

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。

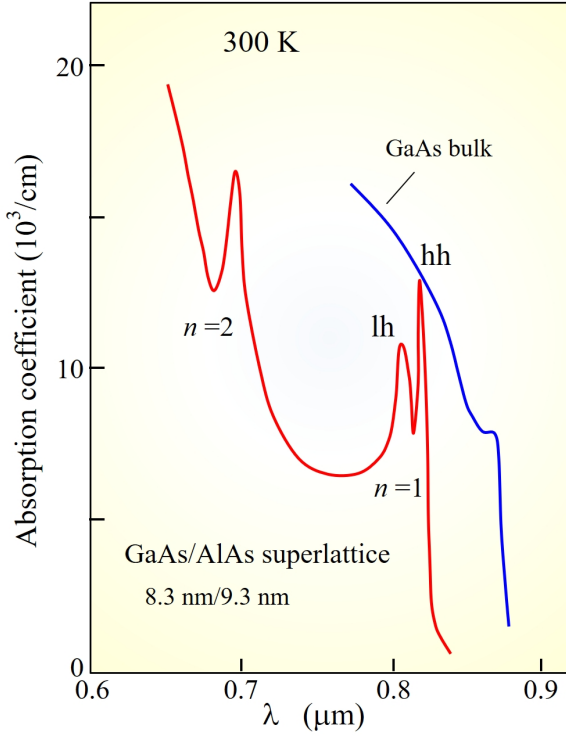


図 7.3 室温での GaAs(8.3 nm)/AlAs(9.3 nm) の超格子の吸収係数に現れた、励起子の吸収ピーク。超格子ではあるが、井戸間の結合は弱く、同様に見ることができる。図中で  $n$  と書かれているのはサブバンドの指数で、本文中の励起子波動関数の指数ではない。基底バンド ( $n = 1$ ) 端の励起子吸収ピークは、lh と hh とに分離している [1]。  $n = 2$  端のピークは hh によるものと思われる。

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。バ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.

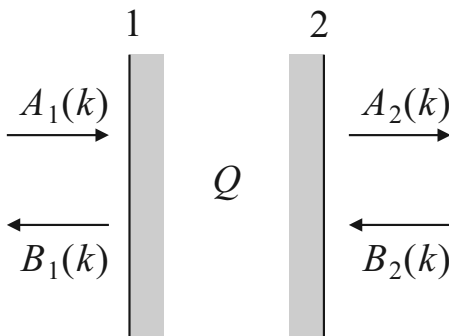


図 7.4 転送行列の概念図.

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

$$T_{11} = m_{11}^2 \exp(ikW) + |m_{12}|^2 \exp(-ikW) \quad (\because m_{12} = m_{21}^*)$$

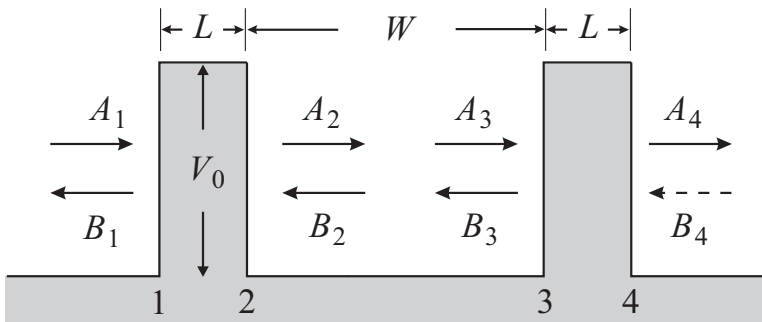


図 7.5 二重障壁ポテンシャルの模式図.

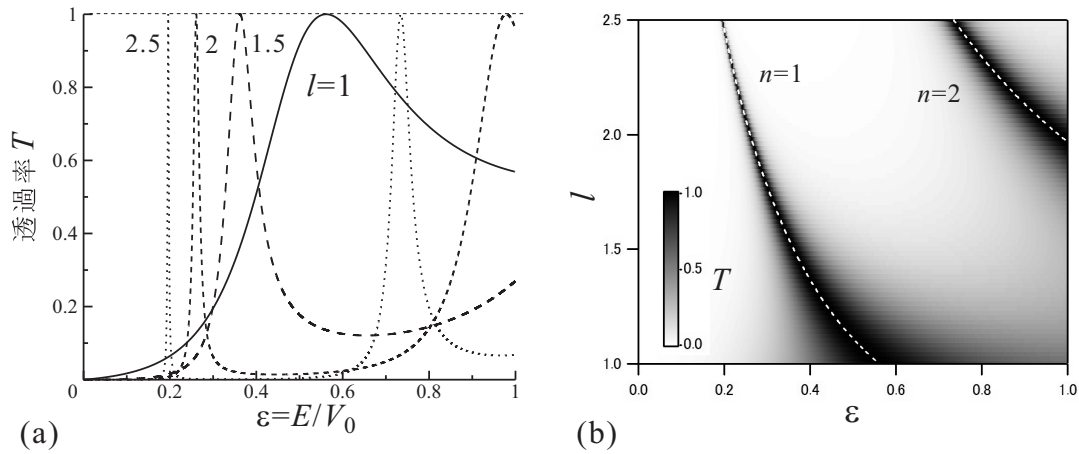


図 7.6 (a) (7.30) から計算した入射波の運動エネルギーに対する透過率  $T$ .  $W = 2L$  に固定し, 様々な障壁層厚 (従って間隔) について計算したもの. (b) 同じ計算結果を, 濃淡プロットしたものの白い点線は (7.31), (7.32) を数値計算したもの.

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)。

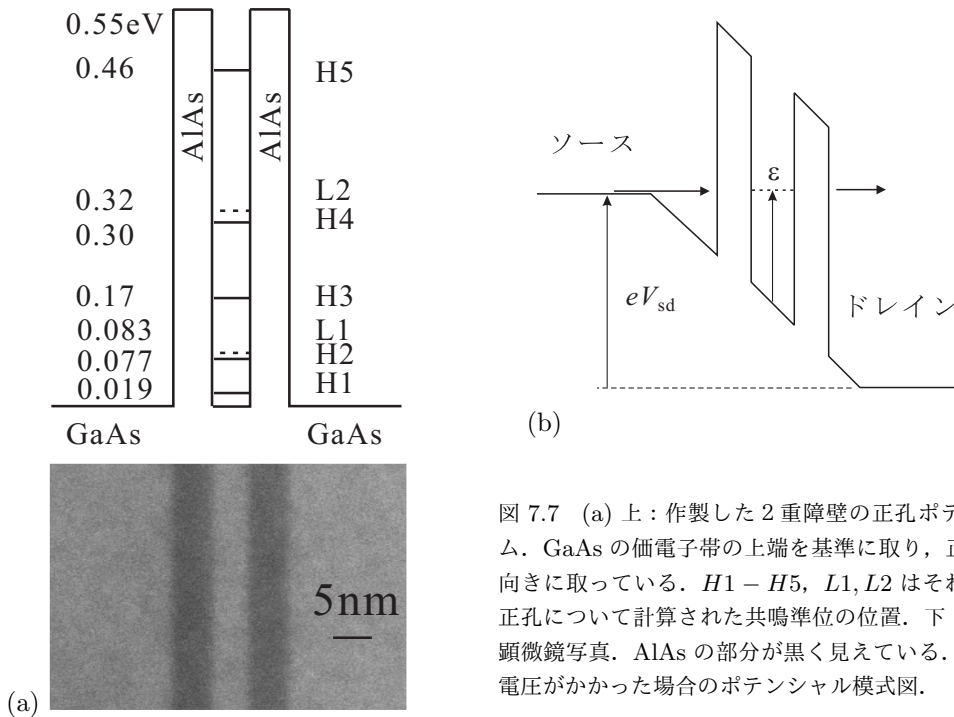


図 7.7 (a) 上: 作製した 2重障壁の正孔ポテンシャルダイアグラム。GaAs の価電子帯の上端を基準に取り、正孔のエネルギーを上向きに取っている。H1 - H5, L1, L2 はそれぞれ重い正孔、軽い正孔について計算された共鳴準位の位置。下: 試料の走査透過電子顕微鏡写真。AlAs の部分が黒く見えている。(b) ソース-ドレイン電圧がかかった場合のポテンシャル模式図。

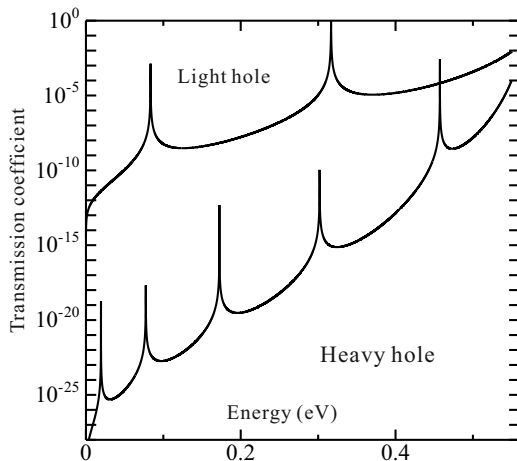


図 7.8 本文中のパラメータを使い式 (7.30) を用いて計算した 2重障壁構造の透過率のエネルギー依存性。透過率ピークの値は 1 に達しているが、極めて鋭くなっている。

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。

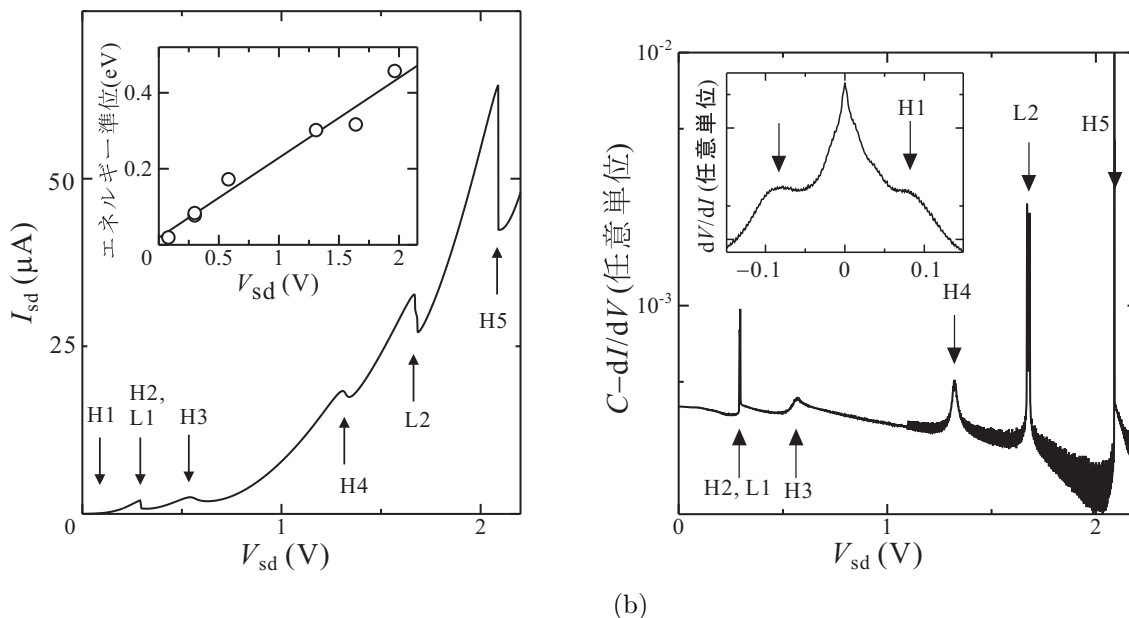
## 7.2.4 超格子

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。

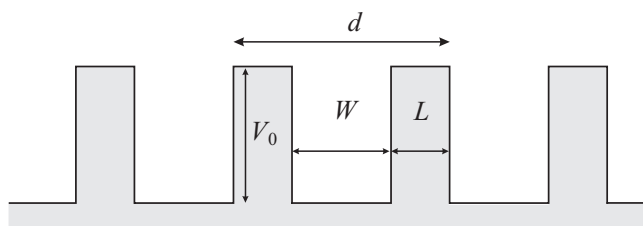


図7.10 1次元矩形周期ポテンシャル (Kronig-Penny ポテンシャル)

\*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。

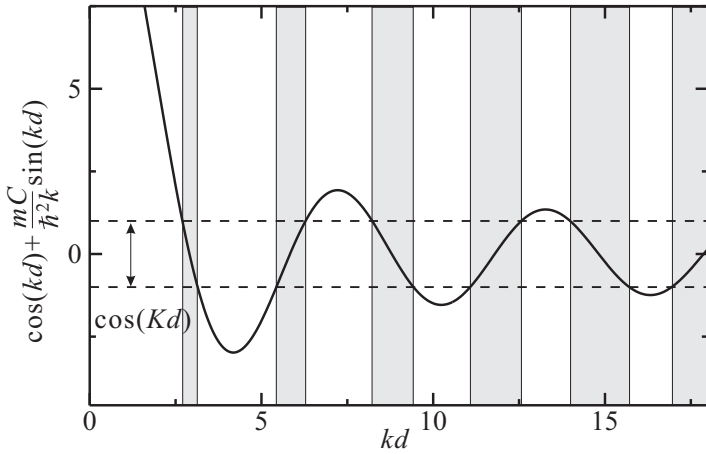


図7.11 (7.40)の右辺を $kd$ の関数としてプロットしたもの.  $mdC/\hbar^2 = 13$ とした. 灰色の部分が「許容帯」.

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

$$m^* \frac{dv}{dt} = \hbar \frac{dK}{dt} = F = eE_m \quad (7.43)$$



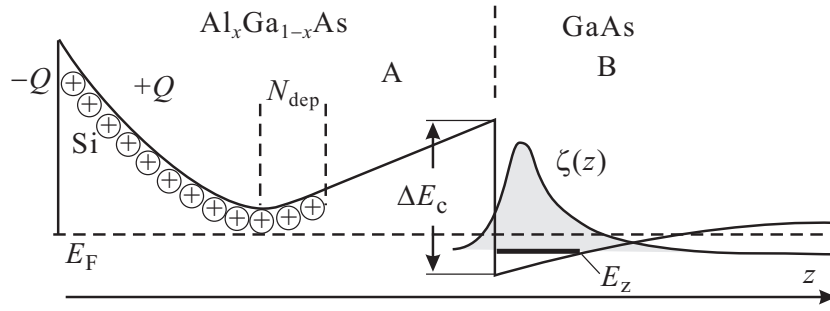


図 7.12 変調ドーブによるヘテロ接合 2 次元電子系の生成スキーム例.  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  の場合について例示している.

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．

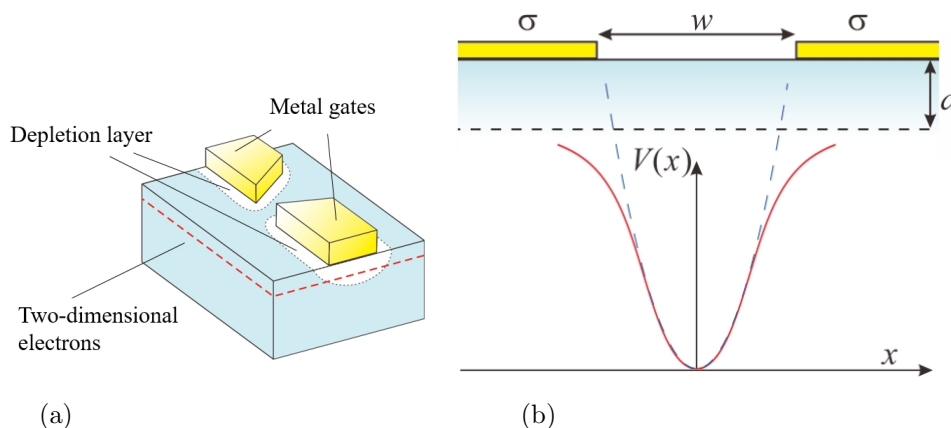
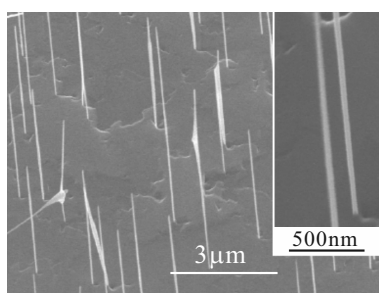
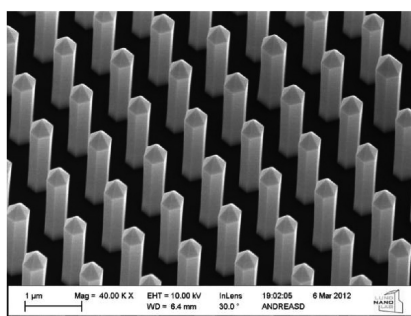


図 7.13 (a) スプリットゲートを用いた微細系の作製法の概念図．(b) 簡単なモデルによるスプリットゲートの作るポテンシャル．



(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。

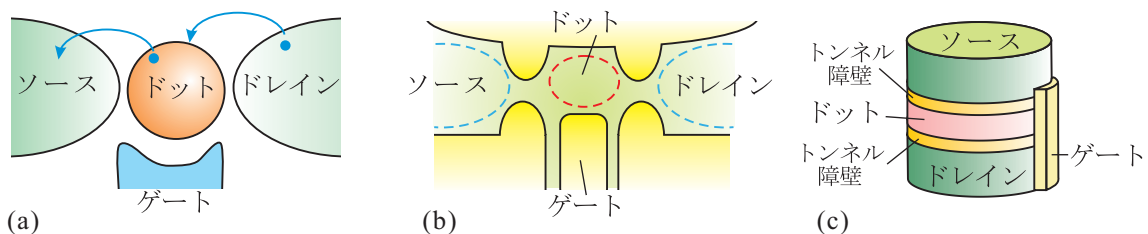


図 7.15 (a) 電気伝導を調べるための代表的な量子ドット構成の模式図。量子ドットを挟んで、伝導を調べるための2つの電極、ソース、ドレインがトンネル障壁を介して接続され、やや離れてドットの電位を制御するゲート電極が配置されている。(b)「横型」量子ドットの模式図。2次元電子系と微細加工ショットキ金属ゲートを使う。(c)「縦型」量子ドットの模式図。2つの障壁層で量子ドットになる層を挟んだ構造を作り、その外側のドーブ層でソース、ドレインを形成する。微細加工によりピラー状に切り出し、周囲に円筒状の金属ゲートを形成する(図は、円筒のごく一部を描いている)。

## 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。

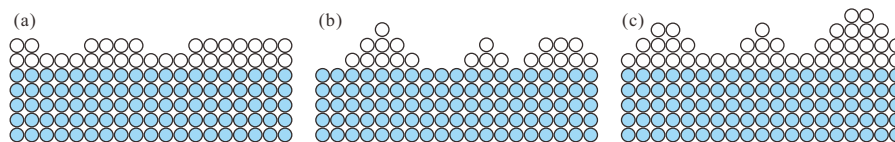


図 7.16 様々な成長様式。灰青色の丸は基板原子，白丸は薄膜原子を表す。(a) Frank-van der Merve (b) Volmer-Weber (c) Stranski-Krastanow

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で、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。

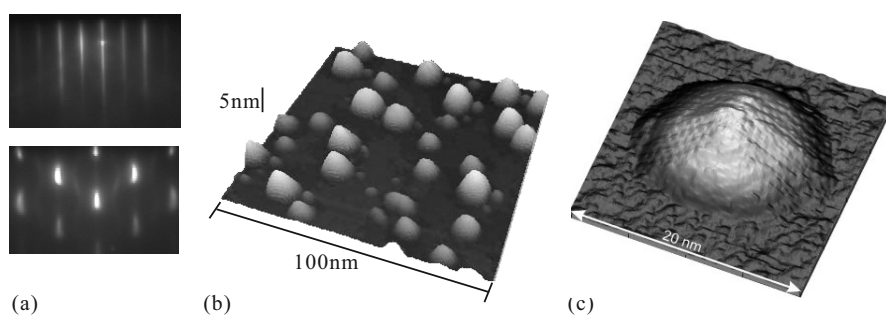


図 7.17 (a) GaAs(001) 基板上の InAs 量子ドットの成長。上: InAs 成長開始時の 2 次元成長 RHEED パターン。下: 量子ドット成長中の 3 次元的 RHEED パターン。(b) でき上がった量子ドット系の原子間力顕微鏡像。(c) 更に STM で 1 個の量子ドットを観察したもの、格子像が見えており、ドット全体が単結晶に近いことがわかる。

### 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。

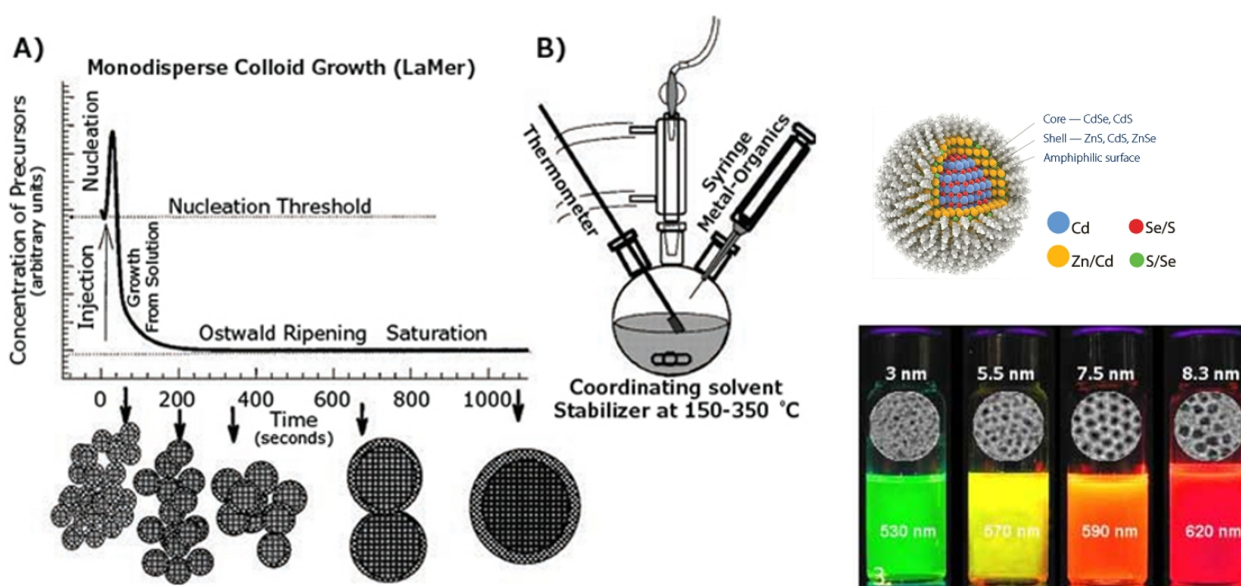


図 7.18 左 (A) 過飽和溶液から析出法によって量子ドットを形成する手法の説明図。グラフは、ドットの前駆体の濃度の時間変化である。左 (B) 析出法セットアップの概念図。右上：コア-シェル型量子ドットの模式図。[4] 右下：CdS ベースのコアシェル量子ドットの発光と TEM 像。(Ocean Nanotech. web site. <https://www.oceannanotech.com/>)

### 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).