

以下の問題から 2 問を選び、答えなさい。

I バンド理論の基礎

(i) 単純立方格子に強束縛近似を行うと、第 1 回の式 (1.15) の 3 次元版

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n - \alpha_n - 2t \sum_{j=x,y,z} \cos k_j a \quad (1)$$

が得られることを示しなさい。

更に、体心立方格子と面心立方格子について対応する表式を示しなさい。

(ii) sp^3 結合によるダイヤモンド構造半導体の Γ 点付近価電子帯波動関数は、 $k \cdot p$ 摂動の 2 次の範囲でスピン部分の波動関数を α, β として、

$$\text{Heavy hole band: } \left| \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ 2|z\rangle \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} - (|x\rangle \pm i|y\rangle) \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \right\}, \quad (2)$$

$$\text{Light hole band: } \left| \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle \pm i|y\rangle) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\text{Spin split-off band: } \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ |z\rangle \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + (|x\rangle + i|y\rangle) \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \right\} \quad (4)$$

と書くことができる。但し、例によって $|x\rangle$ などの波動関数は、対称性のみに着目した記述になっている。また、 α, β を要素とするベクトルは上下要素がそれぞれ複号の上下に対応している。

これらの波動関数によって、スピン軌道相互作用

$$H_{so} = \frac{C_{so}}{r^3} (\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (5)$$

が対角化されることを示しなさい。ただし、 \mathbf{l} は軌道角運動量、 $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリのスピン行列である。

II Si のバンド構造とキャリア統計, pn 接合

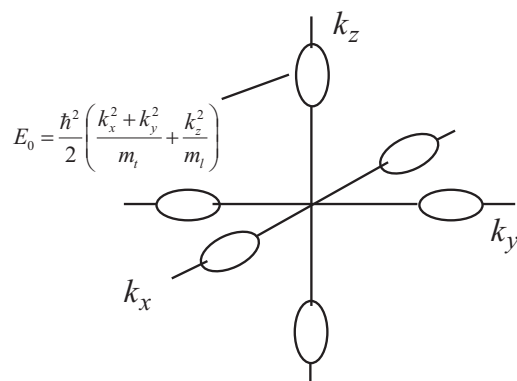


図 1 Si の伝導帯谷構造の模式図。図中に示したような等エネルギー楕円体面を描いたもの。

(i) Si は、ブリルアンゾーンの X 点と呼ばれる位置よりやや Γ 点よりに伝導帯の底 (谷) を持つ。第 1 ブリルアンゾーンの中には 6 つの等価な X 点があって、従って 6 つの谷は縮退している。各谷は楕円体形状をしており、異方的有効質量は、 m_t (楕円体の円形断面方向, effective transverse mass) が $0.19m_0$ 、 m_l (楕円断面のもう 1 つの軸方向, effective longitudinal mass) が $0.97m_0$ とサイクロトロン共鳴により測定されている (図 1)。価電子帯の頂上はブリルアンゾーン中央の Γ 点にあり、非放物線性が強く有効質量の明瞭な定義は困難であるが、平均的な有効質量として、重い正孔 $m_{hh} = 0.49m_0$ 、軽い正孔 $m_{lh} = 0.16m_0$ が得られている。

- (1-a) 伝導帯有効状態密度 N_c を求めよ。絶対温度を T とする。
- (1-b) 価電子帯有効状態密度 N_v を求めよ。
- (1-c) Si のエネルギーギャップは温度に依存するが、室温のギャップを 1.1eV とし室温 (300K) の np 積 (n_i^2) を求めよ。

(ii) 室温で, $n = 1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $p = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ となるように段階的にドーブした Si の pn ダイオードがある. 室温 (300K) での造り付けポテンシャルの大きさを求めよ. 計算には上の問題で求めた純粋 Si のキャリア濃度の積 n_i^2 を使用せよ.

III pn 接合の C-V 特性

GaAs(比誘電率 13) の p^+n 接合を MBE で作製した. ドーブは n 側も p 側も空間的に一様に行っている. 1mm^2 の断面積に切り出して, バイアス電圧 V_b を負側 (逆バイアス側) に加えながら微分静電容量を測定したところ, 次の表のような結果を得た.

V_b (V)	C (pF)
0.0	408
-0.2	380
-0.4	350
-0.6	334
-0.8	313
-1.0	296
-1.2	283
-1.4	273

この結果から, 造り付けポテンシャルの大きさ (単位 Volt) を求めよ. C には測定誤差を含めてあるが, フィットtingは定規で引く程度でもよいし, 本格的にフィットをして誤差を推定してもらっても良い. また, 静電容量は n 側で決まっていると考え, n 側のドナー濃度 (単位 cm^{-3}) を求めよ.

IV 様々な閉じ込めポテンシャル

半導体 GaAs (有効質量 $m^* = 0.067m_0$) を使って様々な量子閉じ込め構造を作る. 簡単のため, z 軸に沿った 1 次元問題として取り扱おう.

(i) 幅 $a = 10 \text{ nm}$, で障壁の高さ無限大の量子井戸を作った場合, 基底状態, 第 1 励起状態, 第 2 励起状態のエネルギーを井戸の底を基準として求めなさい.

(ii) 三角ポテンシャル

$$U(z) = \begin{cases} \infty & (z < 0) \\ e\mathcal{E}z & (z \geq 0) \end{cases} \quad (6)$$

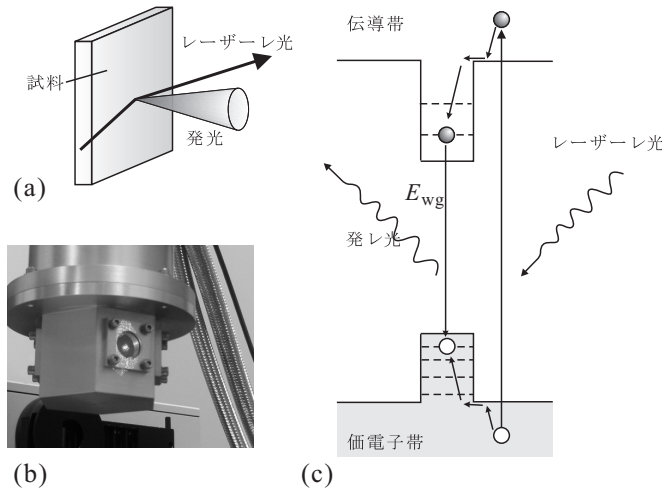
について, 下から n 番目の固有エネルギーを求めなさい. $\mathcal{E} = 10^5 \text{ V/cm}$ とする. また, 付録の「三角ポテンシャルの固有状態」を参考にしなさい.

(iii) 調和振動子ポテンシャル

$$U(z) = \frac{m^*\omega^2}{2}z^2 \quad (7)$$

について, 下から n 番目の固有エネルギーを求めなさい.

V 量子井戸の発光



量子井戸のフォトルミネッセンス実験の様子を左図に示した。(a)のように量子井戸にレーザーなどでエネルギーの大きな光を照射すると、電子正孔対が励起され、これが再結合することで光を発光する。(b)は実際の実験の様子で、クライオスタットの光学窓からレーザー光を入射し、反射光は反対方向へ逃し、試料面から垂直に出る光を集光して分光器に入れる。(c)に模式的に示したように、電子、正孔は複数フォノンの放出などにより短時間に量子井戸内の固有状態(多くは基底状態)に緩和し、発光する。この図の通りのバンド間遷移が主要発光スペクトルとなる場合、発光エネルギーからバンド間エネルギー差がわかる。

(i) 量子井戸を、GaAs, Al_{0.3}Ga_{0.7}As(障壁層)で構成

することを考える。試料を低温(5K付近)まで冷却することを考え、それぞれのバンドギャップ、また、バンドギャップ差の60%が伝導帯、40%が価電子帯に振り分けられることを考えて、図2(a)のようにバンドダイアグラムが生じていると考える。GaAsの電子有効質量は、上で見たように0.067m₀、重い正孔有効質量は0.45m₀であり、AlGaAsでこれは変化するが、今考える問題で大きな影響を及ぼすほどの変化ではないので、有効質量変化については無視することにする。実際に、d = 5 nm, 7.5 nm, 10 nm, 15 nmの量子井戸を作製し、4Kで取ったフォトルミネッセンススペクトルが図2(a)である。

(i) 図2(a)のダイアグラムに対して、d = 5 nm, 7.5 nm, 10 nm, 15 nmに対応する電子及び正孔の束縛エネルギーを、それぞれ基底状態について求めなさい。

(ii) 上の計算から、それぞれ、どのようなエネルギーでの発光が期待されるか。

(iii) 図2(b)にあらわれている6本のピークの内、左の2本はバルク(基板)からの発光である。残る4本のピーク位置も、上の計算結果とは少々ずれているはずである。これは、実は発光は最初に述べたようなバンド間の直接遷移に

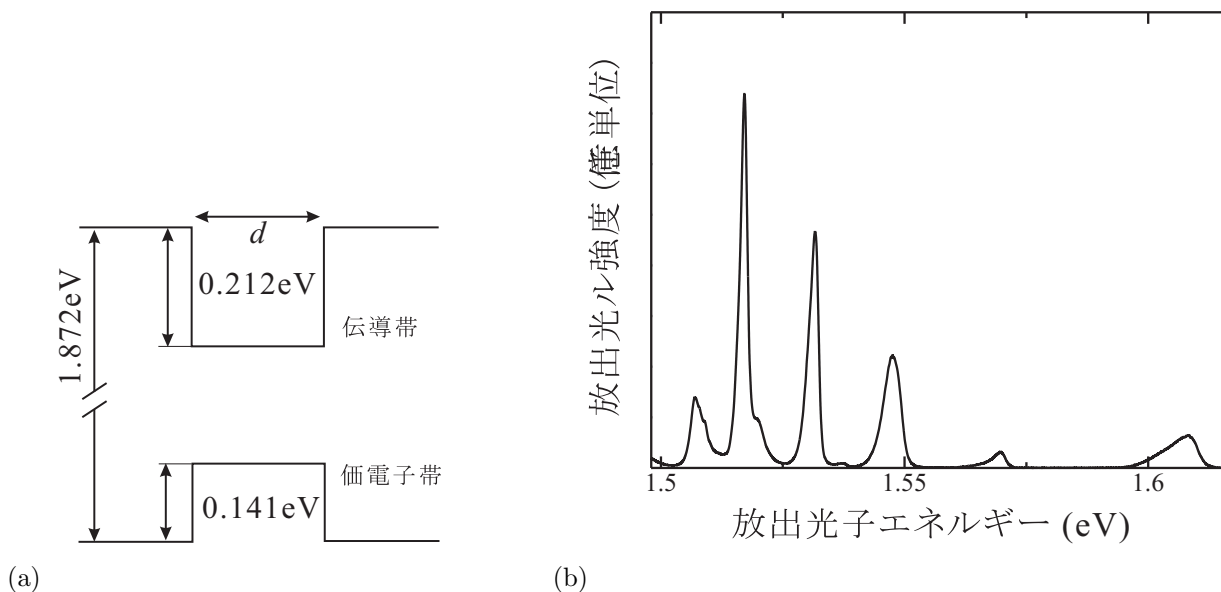


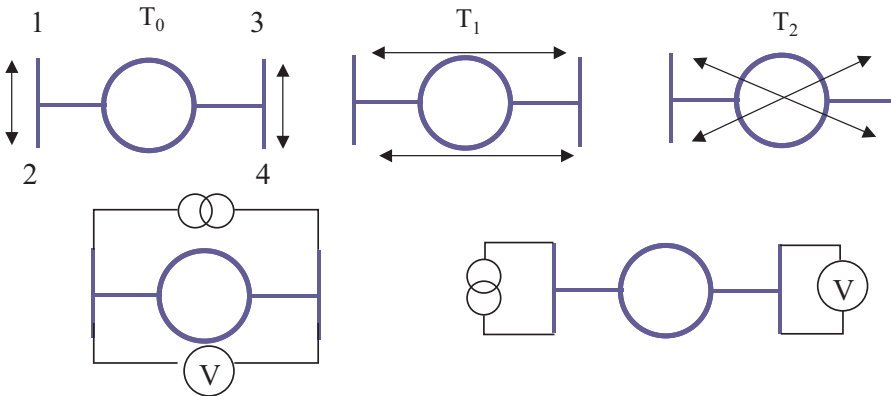
図2 (a) GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 量子井戸のエネルギーダイアグラム。(b) 4Kの実験で得られたフォトルミネッセンススペクトル。

よるものではなく、講義では触れなかった電子-正孔の束縛状態励起子 (exciton) が形成され、これが再結合して発光する遷移が主になっているためである。

実験結果から、それぞれの量子井戸幅に対する励起子の束縛エネルギーを見積りなさい。井戸幅と束縛エネルギーの間には、どのような関係があるか。簡単な増加、減少傾向で答えれば良い。

VI コヒーレント伝導

(i) Landauer-Buettiker 公式を用いて、透過率 T の量子細線に対する 4 端子コンダクタンスを与える表式 (いわゆる 4 端子 Landauer 公式) を求めなさい。



(ii) AB リングに対して、上の図のような近似を行ったとき、通常 4 端子抵抗 R_c と非局所 4 端子抵抗 R_{nl} はどのように表されるか。ただし、 $T_0 \gg T_1, T_2$ という近似を使うこと。上の図の意味：左上:端子 1-2 と 3-4 間の透過率が T_0 。中、右も同様に、1-3、2-4 の透過率が T_1 、1-4、2-3 の透過率が T_2 であることを表す。下の左は通常の抵抗測定 R_c 、右は非局所抵抗測定 R_{nl} 。(ずれた円が 2 個重なっているのは定電流電源、円中に V の字があるのは電圧計の記号。)

VII コヒーレント伝導 II

(i) 複素透過率 t 、複素反射率 r を持つポテンシャル障壁を転送行列 M_T で表すとすると、

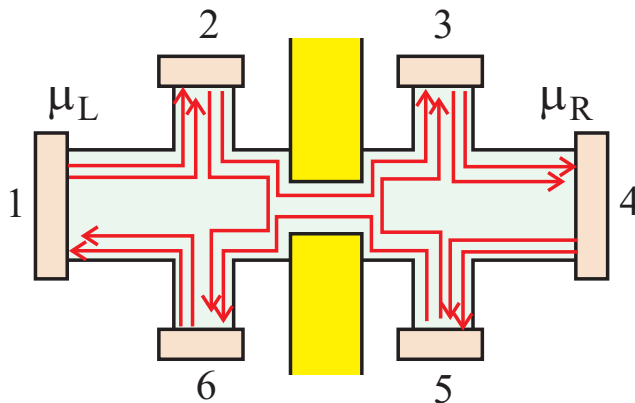
$$M_T = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix} \quad (8)$$

と書けることを示しなさい。

(ii) AB リングを 2 重スリットとして捉えると、透過波動関数振幅の 2 乗は

$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos \theta \quad (9)$$

と書くことができるはずである。 ψ_1, ψ_2 はそれぞれの腕を通過する波動関数、 θ はリングによって生じる 2 経路の位相差である。ところが、 θ が行路差位相 θ_0 と AB 位相 $e\Phi/\hbar$ (Φ はリングを通過する磁束) の和で書けるとすると、 $\theta_0 \neq 0$ の場合、明らかに Onsager の相反性を破ってしまう。この議論のどこがおかしいのか論じなさい。



VIII 端状態を使った電気伝導の実験

2 次元電子系を上図のように 6 つの端子を持つ、「ホールバー」と呼ばれる形状に加工する。ただし、中央に量子ポイントコンタクト (QPC) を作る。充填率 ν の整数量子ホール効果状態において、 ν 個の端状態チャンネルのうち、 χ 個が QPC を完全透過し、残りは完全に反射されるとする。端子 1-4 間に電流を

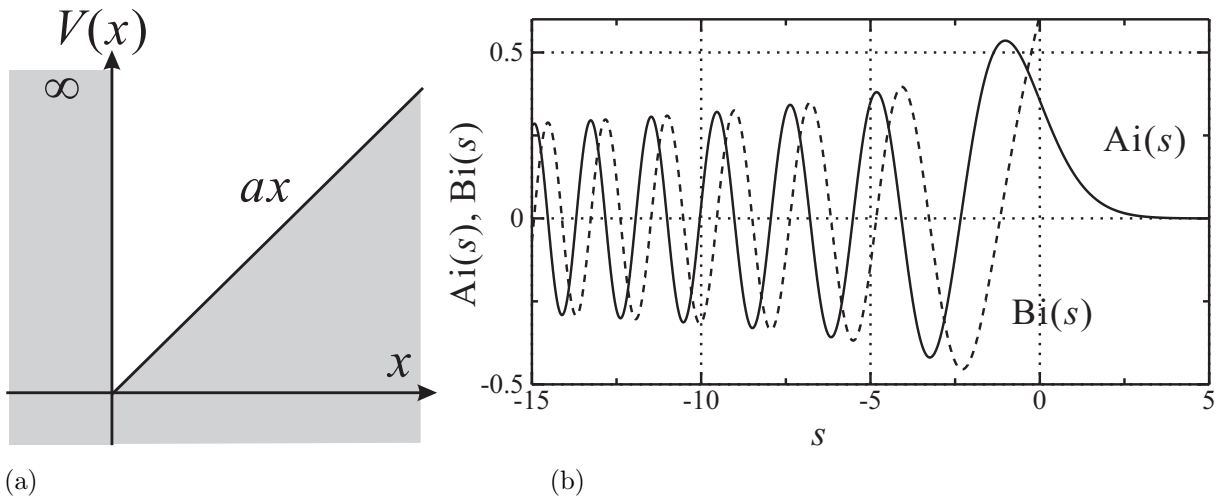


図3 (a) 三角ポテンシャルの模式図 . (b) エアリ関数 .

流し，他の端子には内部抵抗無限大の理想的電圧計を接続して化学ポテンシャルを測定する．Landauer-Büttiker 公式を適用して次を求めよ．

- (i) 2-3, あるいは 5-6 の電位差から求まる縦方向抵抗 R_L .
- (ii) 2-6, あるいは 3-5 の電位差から求まるホール抵抗 R_H .

付録：三角ポテンシャルの固有状態

x 軸上の 1 次元問題と考え，時間依存部分を分離した Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi = E\psi, \quad V(x) = \begin{cases} ax & (x > 0, \quad a > 0) \\ \infty & (x \leq 0) \end{cases} \quad (10)$$

を考える．次の変数変換を行う．

$$s = \left(\frac{2ma}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x - \frac{E}{a}\right). \quad (11)$$

すると，Schödinger 方程式は

$$\frac{d^2\psi}{ds^2} = s\psi \quad (12)$$

という形になる．これは，エアリ (Airy) あるいはストークス (Stokes) の微分方程式と呼ばれる．

その解は，エアリ関数と呼ばれ， $s \rightarrow \infty$ の境界条件により， $\psi \rightarrow 0$ となるものを Ai, $\psi \rightarrow \infty$ となるものを Bi と記す．その振舞いを図 3(b) に示した．

量子力学の波動関数の基底系としては無論，無限遠でゼロになる条件より Ai を採用すべきである． $s \rightarrow \pm\infty$ の漸近形は

$$Ai(s) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}s^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}s^{3/2}\right) \quad (s \rightarrow \infty) \quad (13)$$

$$\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}|s|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|s|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (s \rightarrow -\infty) \quad (14)$$

と与えられている．

$x < 0$ では $V = \infty$ より， $x = 0$ の境界条件は $\psi(+0) = 0$ である．これより，Ai(s) ゼロ点が $x = 0$ に来なければならない．Ai のゼロ点を絶対値の小さい順に $s_1, s_2, \dots, s_n, \dots$ と書くと，(11) より n に対応するエネルギー固有値

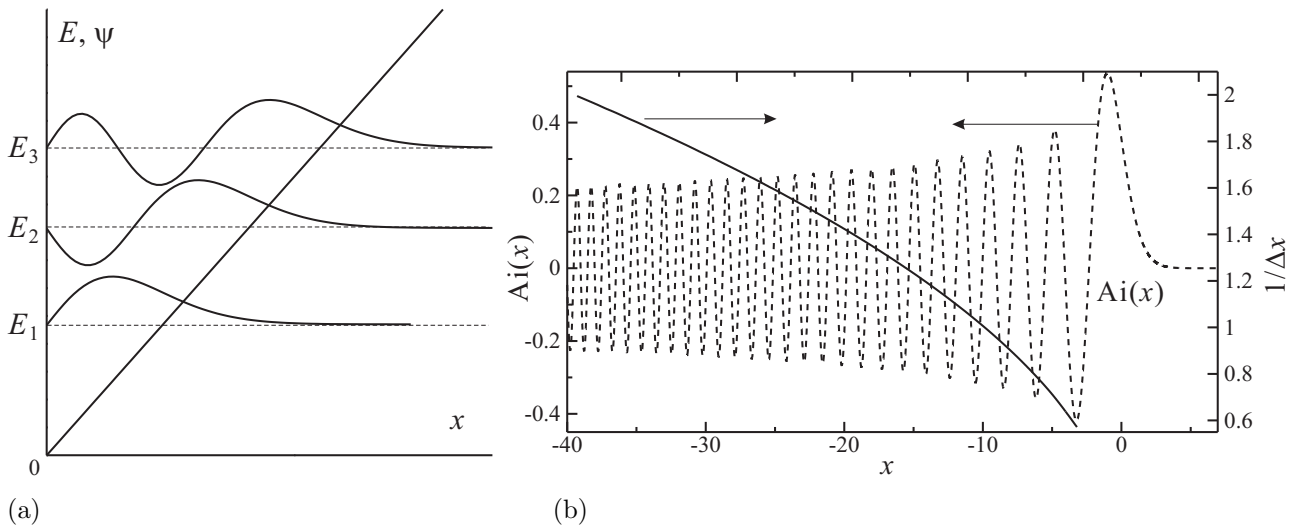


図4 (a) 三角ポテンシャル中のエネルギー固有値と波動関数．エネルギーの低い順に $n = 1, 2, 3$ について描いたもの．(b) エアリ関数のゼロ点の間隔 Δx を計算し， $1/\Delta x$ をこのゼロ点の中心に対してプロットしたもの．エアリ関数そのものも破線で描かれている．

E_n が

$$E_n = - \left(\frac{\hbar^2 a^2}{2m} \right)^{1/3} s_n \quad (15)$$

と得られる．漸近形 (14) から，

$$s_n \sim - \left(\frac{3\pi(4n-1)}{8} \right)^{2/3} \quad (16)$$

が，大きな n に対する s_n の漸近解である．