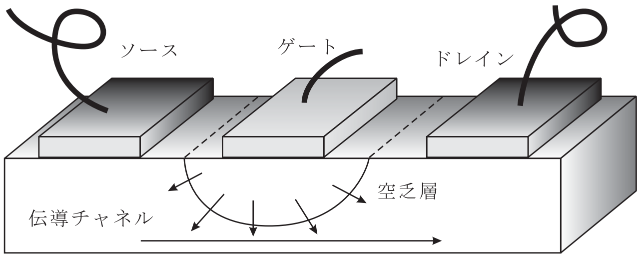
半導体物理学 第 10 回

勝本信吾
東京大学物性研究所

2011 年 6 月 17 日

5.2　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，移動度が大きいため，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ため，相補 (complementary) 回路が組めないため高密度集積には向かない．また，高速デバイスも更に後で紹介するヘテロ接合高移動度トランジスタ (High Electron Mobility Transistor, HEMT) にその座を奪われつつある．

5.3　MOS **構造**

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 (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

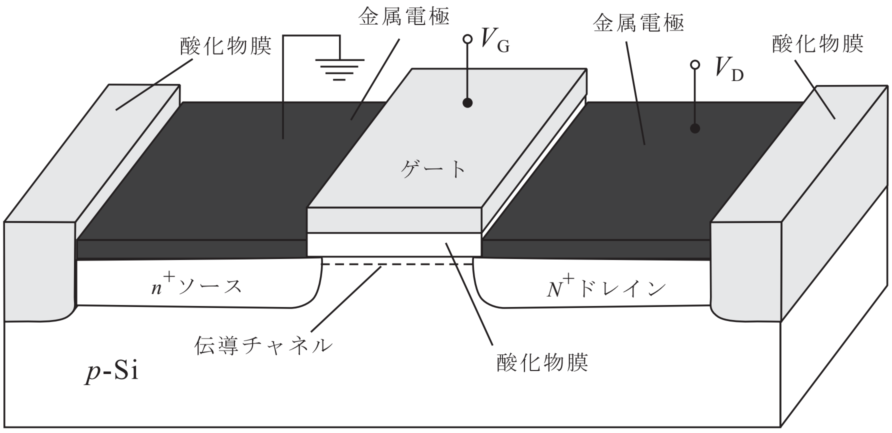


図 7.14 MOSFET 構造の概念図．熱酸化膜にリソグラフィーで穴を開けて拡散させるプロセスのため，このような構造ができ上がることが多い．

タ結合の回路 (Emitter Coulpled 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 (図 7.14)．MESFET のように空乏層でチャネルを潰す**デプレション型**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．

6 ヘテロ接合

異種の半導体を貼りあわせた構造–**ヘテロ接合**について見ていこう．

6.1 格子整合

秋山先生の講義で詳しく触れられているので実際の講義では飛ばします．

ヘテロ接合の形成上，非常に重要なのが**格子整合**である．最も明確な格子整合は，結晶型と格子定数が同じである場合に取ることができる．現実には異種の (混晶ではない) 半導体で格子定数が全く同じということは有り得ないが，物質にもよるが格子定数の違いが 0.2∼0.3% 程度以下であれば，多くの場合接合面に**不整合転位**などが入ることなく成長する．図 7.15 は，縦軸にバンドギャップ，横軸を格子定数としてプロットしたものであるが，縦に入っている灰色の帯は「この範囲であれば格子整合している」として良く使用される範囲を示している．

図 7.15 で線で結んだ所は，この間で混晶が作られることがある事を示している．混晶とは例えば (Al,Ga)As のようなもので，この半導体においては，閃亜鉛鉱型の結晶型で，III 族原子が占める格子点を，Al と Ga がある割合でランダムに占有していることを示している．完全な結晶に対して原子種の乱雑さによるポテンシャル乱れが導入されている．電子波動関数がある程度広がっていれば，ポテンシャルが平均化されることで，一種の平均的な半導体が生じていると見るのが良い近似であることも多い．特に 4 つ以上の元素を混ぜる混晶では，平均的な格子整合を取

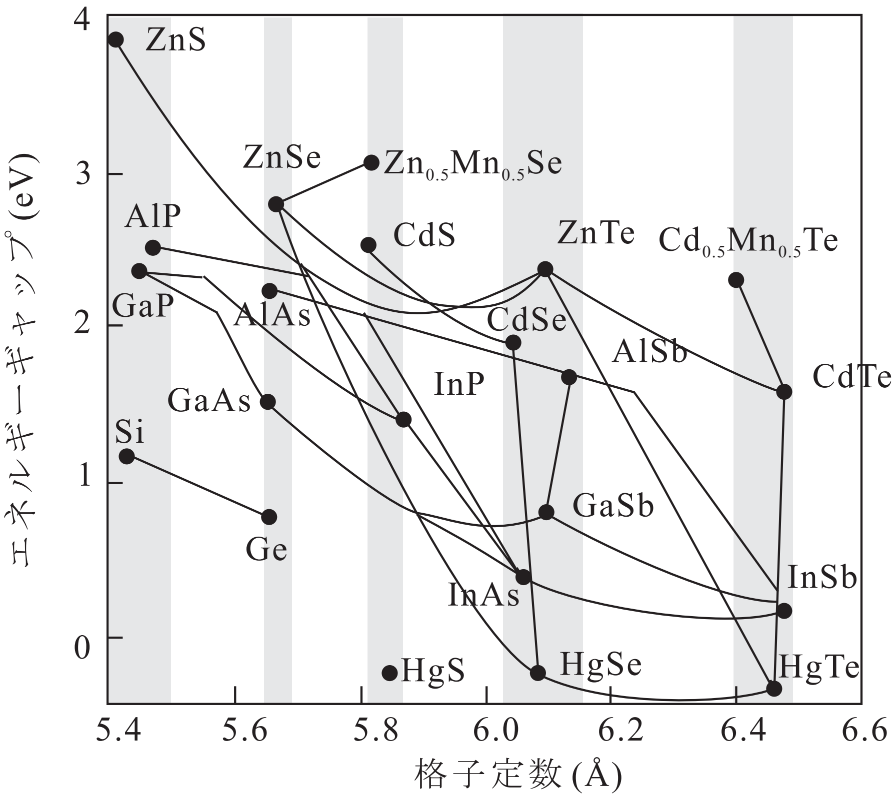


図 7.15　IV 族, III-V 族, II-VI 族を中心とする半導体の格子定数とバンドギャップの関係をプロットしたもの．灰色の帯が大まかな格子整合を表す．引かれている線は，混晶が比較的良く作られる領域を示している．

りながら，バンドギャップを調整することが可能になる．

また，格子型，格子定数ともに異なっていても，結晶軸を回転させたり，成長面を選択することで格子整合が取れる場合もある．

格子不整合がある場合でも，不整合転位を導入するにはある一定以上の弾性エネルギーを必要とするので，不整合による歪エネルギーがこれより小さい限りは不整合転位が入らずに結晶成長する．歪エネルギーは歪が入っている結晶膜が厚くなるにつれて大きくなるから，ある膜厚を境に不整合転位が入ることになる．これを**臨界膜厚**という．臨界膜厚以下で歪エネルギーを犠牲にして格子定数を合わせて成長することを，**擬似格子整合**の (pseudo-morphic) 成長と呼ぶ．不整合転位に伴う弾性エネルギーと膜全体の歪によるエネルギーを比較して見積もった臨界膜厚を Mathiews の臨界膜厚と呼ぶ．実際には，一旦 pseudomorphic に成長した界面に不整合転位を導入するには Mathiews の臨界膜厚よりも更に厚く積む必要がある．膜が厚くなって成長界面に格子不整合転位が入り，膜内の歪エネルギーが緩和されることを**格子緩和**という．

6.2　バンド不連続

ヘテロ接合を考える上でも，前に述べた，硬いバンドと接合より遠い領域でのバルクへの回帰近似はその基礎になるものである．一般に異種の半導体においてはバンドギャップが異なるので，両側から硬いバンドで繋げて行ったとすると界面でどうしてもバンドを連続にすることができない．すなわち，硬いバンドを界面まで維持すると界面に**バンド不連続**が生じることになる．

最も簡単な「ほとんど自由に近い電子の近似」で考えると，バンドの端付近の状態は定在波であり，伝導帯は反結合性軌道から成る．この反結合軌道のエネルギーの上がり方は格子によって

異なるためこれがバンド不連続を生じる，ということになる．この「格子による違い」は数原子層オーダーの距離で生じるであろう．従って，バンド不連続も数原子層オーダーで生じ，nm オーダーで見ればほぼ階段的に生じると考えられる．

これまで，第 8，9 回の講義は大変簡潔なモデルに基づいて話を進めてきたが，これは結局ブロッホ波動関数の内でも格子周期を持つ部分 $u_{n\boldsymbol{k}}$ は**有効質量近似**に繰り込み，空間的に緩やかに変化する平面波部分で生じる物理現象を見てきたからである．このような扱いが成立する条件として，(a) 格子周期部分が空間的に一様であり，(b) 平面波部分で生じるエネルギーの空間変化が格子周期に比べて十分緩やかである，というものがあった．ヘテロ接合界面では (a) の条件が破れており，これが，平面波部分に視点を限って見るとバンド不連続という形で視えることになる．格子周期関数部分の急峻な変化を伴うことであることから，「緩やかに変化する部分 (包絡関数) に対するポテンシャル及び有効質量の急峻な変化」という取り扱いがどこまで正確かは一般的な基準が今のところなく，リジッドバンドの近似が良いかどうかも含めて実験，原子ポテンシャルを考慮した第 1 原理計算などで裏付けを取るしかない．

以上の問題がクリアできたとして，バンド不連続は伝導帯と価電子帯の両者にあるので，硬いバンド近似の範囲でもどのバンドがどれだけ不連続となっているかは不定で，やはり何らかの原子波動関数に立脚した理論的考察を行い，また実験的な裏付け (あるいは実験結果による先導) が必要となる．

6.3 包絡関数近似

バンド不連続モデルを認めて，このような一種の「ポテンシャル」がある時の波動関数をどのように考えるか，見ていこう．これはかなり大変な問題であり，どんな場合でも使える処方箋があるというわけでもない．包絡関数を波動関数そのものと見てしまうやり方が成立しなくなる所以についてみてみよう．ここでは $k\cdot p$ 摂動に基づいて簡単に考察する．

今，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，

$$\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r})=\sum_l f_l^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r})u_{l\boldsymbol{k}}^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r}),\quad \psi^{(\mathrm{B})}(\boldsymbol{r})=\sum_l f_l^{(\mathrm{B})}(\boldsymbol{r})u_{l\boldsymbol{k}}^{(\mathrm{B})}(\boldsymbol{r}) \tag{7.59}$$

と書けるとする．l はバンドを表す指数で，$u_{l\boldsymbol{k}}^{(\mathrm{A,B})}$ 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．

$$u_{l\boldsymbol{k}}^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r})=u_{l\boldsymbol{k}}^{(\mathrm{B})}(\boldsymbol{r}),\quad \partial\epsilon_l^{(\mathrm{A})}/\partial\boldsymbol{k}=\partial\epsilon_l^{(\mathrm{B})}/\partial\boldsymbol{k}. \tag{7.60}$$

この簡単化により，xy 面内の 2 次元ベクトルを $\boldsymbol{r}_{xy}$ として，$z=0$ での波動関数連続条件より

$$f_l^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r}_{xy},0)=f_l^{(\mathrm{B})}(\boldsymbol{r}_{xy},0). \tag{7.61}$$

xy 面内，$\boldsymbol{r}_{xy}$ の自由度に関しては，Bloch の定理がそのまま成立すると考え，

$$f_l^{(\mathrm{A,B})} = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\boldsymbol{k}_{xy}\cdot\boldsymbol{x})\chi_l^{(\mathrm{A,B})}(z) \tag{7.62}$$

とする．ここで，$\chi_l(z)$ は z 方向に格子周期よりもずっと緩やかに変化する**包絡関数**である．χ_l 以外の xy 面の平面波的部分は $1/\sqrt{S}$ により規格化されているとする．

付録 A の包絡関数に関する $k\cdot p$ 摂動論を使用し，式 (A.4)，(A.6) に相当する式を

$$\mathscr{D}^{(0)}\left(z, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)\boldsymbol{\chi} = \epsilon\boldsymbol{\chi} \tag{7.63}$$

と書く．ただし，$N\times N$ の演算子行列 $\mathscr{D}^{(0)}$ は

$$\mathscr{D}^{(0)}_{lm}\left(z, \frac{\partial}{\partial z}\right) = \left[\epsilon_l(z) + \frac{\hbar^2k_{xy}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\delta_{lm} + \frac{\hbar\boldsymbol{k}_{xy}}{m_0}\cdot\langle l|\boldsymbol{p}_{xy}|m\rangle - \frac{i\hbar}{m_0}\langle l|p_z|m\rangle\frac{\partial}{\partial z} \tag{7.64}$$

であり，

$$\epsilon_l(z) = \epsilon_l^{(\mathrm{A})}\quad (z<0),\quad \epsilon_l^{(\mathrm{B})}\quad (z\ge 0). \tag{7.65}$$

また，$|u_{m0}\rangle$ 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

$$V_l(z) \equiv \begin{cases} 0 & z<0 \quad (z\in\mathrm{A}) \\ \epsilon_l^{(\mathrm{B})} - \epsilon_l^{(\mathrm{A})} & z\ge 0 \quad (z\in\mathrm{B}) \end{cases} \tag{7.66}$$

と書くと，結局

$$\sum_{m=1}^{N}\left\{\left[\epsilon_{m0}^{(\mathrm{A})} + V_m(z) + \frac{\hbar^2k_{xy}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\delta_{lm} - \frac{i\hbar}{m_0}\langle l|\hat{p}_z|m\rangle\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar\boldsymbol{k}_{xy}}{m_0}\cdot\langle l|\hat{\boldsymbol{p}}_{xy}|m\rangle\right\}\chi_m = \epsilon\chi_l \tag{7.67}$$

という $\{\chi_l\}$ に関する連立方程式が得られる[*1]．

以上から，バンド l の包絡関数 χ_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，χ_l は界面で連続でなければならない．一方 χ_l が連続という条件下で (7.67) が更に χ_l に課す条件は，(7.67) を界面をまたいで積分することで，

$$\mathscr{A}^{(\mathrm{A})}\chi^{(\mathrm{A})}(z_0=0) = \mathscr{A}^{(\mathrm{B})}\chi^{(\mathrm{B})}(0), \tag{7.68}$$

の形に得られる．ただし，

$$\mathscr{A}_{lm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\delta_{lm}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{2i}{\hbar}\langle l|p_z|m\rangle\right] \tag{7.69}$$

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．

[*1] 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．

6.4 包絡関数の接続 II

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

$$\begin{pmatrix} \chi^{(\mathrm{A})}(0) \\ \nabla_{\mathrm{A}}\chi^{(\mathrm{A})}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(\mathrm{B})}(0) \\ \nabla_{\mathrm{B}}\chi^{(\mathrm{B})}(0) \end{pmatrix} \tag{7.70}$$

である．ただし，a を共通な格子定数として，

$$\nabla_{\mathrm{A,B}} = \frac{m_0}{m_{\mathrm{A,B}}}\frac{\partial}{a\partial z} \tag{7.71}$$

である．$T_{\mathrm{BA}} = \{t_{ij}\}$ 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，

$$j(z) = \frac{\hbar}{2im^*}\left[\chi^*(z)\frac{\partial\chi}{\partial z} - \frac{\partial\chi}{\partial z}\chi(z)\right] \tag{7.72}$$

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ことがすぐにわかる．

$$\det T_{\mathrm{BA}} = 1. \tag{7.73}$$

この条件は T_{BA} が単位行列であれば満たされるので，最も簡単な近似として $T_{\mathrm{BA}} = I$ 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 界面について強束縛近似を使って界面行列を計算してみると，この包絡関数近似が意外に悪くないことが示される (付録 B を参照)．

Ch. 8 量子輸送

1 量子閉じ込め

前章の最後で，ヘテロ接合面が，包絡関数近似において一種の障壁として働くことを見た．接続条件は必ずしも量子力学の波動関数そのものではなかったが，この点に注意するとほぼ包絡関数を波動関数そのものとして扱うことができる．特に最も良く使用される $\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$-GaAs の界面では，通常の波動関数そのものとして扱うことがかなり良い近似である．本章以下では，特に包絡関数であることが特別な重要性を持つ場合以外は包絡関数を波動関数として考えていくことにする．

一旦このように視点を設定すると，半導体の様々な構造は極めて簡潔な初等量子力学の題材と化す．初等量子力学を思い出しながら，それがどのように実験に現れるか，楽しんでいくことができる．

1.1 閉じ込めの一般的性質

ヘテロ接合面やその他の結晶周期構造を破る手段を使って波動関数を空間の限られた領域にのみ存在するようにすることを**量子閉じ込め**と呼ぶ．ある運動の自由度を有限領域に閉じ込めると，その方向の運動エネルギーは，固有状態においては定在波条件により固有値 (運動エネルギー) が離散化する．離散化の間隔が熱揺らぎ等に比べて十分に大きければ，事実上その方向の運動自由度は凍結状態となり系の運動の次元が下がることになる．

電子系の自由度の次元 d_{f} が零，すなわち d_{c} が 3 の系を**量子ドット** (quantum dot) と呼ぶ．以下，$d_{\mathrm{f}}=1$，$d_{\mathrm{c}}=2$ の系を**量子細線** (quantum wire)，$d_{\mathrm{f}}=2$，$d_{\mathrm{c}}=1$ の系を **量子井戸** (quantum well) と呼ぶ (2 次元系なのに量子井戸と呼ぶのは，歴史的にその製法が最も早く確立したためである) ．これらの系の電子濃度 n とフェルミ波数 k_{F} との関係は

$$n = 2V_d\left(\frac{k_{\mathrm{F}}}{2\pi}\right) = \begin{cases} \dfrac{2}{(2\pi)^3}\dfrac{4\pi}{3}k_{\mathrm{F}}^3 & (d_{\mathrm{f}}=3) \\ \dfrac{2}{(2\pi)^2}\pi k_{\mathrm{F}}^2 & (d_{\mathrm{f}}=2) \\ \dfrac{2}{2\pi}k_{\mathrm{F}} & (d_{\mathrm{f}}=1) \end{cases} \tag{8.1}$$

である．ただし，V_d は d 次元空間の球の体積で係数 2 はスピンによるものである．

我々は「包絡関数の世界」として固体中の電子の振舞い，特に空間的な周期性が破れた部分での振舞いを眺める視点を整備してきた．ここで，図 8.1 を見ると，この視点を更にブロック分けして考えることができることに気付く．すなわち，包絡関数の世界における輸送現象を量子ドットを結節点，量子細線をこれらをつなぐ経路として捉える見方である．これは，例えば散乱形式の伝導理論を高い次元に広げる際に役に立つ．

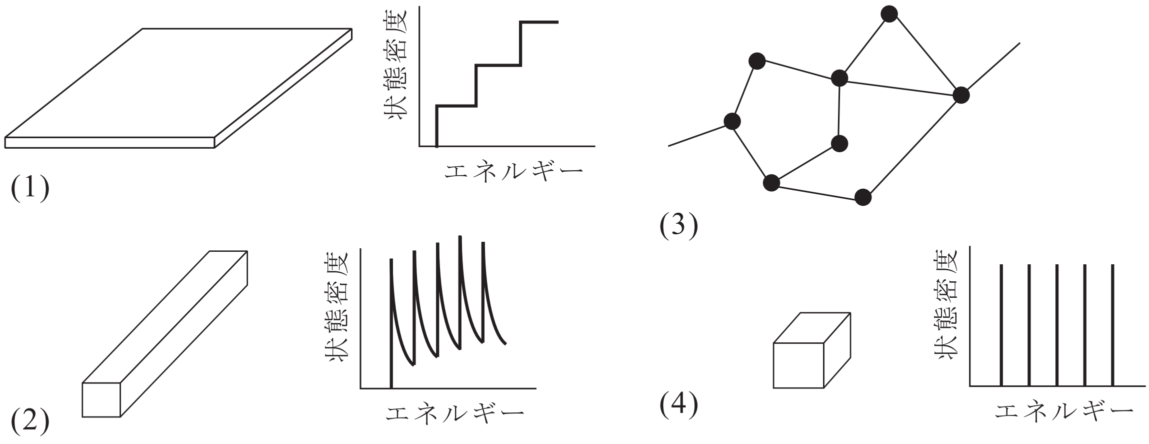


図 8.1　(1) 量子井戸　(2) 量子細線　(3) 量子細線ネットワーク　(4) 量子ドット の概念図

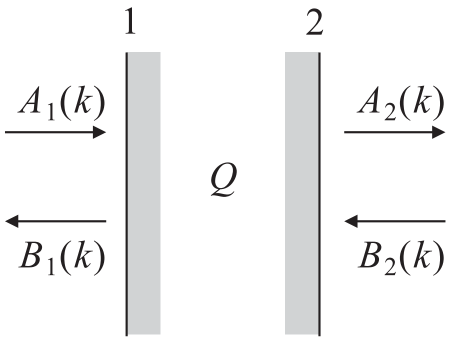


図 8.2　転送行列 (T 行列) の概念図.

1.2　初等量子力学の復習１：２重障壁ダイオードの伝導

開放系の伝導について，初等量子力学で見たことを思い出しておこう．２重障壁ダイオードは，２つの矩形的な障壁を直列に並べたものである．

1.2.1　転送行列 (T 行列)

ここで，このような伝導を扱うために，転送行列 (T 行列) を導入しておく．図 8.2 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 の矩形障壁の場合について見てみよう．障壁内の波動関数を $V_i(\kappa)+W_i(\kappa)$ と置こう．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 を障壁の左右端に取ると

$$V_2=V_1e^{-\kappa L},\qquad W_2=W_1e^{\kappa L}$$

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, $\partial A_{1,2}/\partial x=ikA_{1,2}$, $\partial B_{1,2}/\partial x=$

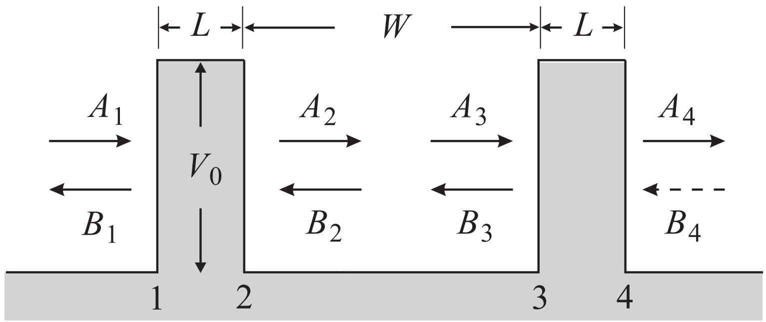


図 8.3　2 重障壁ポテンシャルの模式図.

$-ikB_{1,2}$ であるから,

$$A_1 + B_1 = V_1 + W_1, \qquad A_2 + B_2 = e^{-\kappa L}V_1 + e^{\kappa L}W_1, \tag{8.2}$$

$$ik(A_1 - B_1) = \kappa(-V_1 - W_1), \qquad ik(A_2 - B_2) = \kappa(-e^{-\kappa L}V_1 + e^{\kappa L}W_1) \tag{8.3}$$

となる．$A \sim V$ の k，κ 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

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \equiv M_T \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{8.4}$$

と書くことができ，行列 $\{m_{ij}\}$ は

$$\begin{cases} m_{11} = \left[\cosh(\kappa L) + i\dfrac{k^2 - \kappa^2}{2k\kappa}\sinh(\kappa L)\right], \\ m_{12} = -i\dfrac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa}\sinh(\kappa L), \\ m_{21} = m_{12}^*, \qquad m_{22} = m_{11}^*, \end{cases} \tag{8.5}$$

と与えられる．この M_T をここでは**転送行列**あるいは **T 行列** (Transfer matrix, T-matrix) と呼ぶ.

1.2.2　2 重障壁の透過率

図 8.3 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 (8.5) 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,

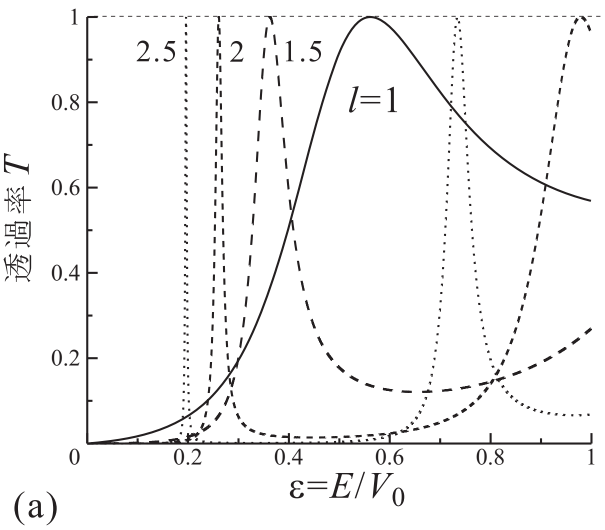
$$M_W = \begin{pmatrix} \exp(ikW) & 0 \\ 0 & \exp(-ikW) \end{pmatrix} \tag{8.6}$$

と書くことができる．2 重障壁全体の転送行列 M_{DW} は

$$M_{DW} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikW} & 0 \\ 0 & e^{-ikW} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \tag{8.7}$$

と 3 者の積で与えられ，これより

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



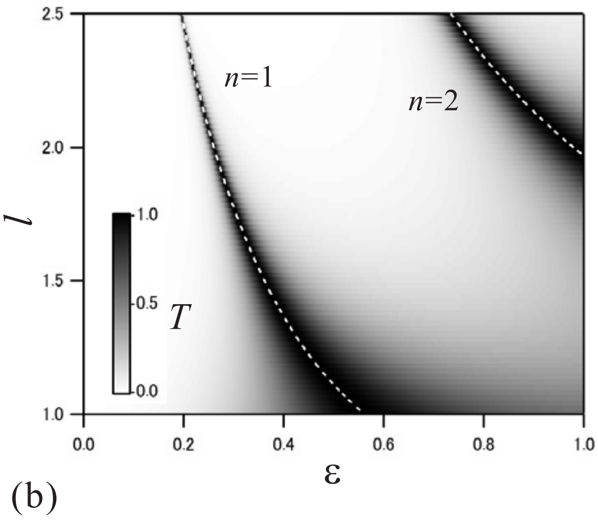


図 8.4 (a) 式 (8.5)，(8.8) から計算される 2 重障壁の透過率を透過波のエネルギー ϵ の関数として描いた．$W = 2L$ に固定し，様々な障壁層厚（従って間隔）について計算したもの．l は，$l \equiv (\sqrt{2mV_0}/\hbar)L$ で L を無次元化した量．(b) 同じ計算結果を，濃淡プロットしたもの白い点線は共鳴条件を数値計算したもの．

透過率が

$$T = \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{1}{1 + 4|m_{11}|^2|m_{12}|^2\cos^2(\varphi + kW)} \tag{8.8}$$

と計算される．

図 8.4 は $W = 3L$ の場合について，(8.8) 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．

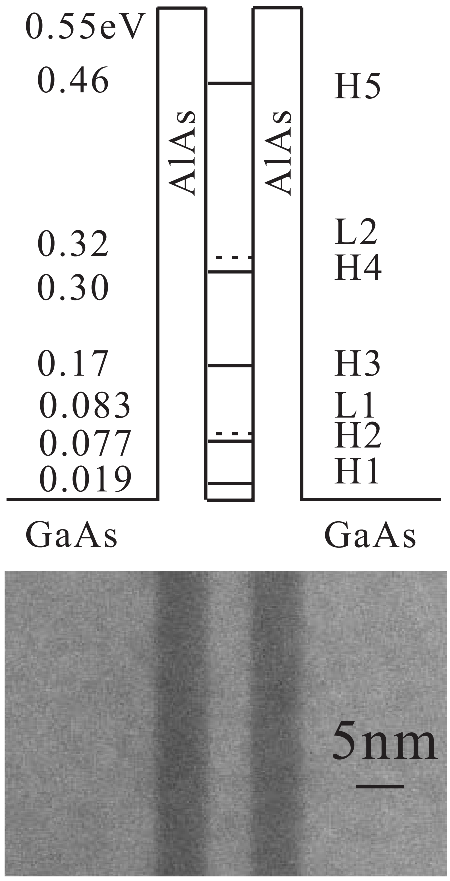
1.2.3 **2 重障壁ダイオードの実験**

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 8.5(b) のように，バイアス電圧 V_b が，共鳴位置 E_r に対して

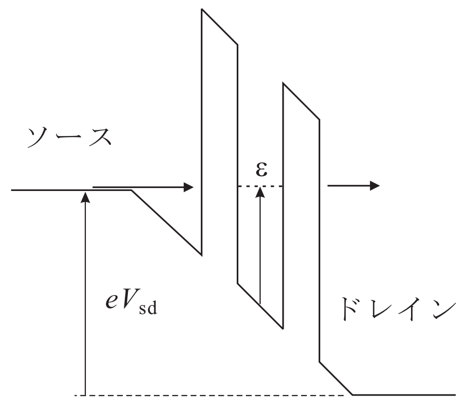
$$V_b = E_r/2e \tag{8.9}$$

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 8.5(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 の構造ができている．成長方向 (障壁面に垂直な方向) は [001] である (閃亜鉛鉱構造については秋山先生の講義を参照)．p 型の試料であるため，重い正孔と軽い正孔が存在する．$\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$ は秋山先生の講義で見たように，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らないが，価電子帯に関しては，Al 組成が 1 すなわち AlAs まで増や



(a)



(b)

図 8.5　(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．

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 8.5 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 (表式の導出は本日の問題) 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．

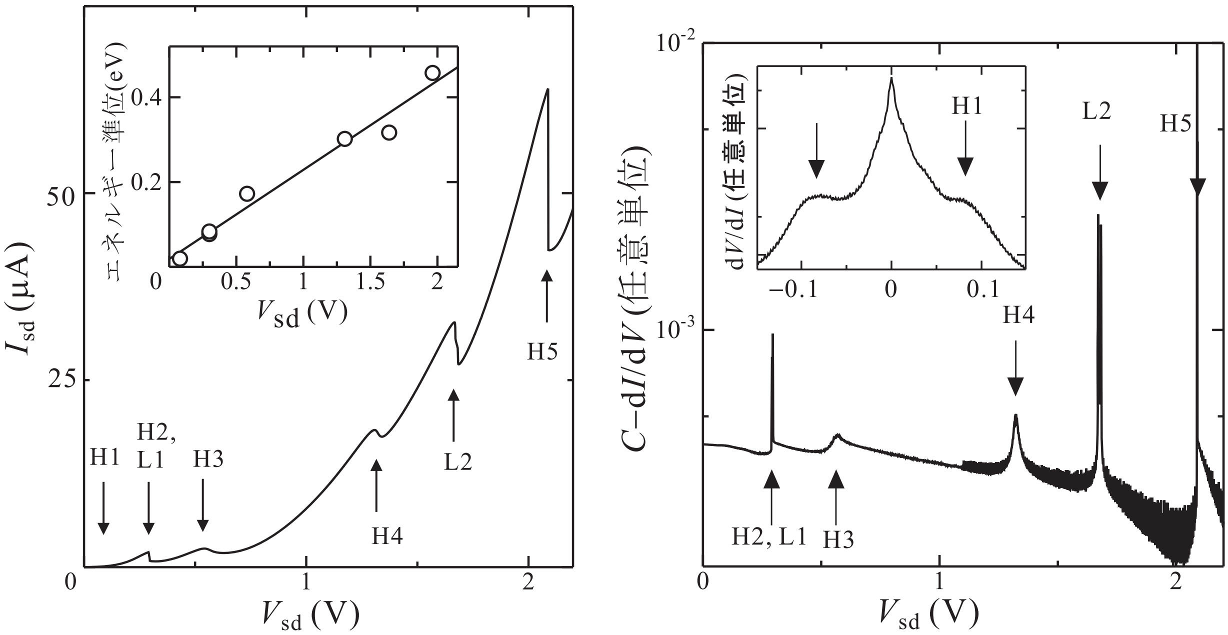
重い正孔は，有効質量が異方的で歪み (warping) を持っているが，[001] 方向に関してはこの有効質量で (結果的には) 良い近似である．また，２次元的な閉じ込めを行うことで面内の分散関係は大きく変化するが，面垂直方向はバルクの有効質量が第１近似となる．

図 8.6 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 (8.9) 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 C 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] G. Bastard, “Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures” (John Wiley and Sons, New York, 1990).

[2] 安藤恒也,「大学院物性物理１　量子物性」(講談社, 1996) (ただし，変分のところは若干ミスプリントが多いので要注意).



(a)

(b)

図 8.6　(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．

[3] M. Mizuta and T. Tanoue, “The physics and applications of resonant tunnelling diodes”, (Cambridge University Press, 1995).

付録 A：非格子周期ポテンシャルに対する包絡関数近似

格子のハミルトニアン $\mathscr{H}_0$ と非格子周期ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ からなる系を考える．

$$[\mathscr{H}_0 + V(\boldsymbol{r})]\,\psi(\boldsymbol{r}) = \epsilon\psi(\boldsymbol{r}). \tag{A.1}$$

ψ を格子周期部分 $u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ とそれ以外の $f_n(\boldsymbol{r})$ の積に分解 (n はバンドの指数)．規格化は単位格子体積 Ω_0 に対し

$$\frac{1}{\Omega_0}\int_{\Omega_0} u^*_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})u_{n'\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})d^3r = \delta_{nn'}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \tag{A.2}$$

とされている．$\boldsymbol{k}=0$ の周りで

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=1}^{N} c_l f_l(\boldsymbol{r})u_{l0}(\boldsymbol{r})d^3r \tag{A.3}$$

と展開する．N は取り込むバンド数である．規格化は，規格化体積を Ω として，

$$\sum_l \int_\Omega |f_l(\boldsymbol{r})|^2 d^3r = 1, \qquad \sum_l |c_l|^2 = 1$$

である．III-V 族などでは，現実的な展開として $N=8$ とすることが多い．

(A.1) より $\langle\psi|[\mathscr{H}_0+V(\boldsymbol{r})]|\psi\rangle=\epsilon$ であり，これに (A.3) を代入する．

$$\sum_{l=1}^{N} c_l \int_\Omega d^3r \left\{(\epsilon_l-\epsilon)f_m^* f_l u_{m0}^* u_{l0} + u_{m0}^* u_{l0} f_m^* \frac{\hat{p}^2}{2m_0} f_l \right.$$
$$\left. + \frac{1}{m_0} u_{m0}^* \hat{\boldsymbol{p}} u_{l0} \cdot f_m^* \hat{\boldsymbol{p}} f_l + f_m^* V(\boldsymbol{r}) f_l u_{m0}^* u_{l0} \right\} = 0.$$

スピン軌道相互作用は落としている．これより，

$$\int_\Omega d^3r \sum_{l=1}^{N} c_l \left\{\delta_{lm}\left[\epsilon_l-\epsilon+\frac{p^2}{2m_0}+V(\boldsymbol{r})\right]+\boldsymbol{p}_{ml}\cdot\boldsymbol{p}\right\} f_l(\boldsymbol{r})=0, \tag{A.4}$$

ただし，

$$\boldsymbol{p}_{ml}=\frac{1}{m_0\Omega}\int_\Omega u_{m0}^*\boldsymbol{p}u_{l0}d^3r=\frac{1}{m_0\Omega_0}\int_{\Omega_0} u_{m0}^*\boldsymbol{p}u_{l0}d^3r. \tag{A.5}$$

すなわち，格子周期関数部分は $\boldsymbol{p}_{ml}$ へ繰り込まれて見かけ上空間的に緩やかに変化する f だけの方程式となっている．(A.4) を

$$[\mathscr{D}+V(\boldsymbol{r})]\,|\boldsymbol{f}\rangle=\epsilon|\boldsymbol{f}\rangle \tag{A.6}$$

の形に書くこともできる．この時，$\mathscr{D}$ は $N\times N$ の演算子を要素とする行列，$|\boldsymbol{f}\rangle$ は N 次元の列ベクトルである．

付録 B：1 次元鎖モデルによる界面行列の計算

III-V 族へテロ界面を 1 次元の原子の鎖で近似する (linear chain model)．定数 $a/2$ の単位格子に ϵ_0 の III 族の s 軌道，$\epsilon_1<\epsilon_0$ の IV 族の p 軌道があるとする．単位格子の指数を n とし，各格子の s，p それぞれの軌道振幅を $C_0(n)$, $C_1(n)$，隣接原子間の共鳴積分を t とする．

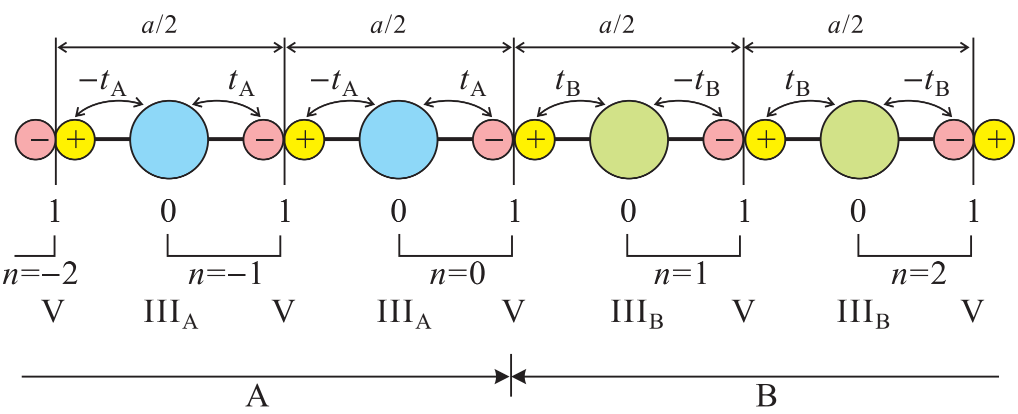


図 8.7　III 族が変化する III-V 族半導体へテロ接合の 1 次元鎖モデル．III 族原子が変化する中間の V 族原子位置を界面にとった．

まず，界面を持たない無限長の鎖について考えると

$$\left.\begin{aligned}\epsilon_0 C_0(n) - tC_1(n-1) + tC_1(n) = \epsilon C_0(n)\\ \epsilon_1 C_1(n) - tC_0(n) + tC_0(n+1) = \epsilon C_1(n)\end{aligned}\right\} \tag{B.1}$$

であり，解は

$$\left.\begin{aligned}C_0(n) &= C_0 \exp[ik(n-1/2)a/2]\\ C_1(n) &= C_1 \exp[ikna/2]\end{aligned}\right\} \tag{B.2}$$

で，

$$\begin{pmatrix}\epsilon_0 & 2it\sin(ka/4)\\ -2it\sin(ka/4) & \epsilon_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_0\\ C_1\end{pmatrix} = \epsilon\begin{pmatrix}C_0\\ C_1\end{pmatrix} \tag{B.3}$$

を満たす．従って，このモデルでは，バンドパラメーター

$$\epsilon_g = \epsilon_0 - \epsilon_1, \quad \epsilon(k) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad m^* = \frac{2\hbar^2\epsilon_g}{t^2 a^2} \tag{B.4}$$

となるようなバンドが形成される．

伝導帯の底は，$C_0 = 1$，$C_1 = 0$ と完全に s 軌道が支配し，底付近では，包絡関数 χ と

$$\left.\begin{aligned}C_0(1) &= \chi(a/4) \approx \chi(0) + \frac{a}{4}\chi'(0)\\ C_0(0) &= \chi(-a/4) \approx \chi(0) - \frac{a}{4}\chi'(0)\\ C_1(0) &= \frac{ta}{2\epsilon_0}\chi'(0)\end{aligned}\right\} \tag{B.5}$$

という関係が得られる．(完全な「底」では χ はもちろん定数．)

次に界面を取り入れよう．界面に次のような近似を行う．界面の両側をそれぞれ A 層，B 層とし，$\mathrm{III_AV}$，$\mathrm{III_BV}$ と表そう．界面にある V 原子の p 軌道エネルギーは

$$\epsilon_1^{\mathrm{AB}} = (\epsilon_1^{\mathrm{A}} + \epsilon_1^{\mathrm{B}})/2$$

と両者の平均を取り，他は無限長の鎖と同じとする．

界面 V 原子についての方程式は，界面 V 族原子の軌道振幅を $C_1^{\mathrm{AB}}(n)$ として

$$\epsilon_0^{\mathrm{A}} C_0^{\mathrm{A}}(0) - t_{\mathrm{A}} C_1^{\mathrm{A}}(-1) + t_{\mathrm{A}} C_1^{\mathrm{AB}}(0) = \epsilon C_0^{\mathrm{A}}(0) \tag{B.6a}$$

$$\epsilon_0^{\mathrm{B}} C_0^{\mathrm{B}}(1) - t_{\mathrm{B}} C_1^{\mathrm{A}}(0) + t_{\mathrm{B}} C_1^{\mathrm{B}}(1) = \epsilon C_0^{\mathrm{B}}(1) \tag{B.6b}$$

$$\epsilon_1^{\mathrm{AB}} C_1^{\mathrm{AB}}(0) - t_{\mathrm{A}} C_0^{\mathrm{A}}(0) + t_{\mathrm{B}} C_0^{\mathrm{B}}(1) = \epsilon C_1^{\mathrm{AB}}(0) \tag{B.6c}$$

である．一方，バルク A，B から外挿した波動関数を $C_1^{\mathrm{A,B}}(n)$ と書くと

$$\epsilon_0^{\mathrm{A}} C_0^{\mathrm{A}}(0) - t_{\mathrm{A}} C_1^{\mathrm{A}}(-1) + t_{\mathrm{A}} C_1^{\mathrm{A}}(0) = \epsilon C_0^{\mathrm{A}}(0) \tag{B.7a}$$

$$\epsilon_0^{\mathrm{B}} C_0^{\mathrm{B}}(1) - t_{\mathrm{B}} C_1^{\mathrm{B}}(0) + t_{\mathrm{B}} C_1^{\mathrm{B}}(1) = \epsilon C_0^{\mathrm{B}}(1) \tag{B.7b}$$

であるから，以上の式から

$$C_1^{\mathrm{A}}(0) = C_1^{\mathrm{B}}(0) = C_1^{\mathrm{AB}}(0) \tag{B.8}$$

が得られる．

同様に左右から外挿した $C_0^{\mathrm{A}}(1)$，$C_0^{\mathrm{B}}(0)$ に対する方程式から

$$t_{\mathrm{A}}[C_0^{\mathrm{A}}(1)+C_0^{\mathrm{A}}(0)]=t_{\mathrm{B}}[C_0^{\mathrm{B}}(0)+C_0^{\mathrm{B}}(1)] \tag{B.9}$$

が得られる．

以上得られた境界条件 (B.8)，(B.8) を包絡関数との関係式 (B.5) に適用することで次の界面行列が得られる．

$$T_{\mathrm{BA}}=\begin{pmatrix} t_{\mathrm{A}}/t_{\mathrm{B}} & 0 \\ 0 & t_{\mathrm{A}}\epsilon_g^{\mathrm{B}}m_{\mathrm{A}}/t_{\mathrm{B}}\epsilon_g^{\mathrm{A}}m_{\mathrm{B}} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sqrt{\epsilon_g^{\mathrm{A}}m_{\mathrm{B}}/\epsilon_g^{\mathrm{B}}m_{\mathrm{A}}} & 0 \\ 0 & \sqrt{m_{\mathrm{A}}\epsilon_g^{\mathrm{B}}/m_{\mathrm{B}}\epsilon_g^{\mathrm{A}}} \end{pmatrix}. \tag{B.10}$$

非常に簡単なモデルではあったが，有効質量とバンドギャップだけの関係になったので，現実のパラメーターを代入することが形式的には可能である．A として GaAs，B として $\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$ を取る．$\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$ は混晶であるが，界面付近では平均的に $\mathrm{III_B V}$ と近似できると考える．x は余り大きくないとして有効質量を $m^*=0.067m_0(1+0.895x)$，バンドギャップを $\epsilon_g=1.529(1+1.333x)(\mathrm{eV})$ として計算すると，

$$T_{\mathrm{BA}}\approx\begin{pmatrix} 1+0.22x & 0 \\ 0 & 1-0.22x \end{pmatrix} \tag{B.11}$$

で，単位行列からのずれは小さいことがわかる．

付録 C: 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，

$$\begin{aligned} J_{\mathrm{L}\to\mathrm{R}} &= e\sum_k v_{gz}f_{\mathrm{L}}(1-f_{\mathrm{R}})\mathcal{T} \\ &= \frac{2e}{(2\pi)^3\hbar}\int\int \mathrm{d}^2k_\parallel \mathrm{d}k_z\left(\frac{\partial E_z}{\partial k_z}\right)f_{\mathrm{L}}(1-f_{\mathrm{R}})\mathcal{T} \\ &= \frac{em}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{d}E_z\mathrm{d}E_\parallel f_{\mathrm{L}}(E)(1-f_{\mathrm{R}}(E))\mathcal{T}(E_z) \end{aligned} \tag{C.1}$$

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，

$$J=(J_{\mathrm{L}\to\mathrm{R}}-J_{\mathrm{R}\to\mathrm{L}})=\int_0^\infty \mathrm{d}E_z\mathcal{T}(E_z)S(E_z) \tag{C.2}$$

$$S(E_z)\equiv\frac{em}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty\{f_{\mathrm{L}}(E)-f_{\mathrm{R}}(E)\}\,dE_\parallel \tag{C.3}$$

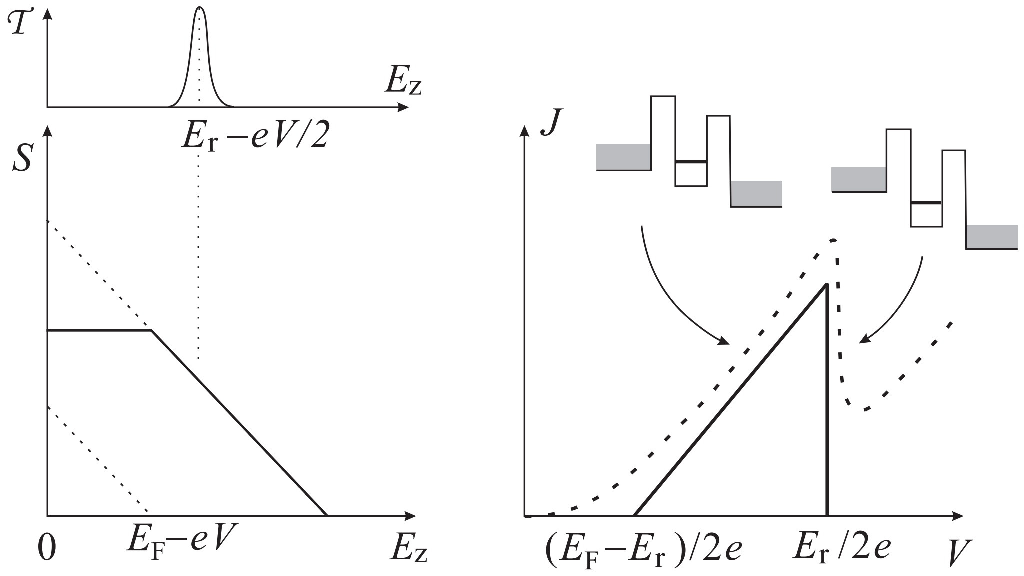


図 8.8　左：フェルミ縮退している場合の供給関数を模式的に描いたもの．上は $E_r - eV/2$ にピークを持つ透過率 $\mathcal{T}$．右：左の供給関数と透過率から予想される定性的な電流電圧特性の模式図．

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

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

と計算される．フェルミ縮退している場合には,

$$S(E_z) = \begin{cases} (em/2\pi^2\hbar^3)(E_F - E_z) & (E_F - V \le E_z \le E_F) \\ (em/2\pi^2\hbar^3)eV & (0 \le E_z \le E_F - eV) \end{cases} \tag{C.5}$$

と，台形関数となる．以上から，$eV < E_F$ の場合は

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

と計算される．

S は図 8.8 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，$\mathcal{T}$ 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 8.8 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．