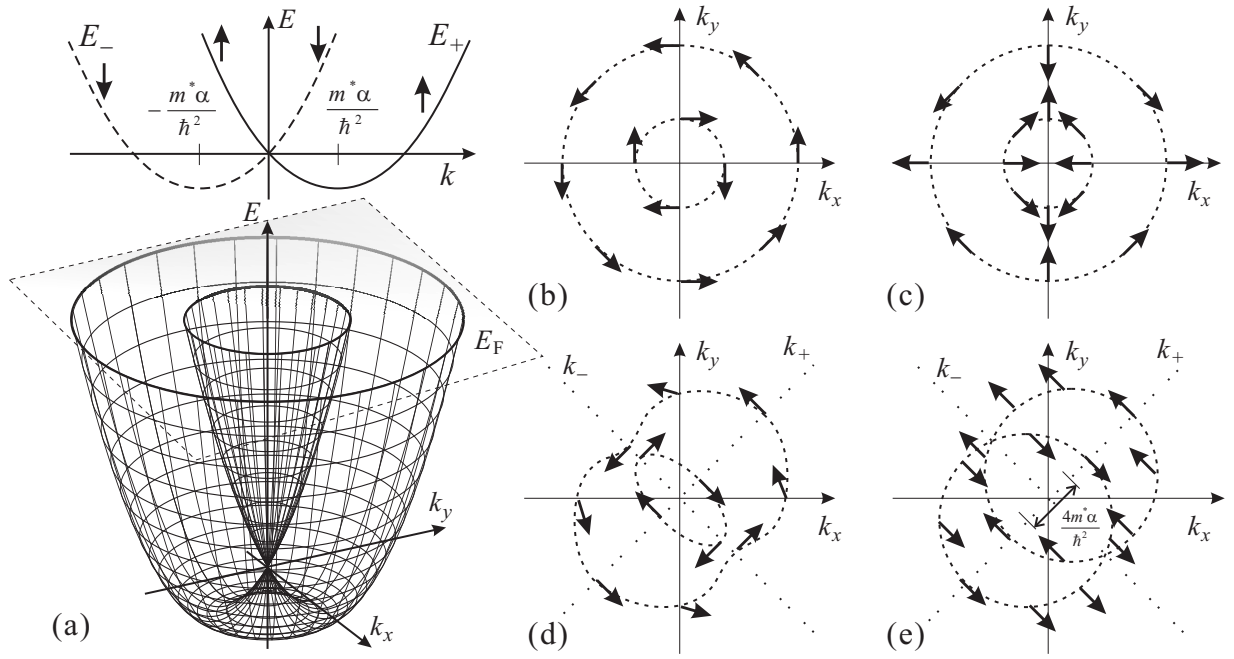


図 10.4 (a) 上: ラシュバ相互作用がある場合のエネルギー分散 (10.20) を描いたもの.  $+\pi/2$  のスピンを上向きとして描いている. 下:  $k_x - k_y$  平面上にエネルギー分散を 3 次元的に描くとこのワイヤフレーム表示のようになる. (b) 以降の図は,  $E_F$  の面での切り口を描いている. (b)  $\beta = 0$  (ラシュバ模型) の場合, 2 つのフェルミ円 (短い破線) 上でのスピンの向き. (c)  $\alpha = 0$  (ドレッセルハウス模型) の場合. (d)  $\alpha, \beta$  が有限で,  $\alpha \neq \beta$  の場合. (e)  $\alpha = \beta$  の場合.

でバンド不連続が異なれば  $V$  も異なり, 伝導帯で  $(\nabla V)_z = 0$  であれば, 価電子帯は  $(\nabla V)_z \neq 0$  となり, これを通してラシュバスピ軌道相互作用が生き残る. 伝導帯・価電子帯でそれぞれ  $V_c, V_v$  を考えて SOI を表す式を導出すると,  $\nabla V/e$  を  $\nabla V_v/e$  で置換したものが得られる. 実験では, 狭ギャップの InGaAs の 2 次元系などで, ラシュバ相互作用に起因すると考えられる現象が多く見つかっており, 価電子帯の効果と考えられる.

ラシュバ相互作用 (10.19) とドレッセルハウス相互作用 (10.18) の内の 1 次の項のみ存在する 2 次元電子系を考える. 軌道部分は, 波数  $\mathbf{k} = (k \cos \varphi, k \sin \varphi)$  を持つ平面波とすると, スピン軌道部分ハミルトニアンは次のようになる.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{SO}} &= \alpha \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{k}_x + \hat{k}_y \\ i\hat{k}_x + \hat{k}_y & 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & -\hat{k}_x - i\hat{k}_y \\ -\hat{k}_x + i\hat{k}_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= \alpha k \begin{pmatrix} 0 & ie^{-i\varphi} \\ -ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} - \beta k \begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

$\beta = 0$  (ラシュバ系) の場合, スピン部分を  ${}^t(1, e^{i\phi})/\sqrt{2}$  と置くと, 固有関数条件より  $\phi = \varphi \pm \pi/2$ , すなわち波数ベクトルとスピンは直交し,  $\pm\pi/2$  に対応する固有エネルギー  $E_{\pm}$  は有効質量近似により

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \mp \alpha k = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( k \mp \frac{m^* \alpha}{\hbar^2} \right)^2 - \frac{m^*}{2\hbar^2} \alpha^2 \quad (10.20)$$

と, スピンの向きによって分散が  $k$  空間でシフトする. 分散は図 10.4(a) のような形状になり,  $E_F$  での断面では, 同心円状の 2 つのフェルミ円が生じる. 条件より, フェルミ円上各点でのスピンの向きは, 図 10.4(b) のように互いに逆向きの渦巻き状になる.  $\alpha = 0$  の場合も同様に,  $\phi = -\varphi, -\varphi + \pi$  が得られ, エネルギー分散も式 (10.20) で  $\alpha$  を  $\beta$  で置き換えるだけで同形となる. ただし,  $\mathbf{k}$  をフェルミ円に沿って回転させるとスピンは  $\mathbf{k}$  とは逆の方向に回転するので, 図 10.4(c) のような形状となる.

$\alpha$  と  $\beta$  の両方が存在する場合, 一般には図 10.4(d) のように, スピンも分散も面倒な形になる.  $\alpha = \beta$  の場合,  $\mathcal{H}_{\text{SO}} = \alpha(\hat{k}_x + \hat{k}_y)(\sigma_x - \sigma_y)$  と, 波数部分とスピン部分が分離され, それぞれ,  $k_{\pm} = \frac{k_y \pm k_x}{\sqrt{2}}, \chi_{\pm} = \pm {}^t(1/\sqrt{2}, (i-1)/2)$  と波数, スピン波動関数を回転させると, ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (\hat{k}_+^2 + \hat{k}_-^2) - 2\alpha \hat{k}_+ \sigma'_z \quad (10.21)$$

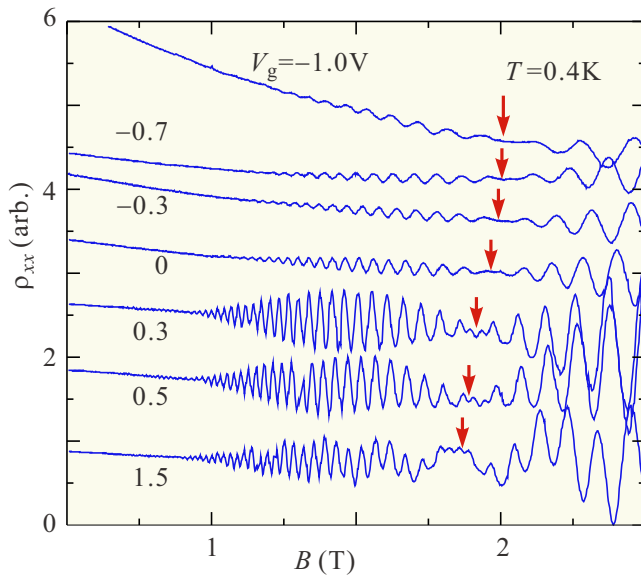


図 10.5 In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As 量子井戸中の 2 次元電子系で SdH 振動を測定したもの。2 次元電子系表面のゲート電極に加える電圧  $V_g$  を変化させている。矢印はビートの谷の位置を示した。[9] より。

と書ける。 $\sigma'_z$  は  $\chi_{\pm}$  を基底とした表示でのパウリ行列である。波数とスピンの分離しているため、スピン部分の固有関数  $\chi_{\pm}$  を決めると、分散関係は通常のパラボラになるが、 $\chi_+$ 、 $\chi_-$  に依存してパラボラの中心位置が  $k_+$  軸方向に  $\pm 2m^*\alpha/\hbar^2$  だけシフトする。従って、図 10.4(e) のように、スピンの向きに応じて 2 つの独立なパラボラが存在し、2 つのフェルミ円は中心がシフトし、一部重なり合った形になる。

### 10.3.2 スピン軌道相互作用と SdH 振動

ラシュバ相互作用が強くて  $\beta$  が無視できるような 2 次元電子系では、図 10.4(b) のように 2 つのフェルミ円が存在している。このような系で SdH 振動を測定すると、フェルミ円の大きさは  $1/B$  プロットの周期に反映されるから、2 種類の大きさのフェルミ円が存在するということは、2 種類の SdH 振動周期が共存することを意味し、従ってこれらの振動間にビート（うなり）を生ずるはずである。しかも、これらのフェルミ円の大きさの差は (10.19) の  $\alpha$  従って  $\langle \mathcal{E}_{zv} \rangle$  に比例するから、ビートの周期は 2 次元電子系（の価電子帯）に外部から加えた電場によっても変化するはずである。

図 10.5(a) は、InP 基板に成長した (In,Ga)As の量子井戸中の 2 次元電子系で測定した SdH 振動である。狭ギャップの InAs と比較的ギャップの大きな GaAs では格子定数に大きな差があるが混晶にして In 組成を 0.53 とすることで InP 基板に格子整合し、更に Al を混晶に加えることでヘテロ接合を形成できる。SdH 振動には明瞭なビートが現れており、矢印で示したビートの谷の位置がゲート電圧によってシフトする、ラシュバ相互作用に期待される特徴が現れている。

## 10.4 スピンホール効果とトポロジカル絶縁体

### 10.4.1 スピンホール効果

スピンホール効果 (spin Hall effect) は、スピン軌道相互作用のある系に電場を加えるとこれと垂直方向にスピンの流れが発生する現象である。スピンホール効果によるスピン流をスピン座標指数  $i$ 、流れの座標指数  $j$  に対して  $J_{ij}$  と書いて電場  $\mathbf{E}$  に対して

$$J_{ij} = \sigma_s \sum_k \epsilon_{ijk} E_k \quad (10.22)$$

と書くことができる。 $\epsilon_{ijk}$  は完全反対称テンソルで、スピン流のスピンと流れ、及び電場がそれぞれ互いに垂直であることを表す。 $\sigma_s$  をスピンホール伝導度と呼ぶ。

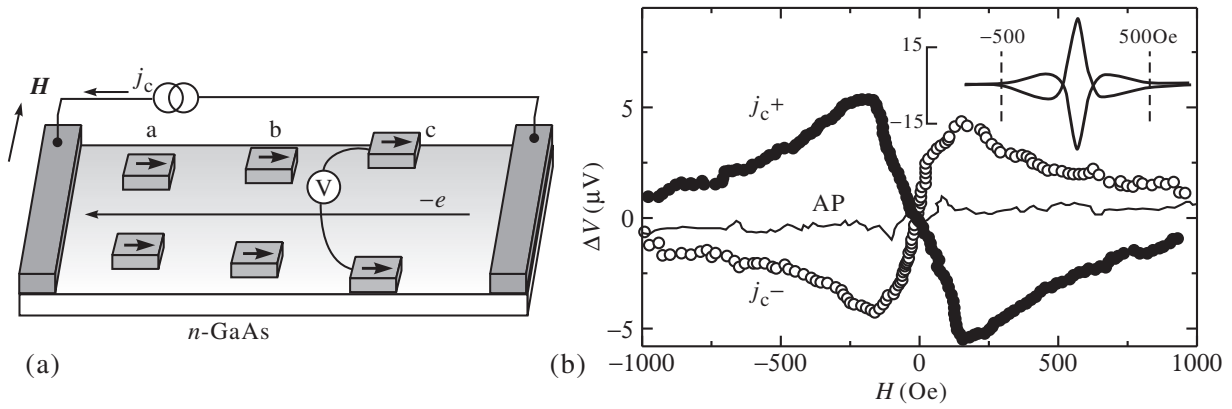


図 10.6 (a)  $n$  型 GaAs 試料の電極配置. 電流に垂直に対向した Fe 電極で, 試料端のスピンの蓄積を検出する. (b) 試料端から  $2\mu\text{m}$  にある電極でのスピンの蓄積信号. 電流密度は  $5.7 \times 10^3 \text{ A/cm}^2$ . 黒丸白丸は平行磁化配置に電流の向きを反転した結果, 実線は反平行磁化配置の結果. 挿入図は, 電極間の Hanle 効果測定. 温度は 30K.

スピンホール効果は不純物散乱, あるいはバンド構造に起因する軌道運動から SOI を通して発生する. 前者を外因性スピンホール効果, 後者を内因性スピンホール効果と呼ぶ.

ここでは, 時間の関係で詳しい説明を一切省略し, 実験例を紹介しよう. 図 10.6 は,  $n$  型の GaAs に電流を流し, スピンホール効果によって試料端に生じるスピンの蓄積を強磁性体電極に生じる化学ポテンシャル差として検出した実験である. 電流反転に追従して反転する明瞭なスピン信号 (反平行磁化配置ではほとんど何も現れない) が検出され, スピンホール効果が生じていることがわかる. 温度変化などの解析から, 外因性スピンホール効果が主に生じていると議論されている.

#### 10.4.2 異常速度とスピンホール効果

結晶中波束の運動を考える. 波束を結晶波数で分解し, 各ブロッホ状態成分について外力  $\mathbf{F} = -e\mathcal{E}$  ( $\mathcal{E}$  は電場) による  $\mathbf{k}$  の変化を調べる. この時, 結晶ハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  に対して, 波数  $\mathbf{k}$  をパラメーターとする「ブロッホハミルトニアン」  $\mathcal{H}_B(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathcal{H}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  を考えると, 固有関数は結晶周期関数  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  である.

この  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の世界から見ると,  $\mathbf{k}$  の変化は系 (ハミルトニアン) のパラメーターが変化しているように見える. これはベリー位相を考えた時と同じ状況であり, 断熱変化のパラメーターセット  $\mathbf{R}$  として結晶波数  $\mathbf{k}$  を取ったと見ることができる. この時, ベリー接続, ベリー曲率はそれぞれ

$$\mathbf{A}_n = i \left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right. \right\rangle, \quad \mathbf{B}_n(\mathbf{k}) = i \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \left| \times \right. \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \quad (10.23)$$

となる.

ブロッホ関数を  $|n\mathbf{k}\rangle$  と書き, 更にバンドは  $n$  に限定することにし, 指数  $n$  は略す. 今, 何らかの原因により式 (10.23) の諸量がゼロでなかったとすると, 座標演算子  $\hat{r}$  の  $\mathbf{k}$  表示は  $(\partial/\partial \mathbf{k})$  を  $\nabla_{\mathbf{k}}$  と表記して

$$\langle \mathbf{k} | \hat{r} | \mathbf{k}' \rangle = (i\nabla_{\mathbf{k}} + \mathbf{A}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

となる. これは磁場中の動的運動量が座標表示で  $-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$  と書かれることに対応している. これから

$$\langle \mathbf{k} | [\hat{x}, \hat{y}] | \mathbf{k}' \rangle = (i\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A})_z \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = iB_z \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

が得られる.  $\mathbf{F}$  による  $\hat{x}, \hat{k}_x$  演算子の時間変化を, ハイゼンベルク方程式  $d\hat{q}/dt = [\hat{q}, \mathcal{H}_0 - \mathbf{F} \cdot \hat{r}]/i\hbar$  とこれらの交換関係を用いて計算すると, 次のようになる.

$$\left\langle \mathbf{k} \left| \frac{d\hat{x}}{dt} \right| \mathbf{k}' \right\rangle = \left[ \frac{\partial E}{\partial k_x} - (\mathbf{F} \times \mathbf{B})_x \right] \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\hbar}, \quad \left\langle \mathbf{k} \left| \frac{d\hat{k}_x}{dt} \right| \mathbf{k} \right\rangle = F_x \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\hbar}.$$



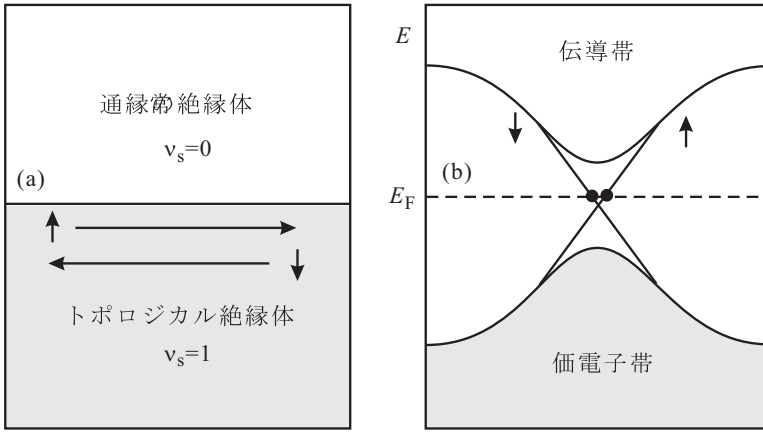


図 10.7 トポロジカル絶縁体概念図. (a)  $y < 0$  を 2 次元トポロジカル絶縁体が占め、ヘリカル端状態が 1 対生じている. 真空側は通常の絶縁体. 端状態の数に対応してトポロジカル絶縁体側のスピン・チャーン数は 1. (b) エネルギー図. 線形分散を持つヘリカル端状態が生じている [10].

以上の条件下で、波束  $f$  を、 $f = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle$  ( $a_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | f \rangle$ ) とブロッホ展開する.  $f$  の実空間、 $k$  空間での期待値  $\mathbf{r}_0$ 、 $\mathbf{k}_0$  の時間変化は、それぞれ、

$$\frac{d\mathbf{r}_0}{dt} = \mathbf{v} = \left\langle f \left| \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} \right| f \right\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle f | \mathbf{k} \rangle}{\hbar} (\nabla_{\mathbf{k}} E - \mathbf{F} \times \mathbf{B}) \langle \mathbf{k} | f \rangle \approx \frac{1}{\hbar} (\nabla_{\mathbf{k}} E - \mathbf{F} \times \mathbf{B})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}, \quad (10.24a)$$

$$d\mathbf{k}_0/dt = \mathbf{F}/\hbar \quad (10.24b)$$

となる. (10.24a) では、波束全体での平均を  $\mathbf{k}$  の期待値での値に置換した. 有効質量近似とは、(10.24a) の第 2 項がベリー曲率のため異なっており、これを異常速度 (anomalous velocity) と呼ぶ.

TKNN 公式より、フェルミ準位がバンドの間 (バンドギャップ内) にある絶縁体状態 (すなわち、フェルミ準位より下のバンドは完全に占有され、上のバンドは空) で、異常速度が存在する場合には  $\sigma_{xy} = \nu e^2/h$  よりホール伝導度が量子化されるが、通常は時間反転対称性がある場合はベリー曲率  $\mathbf{B}$  がゼロのため異常速度もなく、ホール伝導度は消える.  $\uparrow, \downarrow$  で系を分けて  $\sigma_{xy}^{\uparrow\downarrow}$  を考えると、定義 (10.6) より、 $\mathbf{j}^s = (\hbar/(-2e))(\sigma_{xy}^{\uparrow} - \sigma_{xy}^{\downarrow})E$ , 従って

$$\sigma_{xy}^s = \frac{\hbar}{-2e}(\sigma_{xy}^{\uparrow} - \sigma_{xy}^{\downarrow}) = \frac{-e}{4\pi}(\nu^{\uparrow} - \nu^{\downarrow}) = \frac{-e}{4\pi}\nu_s \quad (10.25)$$

である. ここで、 $\nu^{\uparrow\downarrow}$  は、各スピンサブバンドのチャーン数で、その差  $\nu_s$  は、スピン・チャーン数と呼ばれる. スピン・チャーン数が有限であるためには、各スピンサブバンドで磁場と同様な効果を与え、(10.25) がその差を取っていることから、スピンによってその有効「磁場」の効果が反転するようなものであれば良い. ラシュバ模型のような 1 次のスピン軌道相互作用がこの条件を満たしていることは明らかであり、このため、スピンホール効果が現れた、と解釈することができる.

### 10.4.3 量子スピンホール効果

上の議論は絶縁体についてのものであり、「各スピン電子の電流」について注意を要する [10]. 合計の電流はゼロでも各スピンの電流は流れることも考えられ、この場合、各スピンのホール伝導度は  $e^2/h$  単位で量子化される.  $xy$  平面の  $y < 0$  領域にこのような 2 次元電子絶縁体が存在する場合を考えると  $\Theta(x)$  をヘビサイド関数として、 $j_x^{\chi} = \Theta(y)\sigma_{xy}^{\chi}E_y$ ,  $j_y^{\chi} = -\Theta(y)\sigma_{xy}^{\chi}E_x$  であるから ( $\chi$  は  $\uparrow$  または  $\downarrow$ )、電荷連続の式は次のようになる.

$$\frac{d\rho^{\chi}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{j}^{\chi} = \frac{d\rho^{\chi}}{dt} - \delta(y)\sigma_{xy}\chi E_x = \frac{d\rho^{\chi}}{dt} - \delta(y)\nu^{\chi} \frac{e^2}{h} E_x = 0.$$

$\chi = \uparrow, \downarrow$  についての 2 つの式について辺々差を取り、系全体について空間積分することで、

$$\frac{dS_z}{dt} = L \frac{-e}{2\pi} \nu_s E_x$$

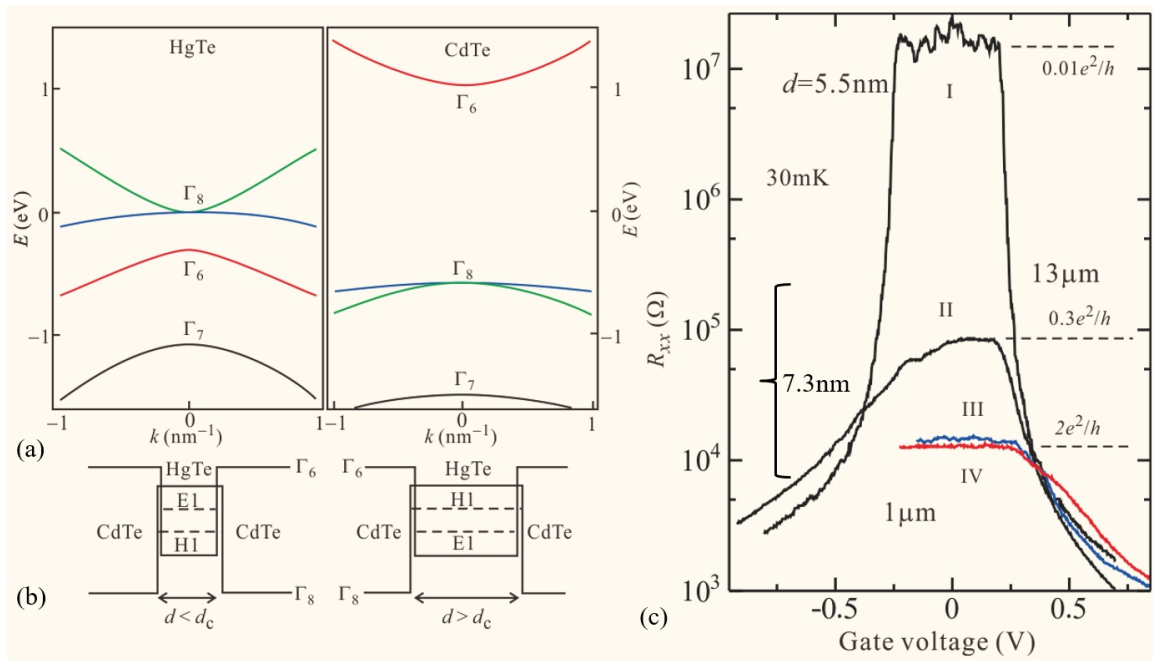


図 10.8 (a) HgTe と CdTe の  $\Gamma$  点付近バンド構造.  $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$  は空間群によるバンドの対称性を表すもので, Koster 記号と呼ばれる. (b) E1, H1 サブバンド位置の模式図. (c) CdTe/HgTe/CdTe 量子井戸の電気抵抗をゲート電圧の関数として調べた. ゲート電圧はフェルミ準位がギャップの中心に来る位置から測定. 井戸幅は I : 5.5 nm, II, III, IV : 7.3 nm. 電極間隔は I, II が  $13 \mu\text{m}$ , III, IV が  $1 \mu\text{m}$ .

が得られる. ただし,  $S_z$  は系全体のスピンの  $z$  成分,  $L$  は  $y = 0$  の所の端の長さである. これからわかるように, 端に特別なことを考えないと  $S_z$  の保存則が満たされなくなる.

そこで, 量子ホール効果の時と同様端状態を考えるが, 全体で電荷を運ばないはずなので, 境界上で互いに逆向きに速度とスピンを持った 2 つの端状態 (ヘリカル端状態 (helical edge state)) を考える. その分散を  $E_k^{\uparrow\downarrow} = \pm v(\delta k_x - eE_x t)$  ( $\uparrow$ : +,  $\downarrow$ : -,  $\delta k_x = k_x - k_F$ ) とする. これによって単位時間内に変化する粒子数は  $\delta N_{\uparrow\downarrow} = \pm eE_x L / 2\pi$  であるから,

$$\frac{dS_z}{dt} = \frac{1}{2}(\delta N_{\uparrow} - \delta N_{\downarrow}) = L \frac{e}{2\pi} E_x.$$

2 つの式を比較することで, 全体として  $dS_z/dt = 0$  とすると, ヘリカル端状態の数がスピン・チャーン数と一致することがわかる.

このような絶縁体を, 量子スピンホール絶縁体, あるいはトポロジカル絶縁体 (topological insulator) と呼んでいる. スピン・チャーン数も整数であるから, 式 (10.25) よりトポロジカル絶縁体のスピンホール伝導度は  $e/4\pi$  を単位に量子化されている.

#### 10.4.4 トポロジカル絶縁体量子井戸

量子スピンホール効果トポロジカル絶縁体を初めて検証した実験について紹介して本講義を終了することにする. この実験の後, 十数年の間に数多くのトポロジカル絶縁体が発見され, トポロジカル物質も絶縁体ばかりではなく, ディラック半金属, ワイル半金属のようなものも見いだされ, 磁性を持つものなど広範囲に研究展開されている. また, 「量子スピンホール効果」とわざわざつけたのは, すでに長い歴史を持つ量子ホール絶縁体もトポロジカル絶縁体の一種と考えられることから, 人間が初めて発見したトポロジカル絶縁体は量子ホール絶縁体というべきだからである.

図 10.8 に実験のセットアップ, 測定結果を示した. トポロジカル絶縁体物質として, HgTe を用いる. その薄膜を CdTe 障壁層で挟むことで量子井戸とする. 図 10.8(a) に閃亜鉛鉱型を仮定しスピン軌道相互作用を含む 8 バンド

$k$ - $p$  近似で計算したバンドダイアグラムを示した。CdTe の方は、GaAs などと同様、主に  $s$  軌道からなる  $\Gamma_6$  バンド ( $J = \pm 1/2$ ) が伝導帯、 $p$  軌道からなる  $\Gamma_8$  ( $J = \pm 1/2, \pm 3/2$ ) が価電子帯、同じくスピンスプリットオフバンド  $\Gamma_7$  を形成しているのに対して、HgTe では、スピン軌道相互作用のためにバンドの逆転が生じ  $\Gamma_8$  の方が  $\Gamma_6$  よりも上に来ている。HgTe を量子井戸にすると、量子閉じ込めによりバンドは変化する。バンドギャップを挟んで  $\Gamma_6$  の閉じ込めによる E1 バンドと  $\Gamma_8$  の閉じ込めによる H1 バンドとを考える。

この HgTe 量子井戸については、Bernevig-Hughes-Zhang(BHZ) 模型という理論モデルが提出されており [11], E1 バンドと H1 バンドの順番が、反転状態を守っていれば (正確には [11] を参照), Chern 数 ( $Z_2$  トポロジカル数) が 1 になって、2 次元トポロジカル絶縁体となる。今、量子井戸は両側が CdTe で対称な形をしているため、Rashba 型のスピン軌道相互作用は存在せず、量子井戸にしたことによるスピン軌道相互作用の変化はない。一方、軌道的には閉じ込めポテンシャルにより、電子的な E1 レベルは上昇し、正孔的な H1 レベルは下降する。このため、井戸幅が一定値よりも狭くなると E1-H1 の準位逆転が生じて通常の絶縁体に転移する。

図 10.8(c) がこのような量子井戸試料の 4 端子抵抗値を測定した結果で、E1, H1 がクロスする臨界幅  $d_c=6.3$  nm に対し、I が 5.5 nm で狭く、他の試料は 7.3 nm で広がっている。狭い試料は、 $V_g = 0$  周囲で抵抗値が非常に高くなり絶縁体を実現していることがわかる。一方、 $d$  が広く H1 が上にある場合、バンド絶縁体であることは同じであるが、スピン軌道相互作用がバンドギャップを上回ってバンド反転が生じている。このためトポロジカル絶縁体を実現し、試料端にはヘリカル端状態が生じていると考えられ、これを通した電気伝導度はランダウアー公式 (??) により  $2e^2/h$  のはずである。実際、電極間隔が短く端状態の乱れが少ないと考えられる試料 III (試料幅 1  $\mu\text{m}$ ), IV (試料幅 0.5  $\mu\text{m}$ ) では、ちょうど絶縁体になる付近のゲート電圧で試料幅によらず伝導度が  $2e^2/h$  となっており、トポロジカル絶縁体の実現を証拠づけている。

## 参考文献

- [1] S. Maekawa ed. *Concepts in Spin Electronics*, (Oxford, 2005).
- [2] F. Jedema, A. Filip, B. Van Wees, *Nature* **410**, 345–348(2001).
- [3] T. Sasaki *et al.*, *Applied Physics Express* **2**, 053003(2009).
- [4] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, (Springer, 2003).
- [5] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580–586(1955).
- [6] E. Rashba, *Soviet Physics-Solid State* **2**, 1109–1122(1960).
- [7] Y. A. Bychkov, E. I. Rashba, *Journal of physics C: Solid state physics* **17**, 6039(1984).
- [8] A. D arr, J. Kotthaus, T. Ando, *Proc. 13th Int. Conf. Phys. Semidond.* p.774 (1976) .
- [9] J. Nitta *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335–1338(1997).
- [10] M. Z. Hasan, C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045–3067(2010).
- [11] A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [12] M. K onig, S. Wiedmann, C. Br une1, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [13] S.-Q. Shen, “Topological Insulators” (Springer, 2012).

## 付録 10A : 微小磁気モーメントの運動

### 10A.1 磁場中の電子スピン

$z$  方向の静磁場  $B_0$  中の単一スピン  $s$  を考える。ゼーマンエネルギーのみ考え、

$$\mathcal{H} = (e\hbar/2m_0)gB_0\hat{s}_z = g\mu_B B_0\hat{s}_z$$

とする.  $\mu_B$  はボーア磁子 (Bohr magneton) である. スピン演算子の交換関係  $[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i\hat{s}_l/2$  ( $(j, k, l)$  は  $(x, y, z)$  のサイクリックな入れ替え). より,

$$[\mathcal{H}, \hat{s}_x] = ig\mu_B B_0 \hat{s}_y, \quad [\mathcal{H}, \hat{s}_y] = -ig\mu_B B_0 \hat{s}_x, \quad [\mathcal{H}, \hat{s}_z] = 0$$

であるから, ハイゼンベルク方程式より

$$\frac{\partial \langle s_x \rangle}{\partial t} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} B_0 \langle s_y \rangle, \quad \frac{\partial \langle s_y \rangle}{\partial t} = \frac{g\mu_B}{\hbar} B_0 \langle s_x \rangle, \quad \frac{\partial \langle s_z \rangle}{\partial t} = 0. \quad (10A.1)$$

$$\therefore \langle s_x \rangle = A \cos \omega_0 t, \quad \langle s_y \rangle = A \sin \omega_0 t, \quad \langle s_z \rangle = C, \quad \omega_0 = \frac{eg}{2m_0} B_0. \quad (10A.2)$$

ただし,  $A^2 + C^2 = s^2$  である. (10A.2) は, ラーモア振動数 (Larmor frequency)  $\omega_0$  での  $z$  軸周りのすりこぎ運動 (歳差運動) を示している.

$xy$  面内に回転磁場  $B_1(e_x \cos \omega t + e_y \sin \omega t)$  を加えたとし, 時間依存ハミルトニアンを

$$\mathcal{H}(t) = g\mu_B(B_1 \cos \omega t \hat{s}_x + B_1 \sin \omega t \hat{s}_y + B_0 \hat{s}_z)$$

と書く. スピン波動関数  $\chi(t) = u(t)|\uparrow\rangle + d(t)|\downarrow\rangle$  の時間発展は,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} = -g\mu_B \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}$$

で表される. この連立微分方程式の解は,  $C$  を積分定数とし,  $\omega_c = eB_1/m_0$ ,  $\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_c^2}$  と定義することで,

$$u(t) = C(\Omega \mp \omega_0 \pm \omega) e^{i(\pm\Omega - \omega)t/2}, \quad (10A.3a)$$

$$v(t) = \pm C \omega_c e^{i(\pm\Omega + \omega)t/2} \quad (10A.3b)$$

と書かれる. 初期条件  $u(t) = 1, d(t) = 0$  を取ると,

$$u(t) = \sqrt{2 - \frac{\omega_c^2}{\Omega^2}} \sin\left(\frac{\Omega t}{2} + \alpha\right) e^{-i\omega t/2}, \quad v(t) = \frac{\omega_c}{\Omega} \sin\frac{\Omega t}{2} e^{i\omega t/2},$$

ただし,  $\alpha = \arctan(\Omega/(\omega - \omega_0))$  である. これより,

$$|d(t)|^2 = \frac{\omega_c^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_c^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad (10A.4)$$

となり,  $\omega = \omega_0$  で振動数  $\Omega (= \omega_c)$  で振動し, その振幅はローレンツ型の共鳴を示すことがわかる.

## 10A.2 LLG 方程式

運動方程式 (10A.1) を, 一般のマクロな磁気モーメント  $\mathbf{M}$  に対して適用すると, ランダウ-リフシッツ (Landau-Lifshitz) 方程式

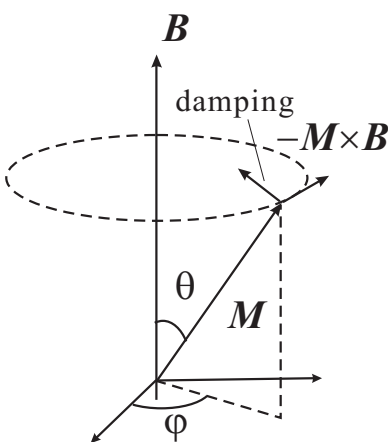
$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{M} \times \mathbf{B} \quad (10A.5)$$

を得る. これに, 何らかの形で  $\mathbf{M}$  の緩和  $\mathcal{R}$  が加わったと考えると次のようになる.

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{M} \times \mathbf{B} + \mathcal{R}. \quad (10A.6)$$

$\mathcal{R}$  がどのような形の項か考える.  $\mathbf{M}$  は  $\mathbf{B}$  の方向が最も安定であるから, 左図のように緩和はこの方向にかかる力と考えられる.  $-\mathbf{M} \times \mathbf{B}$  と  $\mathbf{M}$  に垂直であるから,  $\lambda$  を定数として

$$\mathcal{R}_{LL} = -\lambda \frac{\mathbf{M}}{|\mathbf{M}|} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{B}) \quad (10A.7)$$



と推察することは自然である。これをランダウ-リフシッツ減衰項と呼ぶ。

これに対して、摩擦項のように、減衰率は  $\mathbf{M}$  の速さ-時間変化に比例するべきである、という考えもあり得る。時間変化  $\partial\mathbf{M}/\partial t$  は上の  $-\mathbf{M} \times \mathbf{B}$  と同じ向きであるから、ランダウ-リフシッツ項と同様に向きを考えると、 $\alpha$  を定数として、

$$\mathcal{R}_G = \alpha \frac{\mathbf{M}}{|\mathbf{M}|} \times \frac{\partial\mathbf{M}}{\partial t} \quad (10A.8)$$

と書ける。これをギルバート減衰項と呼ぶ。この中の  $\partial\mathbf{M}/\partial t$  に、減衰がない場合の運動方程式 (10A.5) を代入すると、これはランダウ-リフシッツ項と一致する。 $\mathcal{R}_G$  を採用した

$$\frac{\partial\mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{M} \times \mathbf{B} + \alpha \frac{\mathbf{M}}{|\mathbf{M}|} \times \frac{\partial\mathbf{M}}{\partial t} \quad (10A.9)$$

をランダウ-リフシッツ-ギルバート (LLG) 方程式 (Landau-Lifshitz-Gilbert equation) といい、磁化の運動を現象論的に記述するのに良く使用される。