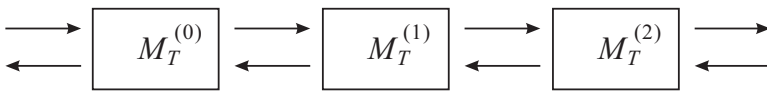


半導体 第 11 回

勝本信吾
東京大学物性研究所

2013 年 6 月 28 日

3.3.2 T 行列, S 行列の合成 (接続)



1次元系を接続する点が複数ある場合を考える．各点に S 行列あるいは T 行列が対応するのでこれは，T 行列, S 行列の接続と同等である．

最も容易に考えられるのが，上図に示した T 行列の直列接続であり，T 行列の場合，出力をそのまま次段の入力にすることができるから，図のように直列にしたものを 1 つの T 行列 M_T として表したい場合，

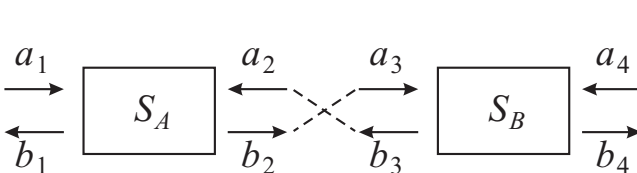
$$M_T = M_T^{(2)} M_T^{(1)} M_T^{(0)} \quad (11.1)$$

と単純に行列の積を取れば良い．

これに対して，S 行列の接続は面倒である．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

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = S_A \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} & t_R^{(A)} \\ t_L^{(A)} & r_R^{(A)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = S_B \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L^{(B)} & t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} & r_R^{(B)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (11.2)$$

と置く．



境界条件

$$b_2 = a_3, \quad a_2 = b_3 \quad (11.3)$$

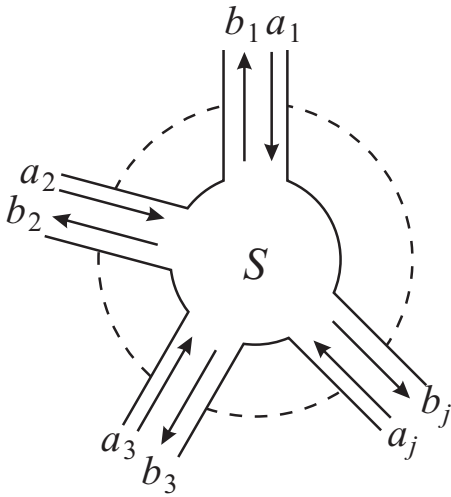
を使用して，最終的な式からこれらの変数を消去し，1 つの S 行列の形に書きなおす．その結果得られるのが，次の合成 S 行列 S_{AB} である．

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} + t_R^{(A)} r_L^{(B)} \left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} t_L^{(A)} & t_R^{(A)} \left(I - r_L^{(B)} r_R^{(A)} \right)^{-1} t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} \left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} t_L^{(A)} & r_R^{(B)} + t_L^{(B)} \left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} r_R^{(A)} t_R^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (11.4)$$

大変面倒な形をしていて，どうしてもわざわざこのようなもの考えるのが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．(11.4) の (1,1) 成分を考え，第 2 項に現れた除算を

$$\left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} = I + r_R^{(A)} r_L^{(B)} + \left(r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^2 + \left(r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^3 + \dots \quad (11.5)$$

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 (??) 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 (10.18) 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。(11.5) 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。

3.4 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 (10.18) の定義から, 確率密度の保存により $|a|^2 = |Sa|^2$ でなければならず, 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 (Onsagar 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 B に対して

$$S(B) = {}^t S(-B) \quad (S_{mn}(B) = S_{nm}(-B)) \quad (11.6)$$

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そう。Schrödinger 方程式

$$\left[\frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi = E\psi \quad (11.7)$$

の複素共役をとり, $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ とすると,

$$\left[\frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi^* = E\psi^* \quad \therefore \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (11.8)$$

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 (11.7) の散乱解だったことを思い出そう。散乱解を $Sc\{a \rightarrow b\}$ (a は S 行列の入射波, b は散乱波) と表すと,

$$Sc\{a(B) \rightarrow b(B)\} \in \{\psi(B)\}, \quad (11.9)$$

$$i.e., \quad b(B) = S(B)a(B) \quad (11.10)$$

(11.10) の両辺の複素共役をとって

$$b^*(B) = S^*(B)a^*(B). \quad (11.11)$$

一方, 進行波 $\exp(\pm ikr)$ 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^{*1}。つまり, 複素共

^{*1} (11.7) 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 iwt の符号はそのままにして ikr の符号のみ反転することを意味する。

役を取ることで入射波と散乱波が入れ替わり

$$\text{Sc}(\mathbf{b}^*(B) \rightarrow \mathbf{a}^*(B)) \in \{\psi^*(B)\} \quad (11.12)$$

$$\therefore B \rightarrow -B \text{ とすると } \text{Sc}\{\mathbf{b}^*(-B) \rightarrow \mathbf{a}^*(-B)\} \in \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (11.13)$$

$$i.e. \quad \mathbf{a}^*(-B) = S(B)\mathbf{b}^*(-B) \quad (11.14)$$

(11.14) より

$$\mathbf{b}^*(B) = S^{-1}(-B)\mathbf{a}^*(B) \quad (11.15)$$

であるから, (11.11) と比較して

$$\begin{aligned} S^*(B) &= S^{-1}(-B) = S^\dagger(-B) \quad (\because \text{unitarity } SS^\dagger = S^\dagger S = I) \\ \therefore S(B) &= {}^t S(-B) \end{aligned} \quad (11.16)$$

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 (ρ_{xx}) の磁場応答 (磁気抵抗) について対称性

$$\rho_{xx}(B) = \rho_{xx}(-B) \quad (11.17)$$

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.

3.5 ランダウアー・ビュティカーの伝導公式

ランダウアー (Rolf Landauer, 1927 - 1999) が提案したのは, 図 11.1 のように, 量子輸送を生じている伝導体を一種の大きな T 行列のように捉える捉え方である.

2 端子の伝導を考え, 試料の左右端は, 伝導チャンネルが M, N 個インターフェイスとして出ている状態とする. この「試料端」の扱いは, 意外に面倒な側面があるが, ここでは, 各チャンネルに入る波動間には量子コヒーレンスはない (すなわち, 各粒子ごとにそれぞれ別のチャンネルに飛び込む) ものとする. すると, チャンネル i に入力した波動は, ある確率でチャンネル j に出てくると, この確率を負でない実数 T_{ij} で表すことができる. チャンネルはいずれも双方向であるから, 入力波動は i も含めてすべてのチャンネルから出て来る可能性がある. 従ってユニタリティは保っても出力側での確率の和 $\sum_j T_{ij}$ は一般に 1 にはならない. T_{ij} をチャンネル $i \rightarrow j$ の透過率 (transmittance) と呼ぶ. 第 10 回の 3.2 節で求めたのは, 透過率 1 の場合の伝導度である.

以上の考察より, 2 端子試料の伝導度 G を, 一般に

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{i,j}^{M,N} T_{ij} \quad (11.18)$$

と書くことができる. (11.18) をランダウアーの 2 端子公式 (Landauer formula for two-terminal conductance) と言う.

端子数には特に制限を設けず, 端子を p, q などで指数付けしよう (図 11.2). 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

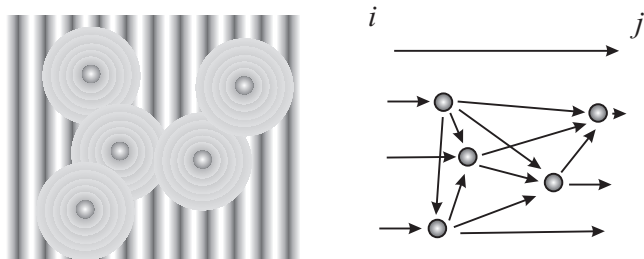


図 11.1 左図のように, 波動が散乱中心による散乱を繰り返して進んでいく波動を, 右図のように, 散乱のない多数の 1 次元伝送路が結節点で繋がれている伝送路を伝送路と捉える. 波動が散乱中心による散乱を繰り返して進んでいく波動を, 右図のように, 散乱のない多数の 1 次元伝送路が結節点で繋がれている伝送路を伝送路と捉える. 波動が散乱中心による散乱を繰り返して進んでいく波動を, 右図のように, 散乱のない多数の 1 次元伝送路が結節点で繋がれている伝送路を伝送路と捉える.

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，

$$J_p = -\frac{2e}{h} \sum_q [T_{q \leftarrow p} \mu_p - T_{p \leftarrow q} \mu_q] \quad (11.19)$$

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，

$$V_q = \frac{\mu_q}{-e}, \quad G_{pq} \equiv \frac{2e^2}{h} T_{p \leftarrow q} \quad \text{とおくと}$$

$$J_p = \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q] \quad (11.20)$$

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．

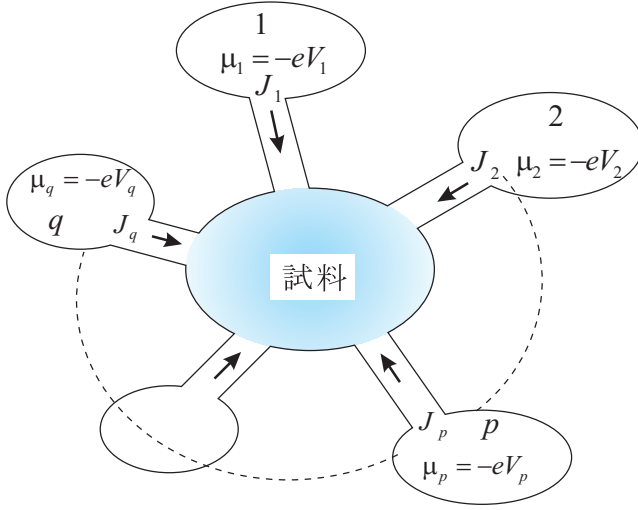


図 11.2 LB 公式を導くモデル．

まず，電流の保存から

$$\sum_q J_q = 0 \quad (11.21)$$

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，

$$\sum_q [G_{qp} - G_{pq}] = 0 \quad (11.22)$$

となる．

更に，外部磁場 B に対して Onsager の相反定理

$$G_{qp}(B) = G_{pq}(-B) \quad (11.23)$$

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，

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} \quad (11.24)$$

と書くことができる．

さて，カシミール (Casimir) 問題と呼ばれる，

$$J_1 = -J_3, \quad J_2 = -J_4 \quad (11.25)$$

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

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{13} \\ V_{24} \end{pmatrix} \quad (11.26)$$

という形に書くことができる．ただし，

$$\alpha_{11} = 2G_q[-\mathcal{T}_{11} - S^{-1}(\mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{12})(\mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{21})] \quad (11.27a)$$

$$\alpha_{12} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{12}\mathcal{T}_{34} - \mathcal{T}_{14}\mathcal{T}_{32}) \quad (11.27b)$$

$$\alpha_{21} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{21}\mathcal{T}_{43} - \mathcal{T}_{23}\mathcal{T}_{41}) \quad (11.27c)$$

$$\alpha_{22} = 2G_q[-\mathcal{T}_{22} - S^{-1}(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{23})(\mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{12})] \quad (11.27d)$$

$$S = \mathcal{T}_{12} + \mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{34} = \mathcal{T}_{21} + \mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{23} + \mathcal{T}_{43} \quad (11.28)$$

である．(11.26) 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，(11.25) 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．

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．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．

(11.23) が (11.26) に与える条件は，

$$\alpha_{11}(B) = \alpha_{11}(-B), \quad \alpha_{22}(B) = \alpha_{22}(-B), \quad \alpha_{12}(B) = \alpha_{21}(-B) \quad (11.29)$$

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，

$$\mathcal{R}_{13,24} = \frac{V_2 - V_4}{J_1} = \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (11.30)$$

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 (11.17) のような磁場反転に対する対称性を満たさない．一方

$$\mathcal{R}_{24,13} = \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (11.31)$$

と，(11.29) 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

$$\mathcal{R}_{mn,kl} = R_q \frac{\mathcal{T}_{km}\mathcal{T}_{ln} - \mathcal{T}_{kn}\mathcal{T}_{lm}}{D}, \quad D \equiv R_q^2(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})S \quad (11.32)$$

なので，相反関係

$$\mathcal{R}_{mn,kl}(B) = -\mathcal{R}_{kl,mn}(-B) \quad (11.33)$$

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．

これより，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．

3.6 コヒーレント量子輸送の例

3.6.1 2重障壁ダイオード

まず，単一ポテンシャル障壁図 11.3 の左側) の T 行列を求める．ここでは波数 k を固定した単チャンネルを考えるため， $A_1(k)$ 等は波動関数そのものという最初の定義を使用する．障壁内の波動関数を $V_i(\kappa) + W_i(\kappa)$ と置く． V ,

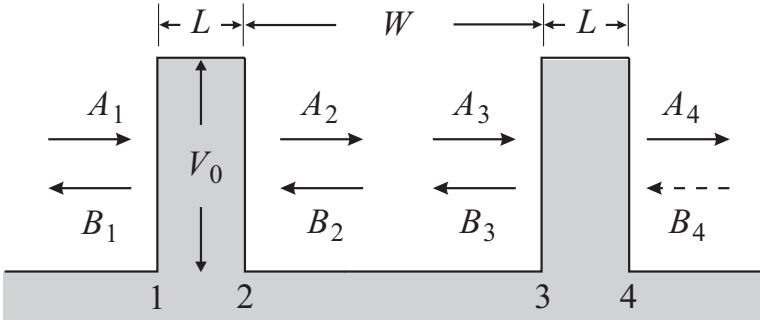


図 11.3 2重障壁ポテンシャルの模式図.

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,

$$A_1 + B_1 = V_1 + W_1, \quad A_2 + B_2 = e^{-\kappa L} V_1 + e^{\kappa L} W_1, \quad (11.34)$$

$$ik(A_1 - B_1) = \kappa(-V_1 - W_1), \quad ik(A_2 - B_2) = \kappa(-e^{-\kappa L} V_1 + e^{\kappa L} W_1) \quad (11.35)$$

となる. $A \sim V$ の k, κ 依存性の表記は省略した.

以上を解くことで, T 行列は

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \equiv M_T \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (11.36)$$

と書くことができ, $\{m_{ij}\}$ は

$$\begin{cases} m_{11} = \cosh(\kappa L) + i \frac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa} \sinh(\kappa L), \\ m_{12} = -i \frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa} \sinh(\kappa L), \\ m_{21} = m_{12}^*, \quad m_{22} = m_{11}^*, \end{cases} \quad (11.37)$$

と与えられる.

図 11.3 のように境界を 1~4 と置き, 各境界での波動関数を A_{1-4} , B_{1-4} とする. 障壁の転送行列には (11.37) を使用し, 量子井戸部分は波の進行により位相が回るだけであるから,

$$M_W = \begin{pmatrix} \exp(ikW) & 0 \\ 0 & \exp(-ikW) \end{pmatrix} \quad (11.38)$$

と書くことができる*2. 2重障壁全体の転送行列 M_{DW} は

$$M_{DW} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikW} & 0 \\ 0 & e^{-ikW} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \quad (11.39)$$

と3者の積で与えられ, これより

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

透過率が

$$T = \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{1}{1 + 4|m_{11}|^2|m_{12}|^2 \cos^2(\varphi + kW)} \quad (11.40)$$

と計算される.

図 11.4 は $W = 3L$ の場合について, (11.40) を計算したものである. 共鳴透過によって透過率にピークが生じ, 完全透過 (透過率 1) 条件となっていることがわかる.

*2 本日の問題にあるように, こうして良いのは, M_T の対角要素が複素透過係数の複素共役の逆数であるからである. 複素透過係数そのものではないので注意.

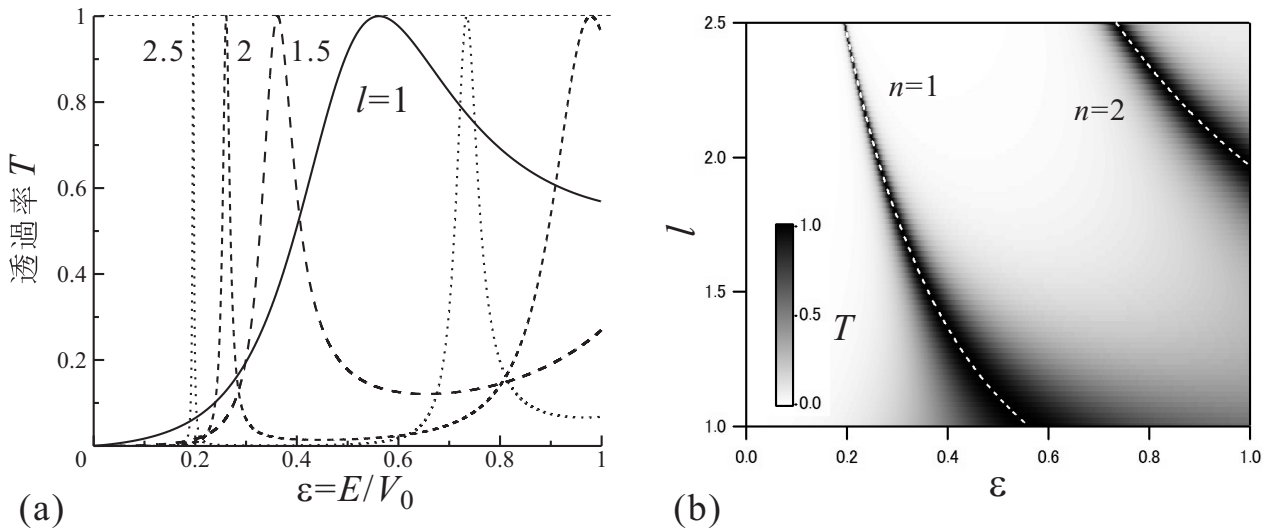


図 11.4 (a) 式 (11.37), (11.40) から計算される 2 重障壁の透過率を透過波のエネルギー ϵ の関数として描いた。 $W = 2L$ に固定し、様々な障壁層厚 (従って間隔) について計算したもの。 l は、 $l \equiv (\sqrt{2mV_0}/\hbar)L$ で L を無次元化した量。 (b) 同じ計算結果を、濃淡プロットしたもの。白い点線は共鳴条件を数値計算したもの。

3.6.2 2 重障壁ダイオードの実験

せっかく計算をしたので、2 重障壁ダイオードの電気伝導実験結果を見てみよう。2 端子デバイスであるから、電流電圧特性にどのような非線形性が出るか、それが以上の初等量子力学的計算とどのように関係になるかが問題となる。ただし、透過率のエネルギー依存性だけでは電流電圧特性を求めることはできず、付録 C のような計算が必要である。が、結局図 11.5(b) のように、バイアス電圧 V_b が、共鳴位置 E_r に対して

$$V_b = E_r/2e \quad (11.41)$$

となるところで電流ピークが生じる特性を示すはずである。

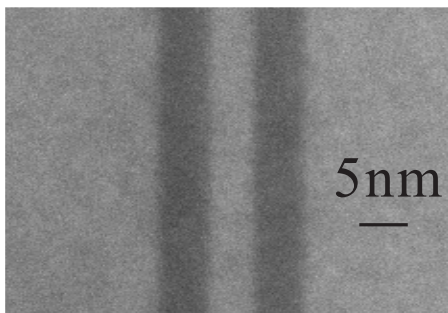
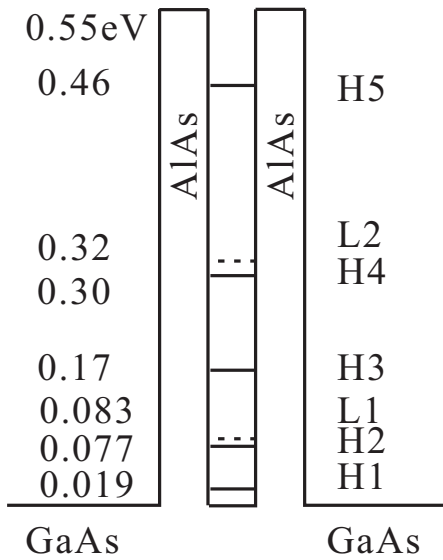
図 11.5(a) に勝本グループで実際に作製した 2 重障壁ダイオードの構造を示した。下が、走査型透過電子顕微鏡 (STEM) で見た断面の像であり、障壁幅、井戸幅共に 5nm の構造ができています。成長方向 (障壁面に垂直な方向) は [001] である。p 型の試料であるため、重い正孔と軽い正孔が存在する。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ は伝導帯が $x = 0.45$ 付近で $\Gamma - X$ クロスオーバーを示し、 x をそれ以上増やしても実質障壁高さが高くないが、価電子帯に関しては、Al 組成が 1 すなわち AlAs まで増やしても障壁高さが上がり続けるので、AlAs を使うことで障壁高さを図 11.5 に示すように 0.55eV の高さを取ることができる。この時、GaAs の重い正孔質量 $0.575m_0$ 、軽い正孔質量 $0.087m_0$ を入れて計算すると、図のように重い正孔の共鳴準位 5 個と軽い正孔の準位 2 個が存在することがわかる。

重い正孔は、有効質量が異方的で歪み (warping) を持っているが、[001] 方向に関してはこの有効質量で (結果的には) 良い近似である。また、2 次元的な閉じ込めを行うことで面内の分散関係は大きく変化するが、面垂直方向はバルクの有効質量が第 1 近似となる。

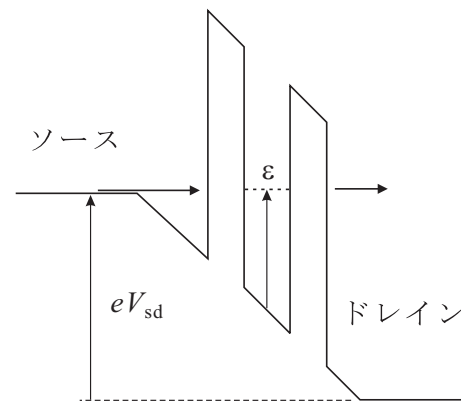
図 11.6 に実際に測定した電流電圧特性を示した。半導体 2 端子素子にはつきものの接触抵抗があって (11.41) にその効果を加えなければならないが、その処理を行うと矢印で示したように所定の位置に、付録 K で示したような 3 角形の電流電圧特性が現れている。電圧で微分を行うと、3 角形の角からの電流の急減少が強調されて右図のように透過率計算に類似のグラフとなる。

参考文献

- [1] Y. Gefen, Y. Imry, and M. Ya. Azbel, Phys. Rev. Lett. **52**, 129 (1984).
- [2] A. Yacoby, R. Schuster, and M. Heiblum, Phys. Rev. B **53**, 9583 (1996).

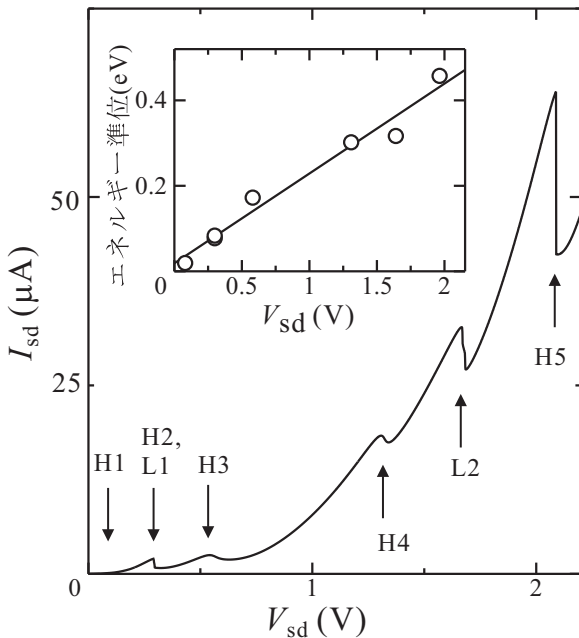


(a)

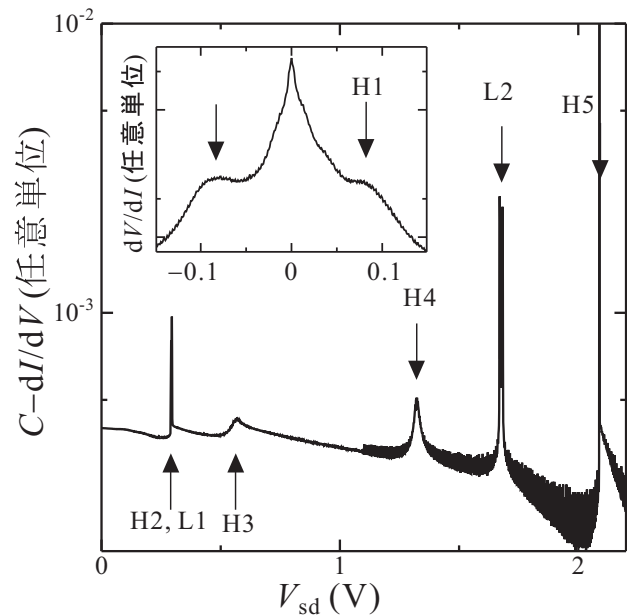


(b)

図 11.5 (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 .



(b)



(a)

図 11.6 (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 .

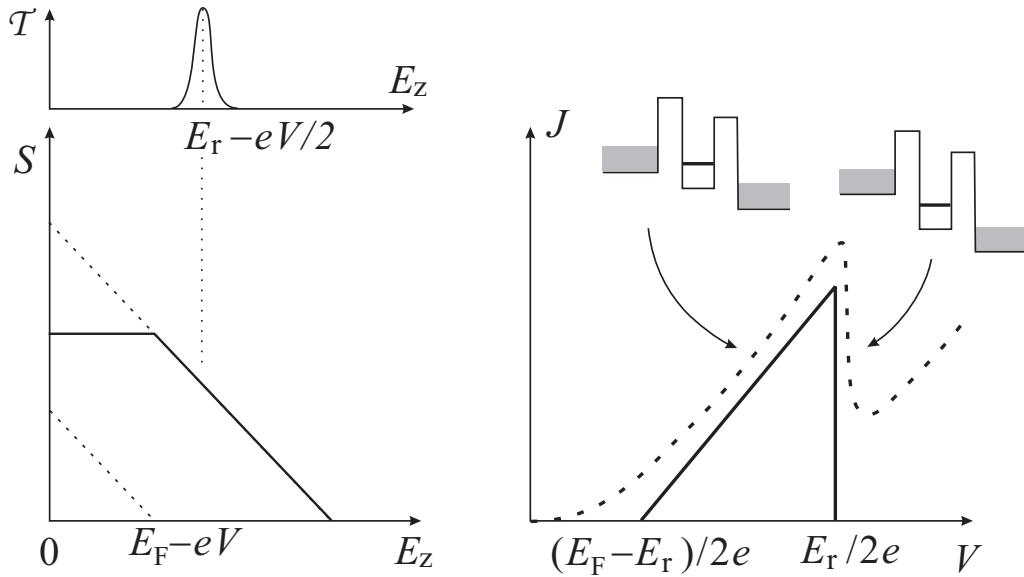


図 11.7 左：フェルミ縮退している場合の供給関数を模式的に描いたもの．上は $E_r - eV/2$ にピークを持つ透過率 \mathcal{T} ．右：左の供給関数と透過率から予想される定性的な電流電圧特性の模式図．

- [3] A. Aharony, O. Entin-Wohlman, T. Otsuka, H. Aikawa, S. Katsumoto and K. Kobayashi, Phys. Rev. B **73**, 195329 (2006).

付録 K：2重障壁ダイオードの電流電圧特性

共鳴準位が存在する場合の2重障壁ダイオード (double barrier diode, DBD) の電流電圧特性は，有限バイアス電圧が加わりフェルミ準位以下の電子も寄与するため，これらを加算する必要がある．

DB への入射電子のエネルギーを障壁に垂直な成分 E_z と平行な成分 E_{\parallel} とに分ける．左電極から右電極へ流れる電流は， z 方向の群速度 $v_{gz} = \partial E / \hbar \partial k_z$ を用いて，

$$\begin{aligned}
 J_{L \rightarrow R} &= e \sum_k v_{gz} f_L (1 - f_R) \mathcal{T} \\
 &= \frac{2e}{(2\pi)^3 \hbar} \int \int d^2 k_{\parallel} dk_z \left(\frac{\partial E_z}{\partial k_z} \right) f_L (1 - f_R) \mathcal{T} \\
 &= \frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dE_z dE_{\parallel} f_L(E) (1 - f_R(E)) \mathcal{T}(E_z)
 \end{aligned} \tag{K.1}$$

と書くことができる． $\mathcal{T}(E_z)$ はエネルギー E_z での障壁の透過係数である．

全体として流れる電流 J は，これから右電極から左電極へ流れる電流を差し引いたものであるから，

$$J = (J_{L \rightarrow R} - J_{R \rightarrow L}) = \int_0^{\infty} dE_z \mathcal{T}(E_z) S(E_z) \tag{K.2}$$

$$S(E_z) \equiv \frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \{f_L(E) - f_R(E)\} dE_{\parallel} \tag{K.3}$$

と書ける． $S(E_z)$ は，供給関数 (supply function) と呼ばれるもので， f としてフェルミ分布を採用すると， $\beta = (k_B T)^{-1}$ として

$$S = \left(\frac{em k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \right) \ln \left[\frac{1 + \exp \beta (E_F - E_z)}{1 + \exp \beta (E_F - E_z - eV)} \right] \tag{K.4}$$

と計算される．フェルミ縮退している場合には，

$$S(E_z) = \begin{cases} (em/2\pi^2\hbar^3)(E_F - E_z) & (E_F - V \leq E_z \leq E_F) \\ (em/2\pi^2\hbar^3)eV & (0 \leq E_z \leq E_F - eV) \end{cases} \quad (\text{K.5})$$

と，台形関数となる．以上から， $eV < E_F$ の場合は

$$J = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} \left[eV \int_0^{E_F - eV} dE_z T(E_z) + \int_{E_F - eV}^{E_F} dE_z (E_F - E_z) T(E_z) \right] \quad (\text{K.6})$$

と計算される．

S は図 11.7 のような台形をしているが， eV が E_F を越えると3角形となる．簡単のためこの状態で考えることにする．井戸内の共鳴エネルギー準位位置を E_r とすると，ソースのバンドの底を基点にとると， T のピークは $E_r - eV/2$ となる．したがって，共鳴トンネル電流は図 11.7 右図のように， $E_r - eV/2$ が E_F にかかった時点より立ち上がり，これが零になる電圧から急激に落ち込んで零になる．実際の特性は，これに熱活性による電流やインコヒーレントなトンネルなどを加えたものになり，点線で示したようなものになると期待される．