

光・量子電子工学

古屋一仁

1 . 本講義「光・量子電子工学」とは	3
第一部 レーザの基礎	4
2 . 光と物質のコヒーレント相互作用	4
2 . 1 . 相互作用ハミルトニアン	4
2 . 2 . 振動電気双極子	4
2 . 3 . 光と原子の相互作用の原理	8
3 . 密度行列法による統計的取り扱い	11
3 . 1 . 密度行列法とは	11
3 . 2 . 二重の統計性	11
3 . 3 . 密度演算子	12
3 . 3 . 1 量子力学復習	12
3 . 3 . 2 密度演算子	13
3 . 4 . 密度演算子行列要素の運動方程式	14
3 . 5 . 密度行列要素とその初期条件	15
4 . 光と物質の緩和を考慮した相互作用	16
4 . 1 . 分極による電磁波励振	16
4 . 2 . 密度演算子で表した分極	17
4 . 3 . 電界中での密度演算子	17
4 . 4 . 不規則擾乱による密度演算子緩和	18
4 . 5 . ポピュレーション演算子で表した多数原子の状態	19
4 . 6 . 媒質中の光伝搬	21
4 . 7 . 利得と屈折率	23
5 . レーザ発振	25
5 . 1 . 共振器固有モード	26
5 . 2 . 分極による電界励振	27
5 . 3 . 電界による分極励振	28
5 . 4 . 電磁波と原子の結合方程式	29
5 . 5 . 定常発振状態	31
5 . 6 . レーザ発振しきい値	32
5 . 7 . 周波数引っ張り現象	33
5 . 8 . 利得スペクトル線幅広がり	33

第二部 量子ナノエレクトロニクスの基礎	34
6 . 周期ポテンシャルとブロッホ関数	34
7 . クローニッチ・ペニー・モデル (厳密数値解)	37
7 . 1 ブロッホ関数定式化.....	37
7 . 2 分散関係と波動関数の数値解	38
7 . 3 バンドギャップと定在波.....	39
7 . 4 結晶中電子の奇異な振る舞いの起源.....	40
8 . 結合波理論による近似解析.....	41
8 . 1 ブラッグ反射係数によるブロッホ関数表現.....	41
8 . 2 有効質量	43
8 . 3 分散関係	44
8 . 4 ブラッグ反射係数.....	44
8 . 5 平均確率密度と確率流密度.....	44
8 . 6 波束の運動速度.....	46
9 . ヘテロ接合ナノ構造中の電子	49
9 . 1 ヘテロ界面での境界条件	49
9 . 2 ヘテロナノ構造中電子の行列解析.....	50
9 . 3 放物線近似.....	52
9 . 4 有効質量近似方程式.....	53
9 . 5 非放物線特性を取り入れた有効質量近似方程式.....	55
9 . 6 ヘテロ接合境界でのブロッホ関数接続の様子	56
9 . 7 結合波近似解析、有効質量近似方程式解析 (放物線、非放物線性補正) 比較	57
10 . 半導体中の非熱平衡電子波伝搬実証	61

1 . 本講義「光・量子電子工学」とは

講義概要

レーザと量子効果エレクトロニクスについて講義する。レーザは既に実用化、量子効果エレクトロニクスはこれから。第一部ではレーザの原理として光と物質との相互作用を量子力学で説明、第二部では結晶中の電子の振る舞いを調べエレクトロニクス応用を探る。

講義の進め方・成績評価については、宿題を出すので必ず毎回勉強して提出すること。成績は提出した宿題と期末評価とで総合評価する。

参考書

- ・ D.Marcuse;Engineering Quantum Electrodynamics, Harcourt, Brace & World Inc.,1970
- ・ M. Sargent, M. O. Scully, W. E. Lamb;Laser Physics, Addison-Wesley Publishing Company, 1974
- ・ 旧版テキスト：2002 年度まで使用

平成 20 年度 講義スケジュール

4/14	第 1 回	光と物質のコヒーレント相互作用	2.1、 2.2
4/21	第 2 回	光と物質のコヒーレント相互作用	2.2
4/28	第 3 回	光と物質のコヒーレント相互作用	2.3
5/12	第 4 回	密度行列法による統計的取り扱い	3.1、 3.2、 3.3
5/19	第 5 回	密度行列法による統計的取り扱い	3.4、 3.5
5/28	第 6 回	光と物質の緩和を考慮した相互作用	4.1、 4.2、 4.3、 4.4
6/02	第 7 回	光と物質の緩和を考慮した相互作用	4.5、 4.6、 4.7
6/09	第 8 回	レーザ発振	5.1、 5.2、 5.3
6/16	第 9 回	レーザ発振	5.4、 5.5、 5.6、 5.7、 5.8
6/23	第 1 0 回	周期ポテンシャルとブロッホ関数	6、 7
6/30	第 1 1 回	クローニッヒペニーモデル厳密解	7
7/07	第 1 2 回	結合波理論による近似解析	8
7/14	第 1 3 回	ヘテロ接合ナノ構造中の電子	9
7/24	第 1 4 回	半導体中の電子波伝搬観測実験	10

第一部 レーザの基礎

2. 光と物質のコヒーレント相互作用

量子力学の説明（復習）はまとめて述べることはしない。各所で量子力学の原理、考え方を確認しながら進む。そのための演習を準備した。

ハミルトン力学に量子論の要請を課して量子力学が組み立てられる過程に興味がある者は旧版参照。

2.1. 相互作用ハミルトニアン

電界が存在する空間での電子のハミルトニアンは次で与えられる。

$$H = H_0 + H_{\text{int}}$$

右辺の第一項は電界が無いときの電子のハミルトニアン $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

ここに m は電子質量、 V は静電ポテンシャルである。

第二項は電界と電子との相互作用を表す相互作用ハミルトニアン $H_{\text{int}} = -e\mathbf{r}\cdot\mathbf{E} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{E}$

ここに e は電子電荷（マイナス値）、 \mathbf{r} は電子の位置、 $\boldsymbol{\mu} (=e\mathbf{r})$ をダイポールモーメントと呼ぶ。

相互作用ハミルトニアンが上の形になる根拠は説明省略。興味がある者は旧版参照。

2.2. 振動電気双極子

孤立二準位原子と電磁波との相互作用を考える。電磁波は量子化せずに古典的に扱う（半古典論）。電子の波動関数は次のシュレーディンガの方程式を満たす。

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = (H_0 + H_{\text{int}})\psi$$

この解を調べよう。まずは相互作用がない場合から。方程式とその解は次のようになる。

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = H_0\psi \quad \psi = \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)\phi_n(\mathbf{r})$$

ただし $\phi_n(\mathbf{r})$ は次の時間を含まない次の固有値方程式の固有関数である。

$$H_0\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r})$$

今、二準位系、すなわちエネルギー固有値が E_1 と E_2 の二つのエネルギー固有状態のみを考える。原子の周りに存在する電子の状態は、一般に、固有関数の重ね合わせで表される。固有関数は二つのみなので次の形になる。

$$\psi = a_1 \exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right)\phi_1(\mathbf{r}) + a_2 \exp\left(-i\frac{E_2}{\hbar}t\right)\phi_2(\mathbf{r})$$

ここに a_1 および a_2 は展開係数である。この式を用いて電子の位置の期待値 $\langle \mathbf{r} \rangle$ は次式で表される。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle &= \iiint \psi^* \mathbf{r} \psi d\mathbf{r} \\ &= |a_1|^2 \iiint \phi_1^* \mathbf{r} \phi_1 d\mathbf{r} + |a_2|^2 \iiint \phi_2^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r} + 2 \operatorname{Re} \left[a_1^* a_2 \exp\left(i\frac{E_1 - E_2}{\hbar}t\right) \iiint \phi_1^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r} \right] \end{aligned}$$

となる。

ところで $\iiint \phi_1^* \mathbf{r} \phi_1 d\mathbf{r} = \iiint \phi_2^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r} = 0$ である。これを 1 次元問題で説明する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^* x \phi_1 dx = \int x |\phi_1(x)|^2 dx$$

ポテンシャルが空間的に対称分布しているときには固有関数 $\phi_1(x)$ は、 $x=0$ に関して対称(偶関数)あるいは反対称関数(奇関数)となる(パリティをもつ)。したがって $|\phi_1(x)|^2$ は偶関数であり、上の式の被積分関数は奇関数である。奇関数を $-$ から $+$ まで積分すると 0 となるからである。同様にして $\iiint \phi_2^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r} = 0$ も成り立つ。

固有関数に適当な位相因子をかけることができるから $\iiint \phi_1^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r}$ を実数にすることができる。 $a_1^* a_2 = |a_1^* a_2| \exp(i\phi)$ 、 $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ とおくと、電子位置の期待値は次になる。

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \iiint \psi^* \mathbf{r} \psi d\mathbf{r} = 2|a_1^* a_2| \left(\iiint \phi_1^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r} \right) \cos(\omega_0 t - \phi)$$

演習 2 - 2 (量子力学の確認)

- 1 A君は $\iiint \psi^* \mathbf{r} \psi d\mathbf{r}$ は「位置 \mathbf{r} に電子が見いだされる確率」と考えた。A君の量子力学は正しいか。もし違うなら、これの正確な意味を述べよ。そして「位置 \mathbf{r} (の近傍の微小体積 V 中) に電子が見いだされる確率」はどう表されるか? 答えよ。
- 2 ポテンシャルが対称だと固有関数がパリティをもつことを証明せよ。
- 3 「固有関数に適当な位相因子をかけることができる」のは何故か? またそうすることで $\iiint \phi_1^* \mathbf{r} \phi_2 d\mathbf{r}$ を実数にすることができるのはどうしてか? 説明せよ。
- 4 イメージを具体的にするために 1次元で考えて

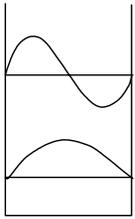
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = 2 |a_1^* a_2| \left(\int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^* x \phi_2 dx \right) \cos(\omega_0 t - \phi)$$
 を時間に対してプロットせよ。何かが振動している。まず角周波数は何によって決まるか? 次に縦軸は何か?
- 5 B君は上の振動について「電子の状態が二つの準位の間を行ったり来たりしているのだ」と考えた。彼は正しいか。もし違うなら何が振動しているのか説明せよ。
- 6 展開係数 a_1 か a_2 のいずれかが零の場合は上の振動は停止することを確かめよ。振動は電子がどういう状態の時に起きるのか説明せよ。
- 7 以上を考えた後に「孤立二準位原子は二つの準位のいずれにも存在確率がある場合に、電子は空間的に振動する。振動周波数は二準位間のエネルギー差で決まる。」を確認せよ。

上で得た「電子が空間的に振動する」事実を別の方法で調べよう。1次元にして電子が x の位置に見出される確率を調べると次になる。

$$|\psi|^2 = \left| a_1 \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) \phi_1(x) + a_2 \exp\left(-i \frac{E_2}{\hbar} t\right) \phi_2(x) \right|^2 = \left| a_1 \exp(i\omega_0 t) \phi_1(x) + a_2 \phi_2(x) \right|^2$$

ここで $\phi_1(x)$ および $\phi_2(x)$ はそれぞれエネルギー固有状態 1 および 2 の波動関数。ポテンシャルが対称なのでそれぞれ偶および奇関数である。

演習 2 - 2



原子に束縛された電子の簡単化したモデルとして量子井戸中の電子を考える(図)。一番エネルギーの低い状態を 1、その次に低い状態を 2 とする。

8 ϕ_1 および ϕ_2 を求めよ。プロットせよ。パリティはあるか。横および縦軸はそれぞれ何か。

$|\phi_1|^2$ と $|\phi_2|^2$ をプロットせよ。そのプロットの縦軸の物理的意味は何か。

9 電子がエネルギー固有状態 1 にあることが分かっているとして「電子はどこに存在するか?」と問われたらどう答えるか。この問いに対する量子力学の答え方はどんなものか。その答えの具体的な数値はいくらか? この値は時間によって変化するか? 次にエネルギー固有状態 2 についての同様の問い答えよ。

10 電子がエネルギー固有状態 1 と 2 の重ね合わせ状態にあるとしよう。 $a_1 = a_2$ 、 $t=0$ で $|\psi|^2$ をプロットせよ。「電子はどこに存在するか」に対する量子力学の答えを図中で指し示せ。次に時刻を $t = \pi/\omega_0$ にしたらプロットはどうなるか、そして電子はどこに存在するか? 二つの時刻だけでなく一般の時刻でどうなるか考えよ。

11 二つのエネルギー固有状態の重ね合わせ状態にある電子の存在位置は時間によって変化するか? 電子位置と時間の関係の概略をプロットせよ。一つの固有状態にある場合と違うのか。

12 以上の作業は上で求めた $\langle r \rangle$ の時間変化とどんな関係にあるか考えよ。

二つのエネルギー固有状態の重ね合わせ状態の電子位置は時間的に変化する。イオンのプラス電荷は空間的に固定されている。一方、電子のマイナス電荷は上で調べたように時間的に振動している。マイナス電荷とプラス電荷の位置がずれている。このように大きさが等しく符号が反対の電荷が位置ずれを起こして配置されたものは電気双極子であるが、電気双極子の向き(マイナス電荷からプラス電荷に向かう)が時間的に振動している。振動周波数はエネルギーレベル差で決まる。電子と電磁波とのエネルギーのやりとりはこの振動電気双極子を介して行われると解釈できる。原子(原子内部の電子)が高エネルギーレベルの固有状態を占めているときには電子分布は振動しない。二つのレベルにまたがった状態のときに振動する電気双極子になる。原子が低エネルギーレベルの固有状態を占めているときには再び電子分布は振動しない。

2.3. 光と原子の相互作用の原理

相互作用ハミルトニアンを考慮しよう。簡単のために1次元問題としよう。

$$E_x(t) = E_0 \cos \omega t \quad H_{\text{int}} = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = -exE_0 \cos \omega t = -\mu E_0 \cos \omega t$$

これを代入すると、シュレーディンガー方程式は次になる。

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = (H_0 - \mu E_0 \cos \omega t) \psi \quad (1)$$

これを解くのに一般解の展開係数 a_1 および a_2 を時間の関数としてみる。

$$\psi(x,t) = a_1(t) \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) \phi_1(x) + a_2(t) \exp\left(-i \frac{E_2}{\hbar} t\right) \phi_2(x) \quad (2)$$

式(1)(2)から $\mu_{12} = \iiint \phi_1^* \mu \phi_2 d\mathbf{r}$ を用いて、次が成り立つ。

$$i\hbar \frac{da_1}{dt} = -\frac{\mu_{12} E_0}{2} a_2 [\exp(i(\omega - \omega_0)t) + \exp(-i(\omega + \omega_0)t)] \quad (3)$$

演習 2 - 3

1 式(3)を導き出せ。

ヒント：まず式(2)を(1)に代入し、 $H_0 \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r})$ ($n=1,2$) を用いよ。

次ぎに両辺に ϕ_1^* をかけて全空間で体積積分せよ。そのとき波動関数の規格直交性

$$\iiint \phi_n^* \phi_m d\mathbf{r} = \delta_{nm} \text{ を用いよ。}$$

式(3)で[]内の第一項は二つの角周波数が近い場合に時間に対して緩やかに変化し、第二項はいつでも速く振動変化する。微分方程式を解く過程で時間積分を行うが、速く振動する項は時間積分値は小さい(プラスマイナスがうち消し合って積分結果が残らない)。そこで速く振動する項は最初から除外する(回転波近似)。すると次になる。

$$i\hbar \frac{da_1}{dt} = -\frac{\mu_{12} E_0}{2} a_2 \exp(i(\omega - \omega_0)t)$$

同様にして、
$$i\hbar \frac{da_2}{dt} = -\frac{\mu_{12}E_0}{2} a_1 \exp(-i(\omega - \omega_0)t)$$

この連立微分方程式を解くと、 $\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar}\right)^2}$ として次になる。

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{2i\hbar}{\mu_{12}E_0} \exp\left(i\frac{\omega - \omega_0}{2}t\right) \left(\left(\frac{\Omega}{2}S - i\frac{\omega - \omega_0}{2}C\right) \cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + \left(-\frac{\Omega}{2}C - i\frac{\omega - \omega_0}{2}S\right) \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right) \\ a_2 &= \exp\left(-i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)t\right) \left(C \cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) + S \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right) \end{aligned} \quad (4)$$

演習 2 - 3

2 式(4)を導き出せ。

時刻 0 で低エネルギー固有状態にある原子に電磁波が作用し始めたとする。初期条件として、 $a_1(0) = \exp(i\phi)$ 、 $a_2(0) = 0$ とすると、 $C=0$ であり $S = i\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar\Omega} \exp(i\phi)$ である。

$$\begin{aligned} a_1 &= \left(\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i\left(\frac{\omega - \omega_0}{\Omega}\right) \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \right) \exp\left(i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)t + i\phi\right) \\ a_2 &= i\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar\Omega} \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right) \exp\left(-i\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)t + i\phi\right) \end{aligned}$$

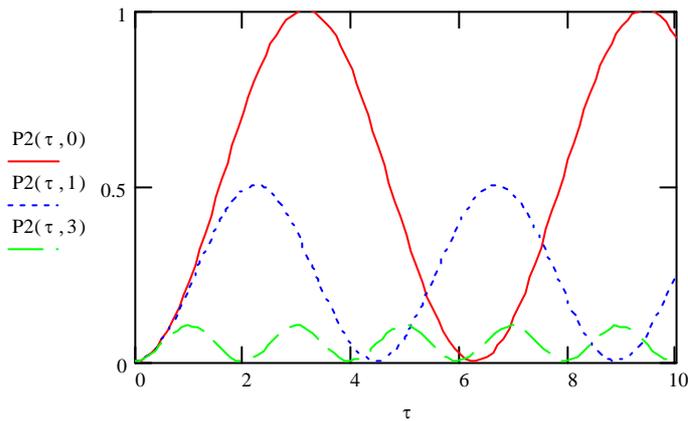
原子が励起状態に見いだされる確率 P_2 は次となる。

$$P_2 = |a_2|^2 = \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega}{2}t\right) = \frac{1}{\left(\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\mu_{12}E_0}\right)^2 + 1} \sin^2\left(\frac{\sqrt{\left(\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\mu_{12}E_0}\right)^2 + 1}}{2} \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar}\right)t\right)$$

図示すると以下の通りである。

$$P2(\tau, d\omega) := \frac{1}{d\omega^2 + 1} \cdot \left(\sin\left(\frac{\sqrt{d\omega^2 + 1}}{2} \cdot \tau\right) \right)^2$$

$\tau := 0, 0.1, \dots, 10$



横軸は規格化した時間である。電磁波のエネルギーを原子が吸収することにより励起状態に見いだされる確率が徐々に増加する。コヒーレントに相互作用する場合には励起状態に見いだされる確率は最大値をとった後再び減少する。すなわち、原子は励起され、再び基底状態に戻り、また励起され、...を繰り返す、電磁波と原子との間で周期的にエネルギーのやりとりが行われる。しかし、実際にはこのように長くコヒーレントな相互作用が続くことは希で散乱などにより中断される。コヒーレント相互作用を観測するには電磁波の強度を極めて強くする必要がある。

励起状態に見出される確率の最大値は比 $\frac{\hbar(\omega - \omega_0)}{\mu_{12}E_0}$ で決まり、最大値に到達するまでの時間

間は $\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\mu_{12}E_0}{\hbar}\right)^2}$ で決まる。電磁波の角周波数 ω が原子双極子の振動角周波数 ω_0 に一致すると確率は 1 まで上昇し、最大値に到達するまでの時間は $\frac{\pi\hbar}{\mu_{12}E_0}$ である。電磁波の電界強度 E_0 が強い程速く到達する。

演習 2 - 3

- 3 A 君は $|a_2|^2$ は「励起状態 2 に電子が見いだされる確率」だと考えた。A 君の量子力学は今度は正しいか。
- 4 B 君は上の図に現れた振動について「電子の状態が二つの準位の間を行ったり来たりしているのだ」と考えた。彼は今度は正しいか。

3 . 密度行列法による統計的取り扱い

前の章では孤立した一つの原子と電磁波との相互作用について説明した。多数原子が電磁波と相互作用する場合を扱うためには統計平均を行う必要がある。そのための準備をこの章で行う。

3 . 1 . 密度行列法とは

二つのエネルギー固有状態のみの重ね合わせ $\psi = C_a\phi_a + C_b\phi_b$ で表される状態 (二準位系) を考える。ここに ϕ_a, ϕ_b は $H_0\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r})$ の固有解。物理量 A の期待値の時間変化を求めるには、シュレーディンガー方程式の解として ψ を求め、それから $\iiint \psi^* A\psi d\mathbf{r}$ を計算すればよい。これとは別のもう一つの方法として、

$$\begin{aligned} \iiint \psi^* A\psi d\mathbf{r} &= \iiint (C_a^* \phi_a^* + C_b^* \phi_b^*) A (C_a\phi_a + C_b\phi_b) d\mathbf{r} \\ &= C_a^* C_a \iiint \phi_a^* A\phi_a d\mathbf{r} + C_a^* C_b \iiint \phi_a^* A\phi_b d\mathbf{r} + C_b^* C_a \iiint \phi_b^* A\phi_a d\mathbf{r} + C_b^* C_b \iiint \phi_b^* A\phi_b d\mathbf{r} \end{aligned}$$

に現れる係数積 $C_a^* C_a, C_a^* C_b, C_b^* C_a, C_b^* C_b$ 、が時間とともにどう変化するかを調べる方法がある。これが密度行列法 (Density Matrix Method) である。

密度行列法は系の状態を確定的に知ることはできないが統計的に知ることができるような問題に適用される。まさに、緩和過程を考慮して多数原子と電磁波の相互作用 (コヒーレントではない) を記述するのに適する。

3 . 2 . 二重の統計性

量子論的統計性 : 状態が複数の固有状態の重ね合わせの一つ、例えば、 $\psi = C_a\phi_a + C_b\phi_b$

で記述されるとき、これを**純粋状態**と呼ぶ、この状態にある物理量の測定を行った結果は決定論的には与えられず、多数の同じように整えられた系に対する測定結果の平均値 (集団平均)、**量子論的期待値**として与えられる。すなわち個々の測定結果は必ずしも揃わない。

古典的および量子論的統計性 : さらに純粋状態ではなくて、 $\psi^{(\nu)} = C_a^{(\nu)}\phi_a + C_b^{(\nu)}\phi_b$

の状態が確率 p_ν 、 $\nu = 1, 2, 3, \dots$ 、で出現するような**混合状態**についてある物理量の測定を行った結果は古典的および量子論的の**二重の統計性**をもつ。多数の原子が存在する場合、個々の原子すべての状態を把握することは困難であるが、多数の原子についての統計的な把握は可能である。このような場合に**二重の統計性**で記述がなされる。

3.3. 密度演算子

3.3.1 量子力学復習

量子力学の必要部分をここで復習する。まず $\iiint \psi_b^* A \psi_a d\mathbf{r} = \left(\iiint \psi_a^* A^\dagger \psi_b d\mathbf{r} \right)^*$ がなりたつとき演算子 A^\dagger は A の随伴演算子と呼ぶ。 $A^\dagger = A$ が成り立つとき自己随伴 (エルミート) 演算子と呼ぶ。物理量に対応する演算子はすべてエルミート演算子である (量子力学の要請)。このとき次の定理が成り立つ。

(1) エルミート演算子の固有値は実数である。

証明: $A\psi_a = a\psi_a$ が成り立つとき $\iiint \psi_a^* A \psi_a d\mathbf{r} = a \iiint \psi_a^* \psi_a d\mathbf{r}$

(2) 異なる固有値に属する固有関数は直交する。

証明: $A\psi_a = a\psi_a$ 、 $A\psi_b = b\psi_b$ であるとき

$$\iiint \psi_b^* A \psi_a d\mathbf{r} = a \iiint \psi_b^* \psi_a d\mathbf{r}、\iiint \psi_a^* A \psi_b d\mathbf{r} = b \iiint \psi_a^* \psi_b d\mathbf{r}$$

が成り立つが、後の式の両辺の複素共役をとると、 b が実数であるから

$$\iiint \psi_b^* A \psi_a d\mathbf{r} = b \iiint \psi_b^* \psi_a d\mathbf{r} \text{ が成り立ち、結局辺々引き算すると}$$

$$(a - b) \iiint \psi_b^* \psi_a d\mathbf{r} = 0 \text{ となるが、} a \neq b \text{ であるから } \iiint \psi_b^* \psi_a d\mathbf{r} = 0$$

すなわち直交する。

量子力学ではエルミート演算子の固有関数は完全系をなすと仮定する。すなわち、任意の波動関数はあるエルミート演算子 A の固有関数系 $\{\phi_n\}$ を用いて $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \phi_n$ のよう

に展開することができる、とする。ただし展開係数は $C_n = \frac{\iiint \phi_n^* \psi d\mathbf{r}}{\iiint \phi_n^* \phi_n d\mathbf{r}}$ となる。この係数

の式は上の式の両辺に ϕ_n^* をかけて積分し固有関数間の直交性を用いると導き出される。

$$\iiint \phi_n^* \phi_n d\mathbf{r} = 1 \text{ となるようにする (規格化) と } C_n = \iiint \phi_n^* \psi d\mathbf{r} \text{ となる。}$$

3.3.2 密度演算子

状態 $\psi = \sum_n C_n \phi_n$ について物理量 A の量子論的期待値は次で与えられる。

$$\iiint \psi^* A \psi d\mathbf{r} = \sum_m \sum_n C_m^* C_n \iiint \phi_m^* A \phi_n d\mathbf{r}$$

これの古典的期待値は次で与えられる。

$$\overline{\iiint \psi^* A \psi d\mathbf{r}} = \sum_\nu p_\nu \iiint \psi^{(\nu)*} A \psi^{(\nu)} d\mathbf{r} = \sum_\nu p_\nu \sum_m \sum_n C_m^{(\nu)*} C_n^{(\nu)} \iiint \phi_m^* A \phi_n d\mathbf{r}$$

ここで演算子、その行列要素、行列について。物理量に対応する演算子 A と、固有値方程式 $H_0 \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r})$ の固有関数 $\phi_n(\mathbf{r})$ および $\phi_m(\mathbf{r})$ とから決まる値 $\iiint \phi_m^* A \phi_n d\mathbf{r}$ を演算子 A の第 m 行、第 n 列の行列要素と呼び A_{mn} と表す。このように演算子は固有値方程式の固有関数を用いて行列で表すことができる。

密度演算子 ρ の行列要素 ρ_{nm} を次のように定義する。

$$\rho_{nm} = \sum_\nu p_\nu C_m^{(\nu)*} C_n^{(\nu)}$$

ここで $C_n^{(\nu)} = \iiint \phi_n^* \psi^{(\nu)} d\mathbf{r}$ などを用いると次になる。

$$\begin{aligned} \rho_{nm} &= \sum_\nu p_\nu \iiint \phi_m(\mathbf{r}') \psi^{(\nu)*}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \iiint \phi_n^*(\mathbf{r}'') \psi^{(\nu)}(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}'' \\ &= \iiint \iiint \phi_m(\mathbf{r}') \left(\sum_\nu p_\nu \psi^{(\nu)*}(\mathbf{r}') \psi^{(\nu)}(\mathbf{r}'') \right) \phi_n^*(\mathbf{r}'') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \end{aligned}$$

ここで演算子は $\rho = \sum_\nu p_\nu \psi^{(\nu)*}(\mathbf{r}') \psi^{(\nu)}(\mathbf{r}'')$ と定義される。

ρ_{nm} は の行列要素である。しかし は通常の物理量ではない。そのために物理量の行列要素の定義とやや異なる。むしろ に対する行列要素の定義が一般的であって物理量では $(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')$ が現れるために一重積分になる。この定義を用いると、上に述べた二重の統計性をもつ期待値は次式となる。

$$\begin{aligned}
\overline{\int \int \int \psi^* A \psi d\mathbf{r}} &= \sum_{\nu} p_{\nu} \left(\sum_m \sum_n C_m^{(\nu)*} C_n^{(\nu)} \int \int \int \phi_m^* A \phi_n d\mathbf{r} \right) \\
&= \sum_m \sum_n \left(\sum_{\nu} p_{\nu} C_m^{(\nu)*} C_n^{(\nu)} \right) A_{mn} \\
&= \sum_m \sum_n \rho_{nm} A_{mn} = \sum_n (\rho A)_{nn} = \text{Tr}(\rho A)
\end{aligned}$$

物理量 A の量子力学的期待値の古典的平均値は、密度演算子 ρ と A の積演算子 ρA のトレース (跡) として与えられる。

演習 3 - 3

1 以下の関係が成り立つことを確認せよ。

$$\sum_m \rho_{nm} A_{ml} = (\rho A)_{nl}$$

ただし ρ_{nm} は行列 ρ の n 行 m 列要素である。 A_{ml} も同様の意味。また ρA は行列 ρ と行列 A の積である。

3 . 4 . 密度演算子行列要素の運動方程式

密度演算子の行列要素が従う運動方程式を見つけよう。そのために ρ_{nm} の時間微分をとってみる。それに $i\hbar$ をかけたものは次のようになる。

$$i\hbar \frac{d\rho_{nm}}{dt} = (H\rho - \rho H)_{nm} \quad (1)$$

演習 3 - 4

1 式 (1) を導け。

ヒント：まず ρ_{nm} の定義式で時間に依存する因子がどれか調べよ。そのために展開係数 $C_n^{(\nu)}$ が $\int \int \int \phi_n^* \psi^{(\nu)} d\mathbf{r}$ で与えられること、 $\psi^{(\nu)}$ はシュレーディンガ方程式

$$i\hbar \frac{d\psi^{(\nu)}}{dt} = H\psi^{(\nu)}$$

にしたがって時間変化することに注意せよ。その上で微分を実行し、シュレーディンガ方程式を代入せよ。次に $\psi = \sum_n C_n \phi_n$ を用い、ハミルトニアンがエルミート演算子であることを用いよ。

3.5. 密度行列要素とその初期条件

密度演算子の対角要素 $\rho_{nn} = \sum_{\nu} p_{\nu} |C_n^{(\nu)}|^2$ は、 n がエネルギー固有状態のラベルである

場合、エネルギー測定した結果 n 番目のエネルギー固有状態に見いだされる量子論的および古典的な二重の意味の確率である。

N 個の粒子からなる多粒子系で n 番目のエネルギー固有状態にある粒子の数は N_{nn} である。

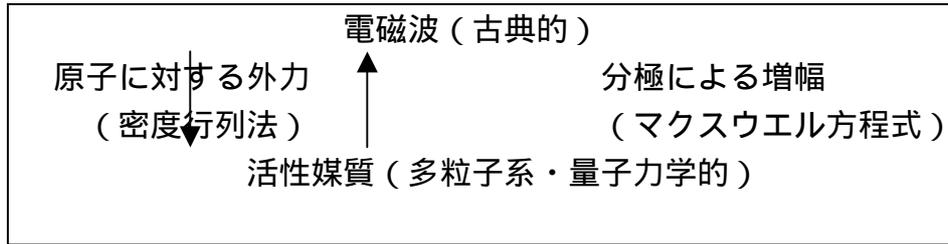
一方、非対角要素

$$\rho_{mn} = \sum_{\nu} p_{\nu} C_m^{(\nu)} C_n^{(\nu)*} = \sum_{\nu} p_{\nu} |C_m^{(\nu)}| |C_n^{(\nu)}| \exp(i\vartheta_m^{(\nu)} - i\vartheta_n^{(\nu)})$$

は各固有状態の係数の位相情報を含んでいる。二つの異なる状態の展開係数の位相差が確定している場合には有限値をもつが、位相差が確定していない、あるいは相関がない場合には平均をとると零になる。したがって非対角要素は展開係数間の位相の相関の強さを表している。

例えば、エネルギー固有状態で展開する場合、異なるエネルギー状態の展開係数の絶対値の割合は統計的に指定できるけれども、位相関係は指定できない。すなわち、 $\vartheta_m^{(\nu)} - \vartheta_n^{(\nu)}$ の値は指定できず、 ν によってこの位相差はランダムに変化し、 $\exp(i\vartheta_m^{(\nu)} - i\vartheta_n^{(\nu)})$ の平均値は零になる。そこで非対角要素の初期条件は零とする。

4 . 光と物質の緩和を考慮した相互作用



4 . 1 . 分極による電磁波励振

マクスウエルの方程式は次の式である。

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad \mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

\mathbf{P} は分極を表す。これらを代入すると次となる。

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -\mu \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \mu \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}$$

ベクトル公式およびガウスの法則より次が成り立つ。

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla \nabla \cdot \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E}, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0$$

ここで微視的にはプラス電荷とマイナス電荷が空間的に分かれて存在しているが、電磁波 (光) の波長、 $1 \mu\text{m}$ オーダー、の尺度で観測すると電気的中性が成り立ち、 $\rho = 0$ とする。電荷の位置ずれは巨視的な分極となる。上の式より、次が成り立つ。

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}$$

この式は分極の振動により電磁波が励起されることを描写している。分極は電荷の変位であり、巨視的分極は、 n を電子の密度、 \mathbf{r} を電子の変位ベクトルとして次で表される。

$$\mathbf{P} = en\mathbf{r} = n\boldsymbol{\mu}$$

4.2. 密度演算子で表した分極

媒質中で、電磁波の波長より小さく、かつその中に多数の原子が含まれているような微小体積を考えると、その中では電界は空間的に一様と見なしてよく、さらに原子の描写には古典的統計が適用される。このとき 3.3. で導いたことから $\mathbf{P} = n \text{Tr}(\rho \boldsymbol{\mu})$ である。

ここに ρ は密度演算子であり、その運動方程式は次で与えられる (3.4)。

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = -[\rho, H_0 + H_{\text{int}} + H_{\text{random}}]$$

ここに、全ハミルトニアンを構成するのは、電子エネルギー H_0 、電界と電子との相互作用エネルギー (2.1. 参照)、 $H_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}$ 、そして衝突などのランダム項 H_{random} である。

4.3. 電界中での密度演算子

まず衝突現象が無い場合を調べよう。密度演算子の運動方程式は次である。

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = -\rho H_0 + H_0 \rho + (\rho \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu} \rho) \cdot \mathbf{E}$$

エネルギー固有状態による表示を用い $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ とすると次式になる。

$$i\hbar \frac{d\rho_{nm}}{dt} = \hbar \omega_{nm} \rho_{nm} + \sum_k (\rho_{nk} \boldsymbol{\mu}_{km} - \boldsymbol{\mu}_{nk} \rho_{km}) \cdot \mathbf{E}$$

演習 4.3.

上の式を導出せよ。ヒント： $(H\rho)_{nm} = \sum_l H_{nl} \rho_{lm}$ などを用いよ。

今、二準位系を考える。基底準位 a と励起準位 b があり、上で、 n は a または b 、 m も a または b である。ダイポールモーメントオペレータの行列要素は、 $\mu_{aa} = \mu_{bb} = 0$ (以前に説明) μ_{ab} は波動関数の位相の取り方を選んで実数にすることができる。これを μ と表す。すると、各行列要素の運動方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{aa}}{dt} &= -i(\rho_{ab} - \rho_{ba}) \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}}{\hbar} & \frac{d\rho_{bb}}{dt} &= -i(\rho_{ba} - \rho_{ab}) \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}}{\hbar} \\ \frac{d\rho_{ab}}{dt} &= -i\omega_{ab}\rho_{ab} - i(\rho_{aa} - \rho_{bb}) \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}}{\hbar} \end{aligned}$$

今、ある時間だけ電磁波と電子とが相互作用したのち、電磁波が零になったとすると、上の式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{aa}}{dt} = \frac{d\rho_{bb}}{dt} &= 0, & \frac{d\rho_{ab}}{dt} &= -i\omega_{ab}\rho_{ab} \\ \rho_{aa} = \text{const.}, & \rho_{bb} = \text{const.}, & \rho_{ab} &= \text{const.} \exp(-i\omega_{ab}t) \end{aligned}$$

二つの準位に見いだされる確率は一定であり、 ρ_{ab} はいつまでも振動し続ける。しかし、実際には電子は励起状態には有限時間しか止まらないで基底状態に遷移する。また対角要素 ρ_{ab} の振動は減衰していく。この原因は、自然放出、他の粒子との相互作用などがある。これらはいずれも不規則であり、総称して緩和と呼ぶ。

4.4. 不規則擾乱による密度演算子緩和

不規則な擾乱を受けると密度演算子の運動に制動が加わる (導出に興味がある者は旧テキスト付録参照)。その結果、不規則擾乱の効果による密度行列要素の時間変化は

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{kl}}{dt} &= -i\omega_{kl}\rho_{kl} - \gamma_{kl}\rho_{kl} & \frac{d\rho_{kk}}{dt} &= -\gamma_k \rho_{kk} + \sum_m \gamma_{km} \rho_{mm} \end{aligned}$$

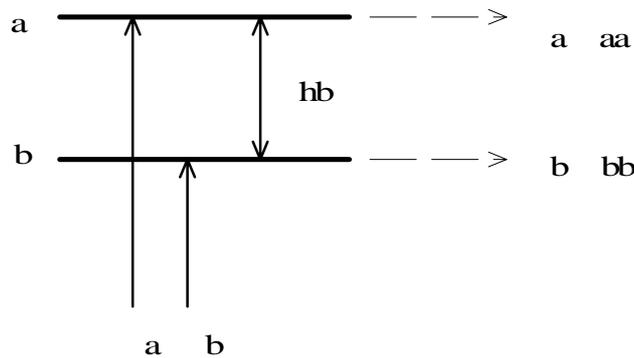
となり、制動項が導入される。 γ_{kl} は緩和係数である。非対角要素の緩和係数と対角要素の緩和係数とは異なる値をもつ。

演習 4.4

上の式から、非対角項の時間変化において、緩和が無い時と比較すると何が変化しているか答えよ。

4.5. ポピュレーション演算子で表した多数原子の状態

媒質は多数の二準位原子からなり、個々の原子に対応する密度演算子は (ρ, z, t_0, t) で表す。これは時刻 t_0 、場所 z で状態 $(a$ または $b)$ に励起された一つの原子の時刻 t における密度演算子の値を意味する。時刻 t_0 から t までの経緯は上で述べた密度演算子の運動方程式にしたがっている。単位体積あたり、単位時間あたりに $(a$ 状態に励起される原子数を励起速度 $\lambda_a(z, t_0)$ で与える。そして、4.4 で述べた緩和現象を、 λ_{aa} の緩和係数を λ_a 、 λ_{bb} の緩和係数を λ_b 、 λ_{ab} の緩和係数を λ_{ab} で表す。これを図示する。



分極は、一原子の分極の期待値の平均値 $\text{Tr}(\rho \mu)$ を、初期条件の異なるすべての原子について加算して表すことができる。すなわち、

$$\begin{aligned}
 P(z, t) &= \sum_{\text{初期条件の異なるすべての原子}} \text{Tr}(\rho \mu) = \int_{-\infty}^t dt_0 \sum_{\alpha=a,b} \lambda_{\alpha}(z, t_0) \text{Tr}(\rho(\alpha, z, t_0, t) \mu) \\
 &= \text{Tr} \left(\left\{ \int_{-\infty}^t dt_0 \sum_{\alpha=a,b} \lambda_{\alpha}(z, t_0) \rho(\alpha, z, t_0, t) \right\} \mu \right) = \text{Tr}(p(z, t) \mu)
 \end{aligned}$$

ここに $p(z, t) = \sum_{\alpha=a,b} \int_{-\infty}^t dt_0 \lambda_{\alpha}(z, t_0) \rho(\alpha, z, t_0, t)$ をポピュレーション演算子と呼ぶ。これは密度演算子に原子数密度が掛けられたものである。密度演算子の代わりにこのポピュレーション演算子を用いてレーザを記述していく。例えば、 $p(z, t)_{aa}$ は時刻 t 、場所 z の媒質中で状態 a に見いだされる原子の密度である。

ポピュレーション演算子の運動方程式は密度演算子のそれから次のように導かれる。

$$\frac{d}{dt} p(z, t) = \sum_{\alpha=a,b} \lambda_{\alpha}(z, t) \rho(\alpha, z, t) + \sum_{\alpha=a,b} \int_{-\infty}^t dt_0 \lambda_{\alpha}(z, t_0) \frac{d}{dt} \rho(\alpha, z, t_0, t)$$

第一項の密度演算子の値は、励起された瞬間の値であるから $\rho(\alpha, z, t)_{kl} = \delta_{k\alpha} \delta_{l\alpha}$ である。各要素の運動方程式に、密度演算子の運動方程式を用いることで、ポピュレーション行列要素の運動方程式は次のように導き出される。

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{aa} &= \lambda_a(z, t) - \gamma_a \rho_{aa} - i \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}(z, t)}{\hbar} (\rho_{ab} - \rho_{ba}) & \dot{\rho}_{bb} &= \lambda_b(z, t) - \gamma_b \rho_{bb} - i \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}(z, t)}{\hbar} (\rho_{ba} - \rho_{ab}) \\ \dot{\rho}_{ab} &= -i\omega_{ab} \rho_{ab} - \gamma \rho_{ab} - i \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}(z, t)}{\hbar} (\rho_{aa} - \rho_{bb}) & \dot{\rho}_{ba} &= \dot{\rho}_{ab}^* \end{aligned}$$

演習 4 . 5 .

上の式を導出せよ。

ヒント：ポピュレーション行列要素の式

$$\dot{\rho}(z, t)_{aa} = \sum_{\alpha=a,b} \lambda_{\alpha}(z, t) \delta_{a\alpha} \delta_{a\alpha} + \sum_{\alpha=a,b} \int_{-\infty}^t dt_0 \lambda_{\alpha}(z, t_0) \dot{\rho}(\alpha, z, t_0, t)_{aa}$$

等に密度演算子の運動方程式

$$\frac{d\rho_{aa}}{dt} = -\gamma_a \rho_{aa} - i (\rho_{ab} - \rho_{ba}) \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}}{\hbar}$$

等を組み込め。

密度演算子の運動方程式と見比べるとポンプ項が加わっている点のみ異なるだけで、あとは同じ形である。ポピュレーション行列はポンプ項を取り込むために導入したものである。

この方程式を解いて p を求め、分極 $P(z, t) = \text{Tr}(p\boldsymbol{\mu})$ を計算し、マックスウエル方程式に基づいて電界 $E(z, t)$ を求める。電界が再び分極に影響を与える。これらの結合した方程式を解くことによりレーザー動作が記述される。

4.6. 媒質中の光伝搬

ポピュレーション行列の非対角要素 p_{ab} に着目し、3番目の微分方程式を形式的に解く。

$$p_{ab} = \exp(-i(\omega_{ab} + \gamma)t) \int_0^t \left(-i \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E}(z, t')}{\hbar} \right) (p_{aa} - p_{bb}) \exp(i(\omega_{ab} + \gamma)t') dt'$$

ただし、初期条件として時刻 0 で $p_{ab} = 0$ を用いた。

ここで電磁波を $\mathbf{E}(z, t') = \mathbf{e}A(z) \cos(\omega t' - \beta z)$ とする。ここに \mathbf{e} は偏波方向の単位ベクトル、 ω は電磁波の角周波数である。これを積分式に代入して計算するが、電磁波の振幅が十分に小さくポピュレーション変化は無視できる、 $\exp(-\gamma t) \ll 1$ が成り立つ程、考えている時間スケールは十分に大きい、を仮定する。このとき、

$$\begin{aligned} p_{ab} &= \exp(-i(\omega_{ab} + \gamma)t) \left(-i \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}}{\hbar} \right) (p_{aa} - p_{bb}) A(z) \\ &\quad \int_0^t \frac{1}{2} \left\{ \exp(i((\omega + \omega_{ab})t' - \beta z)) + \exp(-i((\omega - \omega_{ab})t' - \beta z)) \right\} \exp(\gamma t') dt' \\ &= -i \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}}{2\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) A(z) \frac{\exp(-i\omega t + i\beta z)}{i(\omega_{ab} - \omega) + \gamma} \end{aligned}$$

時間積分の被積分関数で大きな角周波数で振動する項はそうでない項に比べて積分への寄与が小さいので、省略する(回転波近似)。{ }内の第一項を省略して積分を行っている。これを用いて分極は次になる。

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(z, t) &= \text{Tr}(p\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{\mu}(p_{ab} + c.c.) \\ &= \boldsymbol{\mu} \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}}{\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) A(z) \frac{(\omega - \omega_{ab}) \cos(\omega t - \beta z) - \gamma \sin(\omega t - \beta z)}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2} \end{aligned}$$

この分極を波動方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} \nabla^2 \{ \mathbf{e}A(z) \cos(\omega t - \beta z) \} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \{ \mathbf{e}A(z) \cos(\omega t - \beta z) \} \\ = \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[\boldsymbol{\mu} \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{e}}{\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) A(z) \frac{(\omega - \omega_{ab}) \cos(\omega t - \beta z) - \gamma \sin(\omega t - \beta z)}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2} \right] \end{aligned}$$

今、電磁波は平面波であり、直線偏光とし偏波方向は x 方向とする。原子の分極も x 方向に生じているとする。さらに電磁波の振幅 $A(z)$ の二階微分はその他の項に比べて小さいとして省略する。このとき、

$$\begin{aligned} 2\beta \frac{1}{A(z)} \frac{dA(z)}{dz} \sin(\omega t - \beta z) + (\mu_0 \varepsilon_0 \omega^2 - \beta^2) \cos(\omega t - \beta z) \\ = \mu_0 \frac{\mu^2}{\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) \frac{\omega^2}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2} \{ (\omega_{ab} - \omega) \cos(\omega t - \beta z) + \gamma \sin(\omega t - \beta z) \} \end{aligned}$$

となる。この式が成り立つためには \cos および \sin の係数がおのこの両辺で等しくなければならぬから、

$$\beta^2 = \mu_0 \varepsilon_0 \omega^2 - \mu_0 \frac{\mu^2}{\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) \frac{\omega^2 (\omega_{ab} - \omega)}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2}$$

$$\frac{dA(z)}{dz} = \mu_0 \frac{\mu^2}{2\beta\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) \frac{\omega^2 \gamma}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2} A(z)$$

を得る。第二の式を解いて振幅は次になる。

$$A(z) = A(0) \exp \left[\mu_0 \frac{\mu^2}{2\beta\hbar} (p_{aa} - p_{bb}) \frac{\omega^2 \gamma}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2} z \right]$$

レーザ媒質内を電磁波が伝搬する伝搬定数は、電界と同位相で振動する分極成分によって決まり、振幅の変化は電界と 90 度位相がずれて振動する成分によって決まる。

振幅は指数関数で変化し、利得は $\beta \approx \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \omega$ を用いて次となる。

$$\alpha \approx \frac{\mu^2}{2\varepsilon_0 c \hbar} (p_{aa} - p_{bb}) \frac{\omega \gamma}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2}$$

以上、量子力学を用いて、媒質中を伝搬する電磁波が媒質から受ける影響を記述した。この結果の意味を以下で調べることにする。

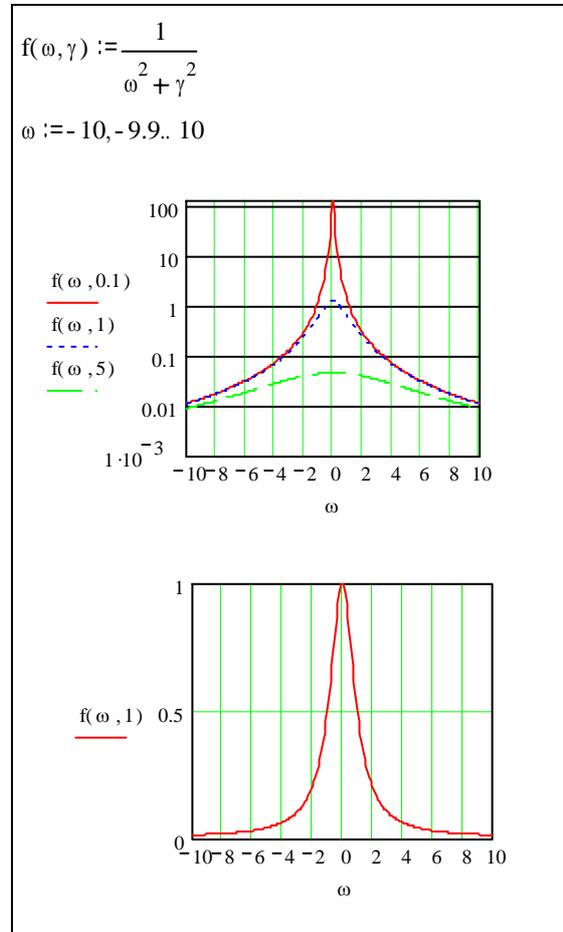
4.7. 利得と屈折率

活性媒質中の電磁波伝搬について得られた結果を調べる。

(1) 利得スペクトル(線幅広がり特性)

スペクトル形状は $\frac{1}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2}$ で表される。これはローレンツ形と呼ばれる。中心角周波数 ω_{ab} は二準位間のエネルギー差で決まり、また線幅は緩和係数 γ で決まる。利得のピーク値に対する半値全幅 $\Delta\omega$ は 2γ に等しい。

ローレンツ形の線幅広がりとは緩和過程により生じるものであり、均一な広がりと呼ぶ。これと対照的な、不均一な広がりとは、少しずつ異なるエネルギー差をもつ二準位原子が混じって存在する場合の利得のスペクトルで生じる。不均一、均一の名前の由来は、ある周波数の電磁波が利得媒質を通過して増幅が行われると、その反作用で媒質の利得が減少するが、均一広がりにはすべての周波数で均一に利得減少が生じ、不均一広がりには増幅に関与した原子の利得だけが減少するので、全体の利得スペクトルの一部の利得だけが不均一に減少する、ことによる。



(2) 利得の大きさ

利得は $\alpha \propto \mu^2 (p_{aa} - p_{bb})$ であり、ダイポールモーメント μ の二乗に比例し、高エネルギー準位の原子数と低エネルギー準位の原子数の差に比例する。高エネルギー準位の原子数の方が多いときに正の利得(利得)が、少ないときに負の利得(損失)が生じる。電界が十分に小さい場合には、それぞれの原子数の定常値は次となる。

$$\dot{p}_{aa} = \lambda_a(z, t) - \gamma_a p_{aa} = 0 \quad \dot{p}_{bb} = \lambda_b(z, t) - \gamma_b p_{bb} = 0 \quad p_{aa} = \frac{\lambda_a}{\gamma_a}, \quad p_{bb} = \frac{\lambda_b}{\gamma_b}$$

各準位への励起とそれぞれの緩和係数によって決まる。上の準位への励起、ポンピング、

を増すことにより利得を増大させることができる。

熱平衡状態においてはエネルギー E の状態を占めている原子の数はボルツマン分布 $\exp(-E/kT)$ に比例し、エネルギーが高い状態にある原子数は低い状態の原子数よりも少ない。利得が生じるのはこの関係が逆転した場合である。すなわち熱平衡状態ではなく、高エネルギー状態に速く励起し、低エネルギー状態の原子をさらに低いエネルギー状態に遷移させるなどの方法でその数を減少させることではじめて実現される。逆転した分布を反転分布と呼ぶ。またボルツマン分布で温度を負にした場合に相当することから負温度状態とも呼ぶ。

ダイポールモーメント μ は原子のポテンシャル分布により決まる電子波動関数分布によってきまる。

(3) 利得に伴う屈折率変化

媒質の屈折率が変化する。すなわち、

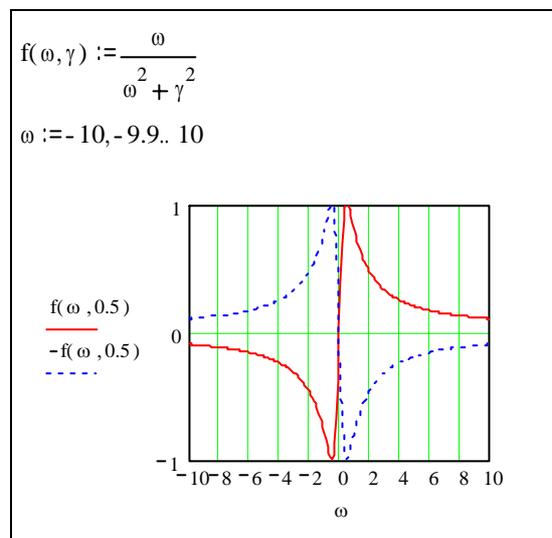
$$n \equiv \frac{\beta}{\omega} \approx 1 + \frac{\mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} (p_{aa} - p_{bb}) \frac{\omega - \omega_{ab}}{(\omega_{ab} - \omega)^2 + \gamma^2}$$

この屈折率変化の概略図を示す。縦軸は屈折率変化分に比例する値、横軸は原子の共鳴角周波数を原点にした角周波数である。

一般に媒質の屈折率は周波数が増加すると増加する傾向がある（図の破線）。これを正常分散と呼ぶ。ところが二準位損失媒質の共鳴点直近や、あるいは利得がある場合（実線）の共鳴点直近以外では逆の傾向を示す。これを異常分散と呼ぶ。

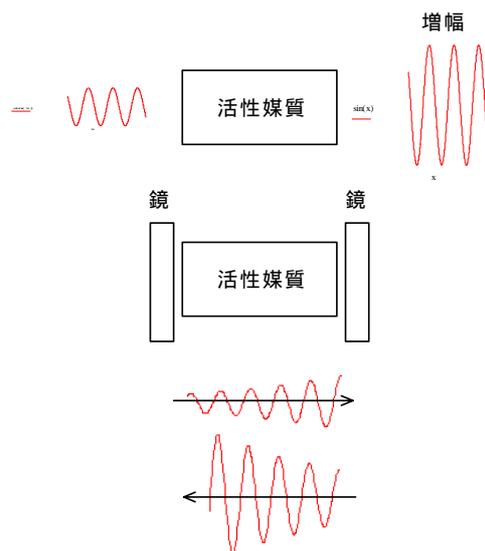
利得と屈折率の表式から、利得（吸収）と分散とは互いに関連があり、利得（吸収）が大きいと分散も大きいことが分かる。

ここまでで媒質と電磁波との相互作用を取り扱い、電磁波が活性媒質により増幅されることを述べた。



5 . レーザ発振

活性媒質と光の共振器とを組み合わせることでレーザー発振が生じる様子を描写する。すなわち図のように活性媒質を反射鏡で挟むことにより電磁波は反射鏡間を往復し、活性媒質で増幅され、強度を強め、活性媒質の利得は低下してゆき、ある値に自動的に落ち着く。4 は小信号解析で線形光増幅であったが、ここでは大信号解析を行い光強度が飽和し定常状態になる現象を扱う。



5.1. 共振器固有モード

左鏡面の位置を $z=0$ 、右鏡面の位置を $z=L$ とし、両鏡面の間の空間での電磁界をマックスウェル方程式で記述する。上で導いた式で、電界ベクトルは x 成分のみ、平面波として x 方向、 y 方向での空間変化はない、とすると次となる。

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \mu_0 \sigma \frac{\partial E}{\partial t} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}$$

ここで左辺第二項は媒質に導電率 σ を与えて電磁波を減衰させている。これは共振器内で生じる回折損失、反射鏡透過（レーザ光の取り出し）による損失、等による光損失すべてを表すために付加した。

方程式の解法として、右辺の分極および左辺の損失項を取り除いた斉次方程式の解を求める。これは共振器の固有モードと呼ばれる。次に分極と損失を考慮して、これらの固有モードの振幅および位相の時間依存性を方程式を満足するように決める。

固有モードは次のようになる。

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 \quad E(z, t) = \sin(Kz) \exp(-i\omega t) \quad -K^2 + \mu_0 \epsilon_0 \omega^2 = 0$$

鏡面で電界は零になるとすると $\sin KL = 0$, $K_n = n \frac{\pi}{L}$ となる。 n は整数値である。

$K=2\pi/\lambda$ であることから、鏡と鏡の間の距離が半波長の整数倍になっていなければならないことに対応する。この境界条件から角周波数も離散化されて、 $\omega_n = cK_n$ となる。

固有モードの係数を時間の関数とし、複数の固有モードの重ね合わせで表す。

$$E(z, t) = \frac{1}{2} \sum_n E_n(t) \exp[-i\{\omega_n t + \phi_n(t)\}] \sin(K_n z) + c.c.$$

ここに、 $E_n(t)$ は n 番目の固有モードの展開係数の絶対値、 $-\phi_n(t)$ は展開係数の位相である。これらは電磁波の振動の一周期間ではほとんど変化しない、時間に対して緩やかに変化する関数である。c.c. はその前の項の複素共役を表す。電磁波は実数であるから複素共役を加えて実数にしておく必要がある（電気工学で用いる複素表示は使わない。量子力学の波動関数の時間因子 $\exp(i\omega t)$ は $\cos \omega t$ の複素表示ではなく、波動関数そのものである）。

なお、 $\omega_n + \dot{\phi}_n(t)$ がモード n の発振周波数となる。すなわち方程式を解くことでレーザの発振周波数が決まる。共振器固有モードの角周波数とは必ずしも一致しない。

5.2. 分極による電界励振

分極は電界と同じ角周波数で振動することから次のように表せる。ただし $P_n(t)$ は複素数である ($E_n(t)$ は絶対値すなわち実数)。 $P_n(t)$ と $E_n(t)$ の位相関係に自由度をもたせておく。

$$P(z, t) = \frac{1}{2} \sum_n P_n(t) \exp[-i\{\omega_n t + \phi_n(t)\}] \sin(K_n z) + c.c.$$

これらを上の方極および損失を考慮した方程式に代入する。c.c.を除いた部分が関係式を満たせばc.c.部分も同じ関係式を自動的に満たすことになるので、c.c.を除いた部分だけを扱う。 $\sin K_n z$ をかけて0から L まで z について積分することによりモード n についての式が得られる。

$$-2i\mu_0\varepsilon_0\omega_n\dot{E}_n + \left\{ K_n^2 - i\mu_0\sigma\omega_n - \mu_0\varepsilon_0(\omega_n + \dot{\phi}_n)^2 \right\} E_n = \mu_0\omega_n^2 P_n$$

この導出において1次の微小項までを採り上げた。上に述べた時間的に緩やかに変動する関数の時間微分項は微小項であり、また損失、分極の項も微小項と見なした。

共振器の損失を表す量として Q 値がある。 Q 値との関係は次のように表される。

$$Q \text{ 値} = \frac{[\text{蓄積エネルギー}]}{[\text{毎秒のエネルギー損失}]} = \frac{(\varepsilon_0 E^2/2)}{(E^2/2)} = \varepsilon_0 /$$

であるので、 ε_0 / Q_n を代入し、以後は損失をモードに依存する Q 値で表す。さらに共振器の波数と角周波数との関係を用いると、次のようになる。

$$-\frac{2i}{\omega_n} \dot{E}_n + \left\{ 1 - i\frac{1}{Q_n} - \left(1 + \frac{\dot{\phi}_n}{\omega_n} \right)^2 \right\} E_n = \frac{1}{\varepsilon_0} P_n$$

実数部と虚数部それぞれが両辺で等しいことから、次の二つの方程式が成り立つ。

$$\dot{E}_n + \frac{\omega_n}{2Q_n} E_n = -\frac{\omega_n}{2\varepsilon_0} \text{Im}(P_n) \quad \omega_n + \dot{\phi}_n \approx \omega_n \left\{ 1 - \frac{1}{2\varepsilon_0} \text{Re}\left(\frac{P_n}{E_n}\right) \right\}$$

以上でモード n の電界振幅および振動周波数の式が得られた。振幅には分極の虚部が、周波数には分極の実部が関与する。

5.3. 電界による分極励振

まず、上の式に含まれる分極を求める。4で行ったポピュレーション行列により表した分極を固有モード展開する。

$$P(z, t) = \mu(p_{ab} + c.c.) = \frac{1}{2} \sum_n P_n(t) \exp[-i\{\omega_n t + \phi_n(t)\}] \sin(K_n z) + c.c.$$

$$P_n(t) = 2 \exp[i\{\omega_n t + \phi_n(t)\}] \frac{\int_0^L \mu p_{ab} \sin(K_n z) dz}{\int_0^L \sin^2(K_n z) dz}$$

最後の式は固有モードの直交性を用いて導いた。ポピュレーション行列要素を求める必要があるが、これは4で求めた式、

$$p_{ab}(t) = \left(-i \frac{\mu}{\hbar}\right) \exp(-i(\omega_{ab} + \gamma)t) \int_0^t (p_{aa}(z, t') - p_{bb}(z, t')) E(z, t') \exp(i(\omega_{ab} + \gamma)t') dt'$$

に5.1.で求めた電界分布を代入して求める。今、共振器内には固有モード n がただ一つ存在するとする。回転波近似を用い、さらに $E_n(t)$, $p_{aa}(z, t)$, $p_{bb}(z, t)$ は時間的に緩やかに変化するので、積分に実質的に寄与する時間幅、緩和時間 $1/\gamma$ 、での変化は無視できるものとする。

$$p_{ab}(t) = \frac{\mu}{2i\hbar} \exp(-i(\omega_n t + \phi_n(t))) E_n(t) \sin(K_n z) \frac{p_{aa}(z, t) - p_{bb}(z, t)}{i(\omega_{ab} - \omega_n) + \gamma}$$

これを上の式に代入して次を得る。

$$P_n(t) = \frac{\mu^2}{\hbar} \frac{\int_0^L \sin^2(K_n z) \{p_{aa}(z, t) - p_{bb}(z, t)\} dz}{\int_0^L \sin^2(K_n z) dz} \frac{(\omega_n - \omega_{ab}) - i\gamma}{(\omega_n - \omega_{ab})^2 + \gamma^2} E_n(t)$$

5.4. 電磁波と原子の結合方程式

5.3. で求めたポピュレーション行列要素を 4.5. で求めた他の行列要素の式に代入し、回転波近似を用いて（まだ積分しないがいずれ積分することを考えて速く回転する項は除去しておく）整理する。また分極の式を電磁波の電界の方程式に代入する。その結果、電磁波と原子の結合した次の方程式が得られる。

$$\dot{p}_{aa} = \lambda_a(z, t) - \gamma_a p_{aa} - \frac{1}{2} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2 \sin^2(K_n z) \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} \{p_{aa}(z, t) - p_{bb}(z, t)\}$$

$$\dot{p}_{bb} = \lambda_b(z, t) - \gamma_b p_{bb} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2 \sin^2(K_n z) \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} \{p_{aa}(z, t) - p_{bb}(z, t)\}$$

さらに 5.2. で求めた式に代入して次を得る。

$$\dot{E}_n + \frac{\omega_n}{2Q_n} E_n = \frac{\omega_n \mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} \frac{\int_0^L \sin^2(K_n z) \{p_{aa}(z, t) - p_{bb}(z, t)\} dz}{\int_0^L \sin^2(K_n z) dz} E_n$$

$$\omega_n + \dot{\phi}_n \approx \omega_n \left[1 - \frac{\mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\omega_n - \omega_{ab}}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} \frac{\int_0^L \sin^2(K_n z) \{p_{aa}(z, t) - p_{bb}(z, t)\} dz}{\int_0^L \sin^2(K_n z) dz} \right]$$

この先に進むために、各エネルギー準位のポピュレーション、すなわち、各エネルギーに見出される原子の数、は拡散などの結果として z 方向に一様になっているものと仮定する（光の定在波とポピュレーションの空間分布には関係があり、この仮定は必ずしも現実的ではないかもしれない。しかしここでは理論の簡単化のためにこのようにする）。

このとき式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \dot{p}_{aa} &= \lambda_a - \gamma_a p_{aa} - \frac{1}{4} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2 \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} (p_{aa} - p_{bb}) \\ \dot{p}_{bb} &= \lambda_b - \gamma_b p_{bb} + \frac{1}{4} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2 \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} (p_{aa} - p_{bb}) \\ E_n &= E_n(0) \exp \left[\left\{ \frac{\omega_n \mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} (p_{aa} - p_{bb}) - \frac{\omega_n}{2Q_n} \right\} t \right] \\ \omega_n + \dot{\phi}_n &\approx \omega_n \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\omega_n - \omega_{ab}}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} (p_{aa} - p_{bb}) \right\} \end{aligned}$$

4本の内の上3本の式は電磁波と原子との結合方程式になっている。すなわち、まず第三式は、固有モード n の電界振幅は、ポピュレーション差 $p_{aa} - p_{bb}$ が正、すなわち上準位の原子数（ポピュレーション）が下準位の原子数より大きくて指数関数引数の第一項が正で、しかも、第二項よりも大きければ、時間とともに増大することを表す。そして第一式は、上準位の原子数はポンピングにより増大し、緩和により減少し、そして電界の増幅により減少することを示している。また第二式は、下準位の原子数は励起により増大し、緩和により減少し、電界の増幅により増大することを示す。よって増幅により電界強度が増加するとポピュレーション差 $p_{aa} - p_{bb}$ は減少することが分かる。すると電界の増大は続かずある値で飽和する。上に導き出した式を用いれば各準位のポピュレーション、電界強度の時間変化を描写できる。コンピュータシミュレーションも可能である。

5.5. 定常発振状態

定常状態でのポピュレーション、電界強度は5.4.の式から時間微分を零とすることにより次のようになる。

$$-(\gamma_a + R)p_{aa} + Rp_{bb} = -\lambda_a \quad -Rp_{aa} + (\gamma_b + R)p_{bb} = \lambda_b$$

$$\text{ここに } R = \frac{1}{4} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2 \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2}$$

これを解いて、

$$p_{aa} - p_{bb} = \frac{\frac{\lambda_a}{\gamma_a} - \frac{\lambda_b}{\gamma_b}}{R \left(\frac{1}{\gamma_a} + \frac{1}{\gamma_b} \right) + 1}$$

このときに、正味の増大係数は0になっている。すなわち、

$$\frac{\omega_n \mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\gamma}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} \frac{\frac{\lambda_a}{\gamma_a} - \frac{\lambda_b}{\gamma_b}}{R \left(\frac{1}{\gamma_a} + \frac{1}{\gamma_b} \right) + 1} - \frac{\omega_n}{2Q_n} = 0$$

$$E_n(t)^2 = \frac{\left(\frac{\lambda_a}{\gamma_a} - \frac{\lambda_b}{\gamma_b} \right) - \frac{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2}{\gamma} \frac{\varepsilon_0 \hbar}{\mu^2 Q_n}}{\frac{1}{4} \frac{\varepsilon_0}{\hbar Q_n} \left(\frac{1}{\gamma_a} + \frac{1}{\gamma_b} \right)}$$

まず共振器内の電界強度が0の場合、励起準位にある原子数と基底準位にある原子数の差

(反転分布)は $p_{aa} - p_{bb} = \frac{\lambda_a}{\gamma_a} - \frac{\lambda_b}{\gamma_b}$ となり、原子励起(ポンピング)とそれぞれの準位の緩和

係数で決まる。これを飽和がない時の反転分布と呼ぶ。飽和が無いときの反転分布が十分に(利得が損失にうち勝つだけ)大きいと、電界強度は時間と共に増大していく。電界

強度が大きくなると反転分布 $p_{aa} - p_{bb}$ は次第に減少する。そして電界強度が上の最後の式

の大きさになると利得と損失がちょうど等しくなり、電界強度は完全に飽和し、以後一定の値をとる。これがレーザーの定常発振状態である。

5.6. レーザ発振しきい値

励起強度を $N = \frac{\lambda_a}{\gamma_a} - \frac{\lambda_b}{\gamma_b}$ なる N で表すと、5.5. で導いた式から、電界強度は励起強度に対して次の式のように変化する。

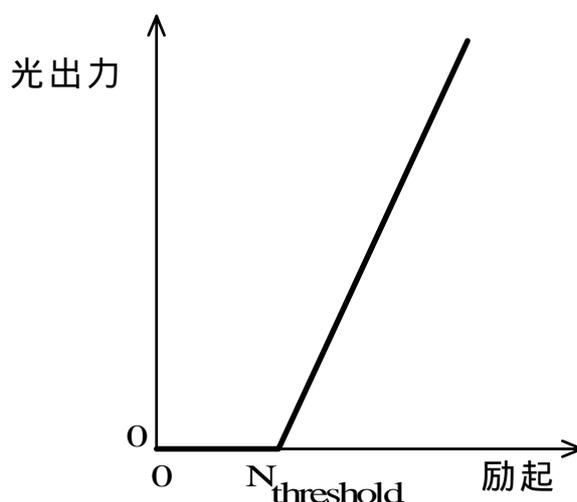
$$E_n(t)^2 = \frac{4\hbar Q_n}{\varepsilon_0 \left(\frac{1}{\gamma_a} + \frac{1}{\gamma_b} \right)} (N - N_{threshold})$$

ここに励起のしきい値は5.5. で議論した利得が零になる条件より

$$N_{threshold} = \frac{\varepsilon_0 \hbar}{\mu^2 Q_n} \left[\gamma + \frac{(\omega_{ab} - \omega_n)^2}{\gamma} \right]$$

で与えられる。電界が零で正味利得が正になる励起条件が発振しきい値である。これ以上の励起を行うと電磁波強度は励起に対して直線的に増加する。レーザの励起と出力の典型的な関係を図に示す。

共振角周波数が原子の共鳴角周波数に一致した場合に一番小さな励起で発振開始する。そのときのしきい値は緩和係数 に比例し、 Q 値に反比例し、ダイポールモーメントの二乗に反比例する。



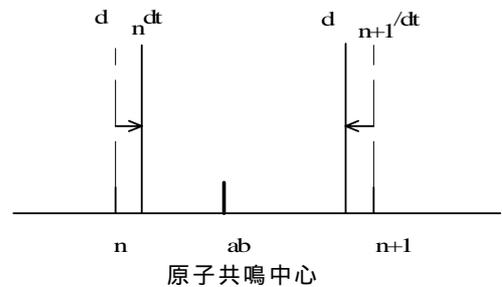
5.7. 周波数引っ張り現象

レーザ発振周波数は5.4.で導いたように次で与えられる。

$$\omega_n + \dot{\phi}_n \approx \omega_n \left\{ 1 - \frac{\mu^2}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\omega_n - \omega_{ab}}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2} (p_{aa} - p_{bb}) \right\}$$

反転分布が形成されている時 ($p_{aa} - p_{bb} > 0$) には、レーザ発振角周波数は共振器のみで決まる共振角周波数から、原子の共鳴角周波数の方向に引っ張られるようにシフトすることが分かる(図参照)。この現象を周波数引っ張り現象と呼ぶ。

この現象は媒質の屈折率変化で解釈することができる。すなわち、利得媒質の屈折率は4.で述べたように共鳴周波数よりも低い周波数の光に対しては低くなり、高い周波数に対しては高くなる。光の波長は屈折率に反比例する。この屈折率変化の方向は、例えば、原子の共鳴周波数よりも低い側の共振器共振周波数では波長が伸びる方向で、周波数を高い方にずらせることで共振条件が合う。共振器の共振周波数と原子の共鳴周波数とは一般には一致しない。ところが、活性媒質は自らの屈折率を変化させることで共振器の共振周波数を原子の共鳴周波数に近づけている。興味深い現象である。



5.8. 利得スペクトル線幅広がり

レーザ媒質の利得スペクトルを調べる。5.5.の式より、

$$\alpha(\omega_n) = \frac{\mu^2 \gamma}{2\varepsilon_0 \hbar} \frac{\omega_n \left(\frac{\lambda_a}{\gamma_a} - \frac{\lambda_b}{\gamma_b} \right)}{(\omega_{ab} - \omega_n)^2 + \gamma^2 \left\{ 1 + \frac{\gamma_a + \gamma_b}{4\gamma_a \gamma_b} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2 \right\}} - \frac{\omega_n}{2Q_n}$$

となり、線幅は $\gamma \sqrt{1 + \frac{\gamma_a + \gamma_b}{4\gamma_a \gamma_b} \left(\frac{\mu}{\hbar} \right)^2 E_n(t)^2}$ に広がる事が分かる。これは利得飽和に伴う広がりと呼ばれる。

以上でレーザ発振の理論記述を終わる。

第二部 量子ナノエレクトロニクスの基礎

固体中の電子は原子核や他の電子と相互作用する。これらの相互作用は1電子有効ポテンシャルで近似的に記述できる(独立電子近似)。この1電子有効ポテンシャルは結晶の原子配列と同じ周期性をもつ。

周期ポテンシャルの中で電子は奇異な振る舞いをする。ある範囲のエネルギーをもつ電子は結晶中に進入できない。一方、これとは別の範囲のエネルギーでは進入できるばかりか、全く散乱されずに運動する。散乱されない点で、結晶中の電子の振る舞いは真空中のそれに似る。散乱源になりえるイオンが多数存在するのに真空中と同じように振舞うのは奇異である。さらに結晶中では電子の質量がとても小さくなることもある(多くの化合物半導体中で電子の質量は真空中の1/10~1/25になる)。結晶内で電子に何が起きているのだろうか?探ってみよう。

6. 周期ポテンシャルとブロッホ関数

結晶内における電子の振る舞いの特異性は、ポテンシャルの周期的変化が1方向だけの場合でも現れる。本質を失わない単純化として1次元周期ポテンシャル空間を考える。

一次元シュレーディンガー方程式の固有関数を考察する。まずは自由空間の固有関数を。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = E\psi(z) \quad (1)$$

E は固有値、 $\psi(z)$ は固有関数である。 m は電子質量、 \hbar はプランク定数を2で割った値。固有値方程式(1)の固有関数は次のように簡単に導かれる。

$$\psi(z; k) = \exp(ikz), \quad \exp(-ikz) \quad \text{ただし} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2)$$

この固有関数を別の方法で導き出すことができる。この方法は上の方法と比べて面倒であるが周期ポテンシャル中の固有関数の一般的性質を導き出すのに有用である。以下でそれをやってみる。

式(1)の固有解 $\psi(z)$ が得られているとする。そのとき u を任意の距離として $\psi(z+u)$ も式(1)の固有値 E に属する解である。なぜなら次式が成り立つからである。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z+u)}{dz^2} = E\psi(z+u) \quad (3)$$

変数変換 $v = z + u$ を施す。式(3)は次の式になる。 $\frac{dv}{dz} = 1$ であることに注意。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(v)}{dv^2} = E\psi(v) \quad (4)$$

これは式(1)と同形である。ただ変数名が変わっただけである。よって成り立つ。

以上により $\psi(z)$ と $\psi(z+u)$ とは共に同じ固有値 E に属する固有関数である。同じ固有値に属する固有関数は、縮退していて独立な場合と、従属な場合とがあるが、ここでは従属な場合を考える。従属な固有関数は互いに定数倍の関係になっている。すなわち

$$\psi(z+u) = C\psi(z) \quad (5)$$

ここに C は u にも z にも依存しない定数である。ところで二つの固有関数は共に規格化されている。すなわち、規格化区間長を L として、次が成り立つ。

$$\int_L |\psi(z+u)|^2 dz = 1 \quad \text{かつ} \quad \int_L |\psi(z)|^2 dz = 1 \quad (6)$$

第一の式の左辺に式 (5) を代入し、第二の式を用いると

$$\int_L |\psi(z+u)|^2 dz = \int_L |C\psi(z)|^2 dz = |C|^2 \int_L |\psi(z)|^2 dz = |C|^2$$

となる。これが右辺の 1 に等しくなければならないから、結局、定数 C は $|C|^2 = 1$ を満たさなければならない。すなわち $C = \exp(i\theta)$ 。さらに θ は u に比例しなければならない。すなわち $\theta = ku$ (k は定数) である。それは、次の例から明らかである。

$$\psi(z+2u) = \exp(i\theta)\psi(z+u) = \{\exp(i\theta)\}^2 \psi(z) = \exp(i2\theta)\psi(z)$$

結局、
$$\psi(z+u) = \exp(iku)\psi(z) \quad (7)$$

なる関係が成り立たなければならない。

ここまでで固有関数の一般的な性質を導き出した。さらに具体的に、式 (7) の関係は

$$\psi(z) = \exp(ikz) \quad (8)$$

のとき成り立つ。これを式 (1) に代入することで、比例定数 k の値は式 (2) のように決まる。ここで重要な点は、自由空間のエネルギー固有関数は伝搬波であり、伝搬定数 k によって分類できることである。

周期ポテンシャルをもつシュレーディンガ方程式に、式 (7) を導いた手順を適用しよう。そして今度は周期ポテンシャル中の固有関数が満たすべき条件を導き出す。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (9)$$

ここに $V(z+a) = V(z)$ ただし a は格子周期 (10)

式 (9) の固有解 $\psi(z)$ が得られているとする。そのとき n を任意の整数として $\psi(z+na)$ も式 (1) の固有値 E に属する解である。それを示すには次の式が成り立つことを示せばよい。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z+na)}{dz^2} + V(z)\psi(z+na) = E\psi(z+na) \quad (11)$$

変数変換 $v = z + na$ を施す。 $\frac{dv}{dz} = 1$ 、 $V(v-na) = V(v)$ であることにより、式 (11) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(v)}{dv^2} + V(v)\psi(v) = E\psi(v) \quad (12)$$

になる。これは式 (9) と同形である。変数名が変わっただけである。よって成り立つ。

以上により $\psi(z)$ と $\psi(z+na)$ とは共に同じ固有値 E に属する固有関数である。同じ固有値に属する固有関数は、縮退していて独立な場合と、従属な場合とがあるが、ここでは従

属な場合を考える。従属な固有関数は互いに定数倍の関係になっている。すなわち

$$\psi(z + na) = C\psi(z) \quad (13)$$

ここに C は n にも z にも依存しない定数である。ところで二つの固有関数は共に規格化されている。すなわち規格化区間長を L として、次が成り立つ。

$$\int_L |\psi(z + na)|^2 dz = 1 \quad \text{かつ} \quad \int_L |\psi(z)|^2 dz = 1 \quad (14)$$

$$\int_L |\psi(z + na)|^2 dz = \int_L |C\psi(z)|^2 dz = |C|^2 \int_L |\psi(z)|^2 dz = |C|^2$$

となる。これが右辺の 1 に等しくなければならないから、結局、定数 C は $|C|^2 = 1$ を満たさなければならない、 $C = \exp(i\theta)$ 。さらに θ は n に比例することが要求される。すなわち $\theta = nh = nka$ (h は実定数、 $k = h/a$) である。それは、次から明らかである。

$$\psi(z + na) = \{\exp(ih)\}^n \psi(z) = \exp(inh)\psi(z)$$

結局、
$$\psi(z + na; k) = \exp(ikna)\psi(z, k) \quad (15)$$

なる関係が成り立たなければならない。

ここまでで周期ポテンシャルに対する固有関数が備えるべき一般的な性質を導き出した。すなわち周期 a の一次元周期ポテンシャル中のエネルギー固有関数は、任意の整数値 n に対して式 (15) を満たし、定数 k で分類することができる。

具体的に、固有関数を

$$\psi(z) = u_k(z) \exp(ikz) \quad \text{すなわち} \quad u_k(z) = \psi(z) \exp(-ikz) \quad (16)$$

の形で表し、式 (15) を適用すると (ここで式 (15) に含まれる k と同じ k を選んで用いたことに注意)

$$\begin{aligned} u_k(z + a) &= \psi(z + a) \exp(-ikz) \exp(-ika) \\ &= \exp(ika) \psi(z) \exp(-ikz) \exp(-ika) = \psi(z) \exp(-ikz) = u_k(z) \end{aligned} \quad (17)$$

となり、 $u_k(z)$ は a を周期とする周期関数である。

結局、周期ポテンシャル中の固有関数が満たすべき条件は式 (15) であり、これはポテンシャルと同じ周期をもつ周期関数と伝搬因子との積の形をもつ関数、式 (16) によって満たされる。これがブロッホの定理である。 k とエネルギー E との関係は具体的に $V(z)$ を与えて決めることができる。

$\psi(z)$ はいたるところで滑らかに連続である (量子力学の要請)。よって $u_k(z)$ もいたるところ滑らかに連続である。

7. クローニッチ・ペニー・モデル (厳密数値解)

7.1 ブロツホ関数定式化

図1の矩形周期ポテンシャル分布 (クローニッチ・ペニー・モデル) に対する E , k および $u(z)$ を求める。

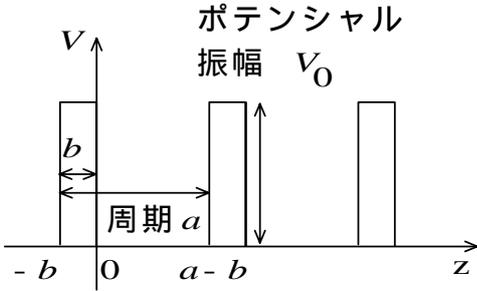


図1 周期ポテンシャル
(クローニッチ・ペニーモデル)

式(1)のブロツホ関数解を求めると関数 $u(z)$ は次になる。

$$\begin{aligned} u(z) &= \{A \exp(i\alpha z) + B \exp(-i\alpha z)\} \exp(-ikz) \quad 0 \leq z \leq a-b \\ &= \{C \exp(i\beta z) + D \exp(-i\beta z)\} \exp(-ikz) \quad -b \leq z \leq 0 \end{aligned} \quad (4)$$

ここに $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ 、 $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$ である。 $z = 0$ の両側および $z = -b$ と $a-b$ において、6 に述べたように $u(z)$ は滑らかに連続でなければならない。これより次の4つの方程式が成り立つ。

$$u(0+) = u(0-) \quad \left. \frac{du}{dz} \right|_{0+} = \left. \frac{du}{dz} \right|_{0-} \quad u(a-b) = u(-b) \quad \left. \frac{du}{dz} \right|_{a-b} = \left. \frac{du}{dz} \right|_{-b}$$

ただし α は正の実数であるとして、 $0+$ は $z = 0^+$ の意味、また $0-$ は $z = 0^-$ の意味である。この条件を満たし $A = B = C = D = 0$ 以外の解が存在する条件より次の分散 ($E-k$) 関係式を得る。

$$\cos(ka) = \cos(\alpha(a-b)) \cos(\beta b) - \frac{2E - V_0}{2\sqrt{E(E - V_0)}} \sin(\alpha(a-b)) \sin(\beta b) \quad (5)$$

7.2 分散関係と波動関数の数値解

k を与えて式(5)を解くと E が複数決まる(図2a)。各 E に対して上の4方程式の内の3つを解き B, C, D を A で表し関数 $u(x)$ に代入し規格化して A を決める(図2b)。

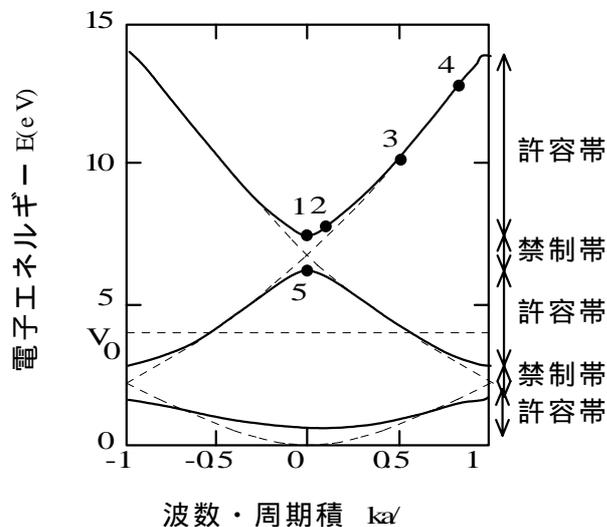


図2a $E-k$ 関係図
($V_0=4\text{eV}$ 、 $a=0.5\text{nm}$ 、 $b=0.1\text{nm}$)

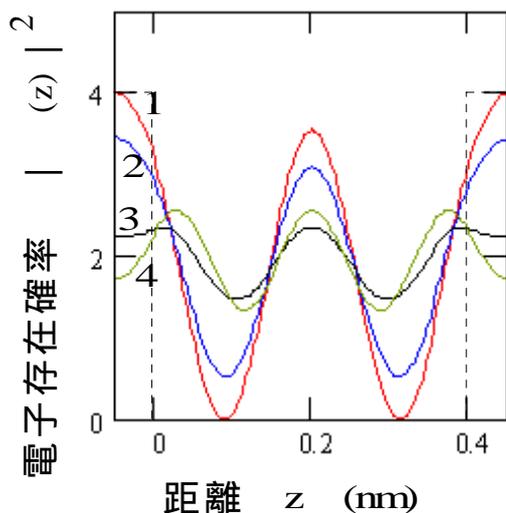


図2b 波動関数の様子
ラベル1から4は図2aと対応

ka に対してエネルギー E をプロットした図2aを次のように見よう。エネルギー E を与えて対応する ka の値を読み取る(実際、式(5)はエネルギーを与えると ka が陽に計算できる)。そうするとあるエネルギー範囲では値(実数値)を読み取ることができる。しかしこのように値が読み取れないエネルギー範囲が存在する。後から述べるが読み取れない範囲では ka が虚数値になっている。実数値 ka が対応するエネルギー範囲を許容帯(以下バンド)、虚数値が対応するエネルギー範囲を禁制帯(以下バンドギャップ)と呼ぶ。

7.3 バンドギャップと定在波

バンド(図2a)では電子の波動関数、式(3)、は k が実数であることから伝搬波因子 $\exp(ikz)$ をもつ。したがって結晶内を伝搬する波動関数をもつ。この点で真空中の電子の波動関数 $\exp(ikz)$ と似ている。一方、バンドギャップでは k は虚数になる。因子 $\exp(ikz)$ は今度は伝搬波ではなく減衰波となる。すなわち結晶中を伝搬していくことなく反射する。

図2bの1周期分の電子存在確率分布を見よう(図2b中のラベルは図2a中のラベルと対応している)。ラベル1の曲線を見ると $z = 0.09$ および 0.32 nm で確率密度が零になっている。電子は、例えば $z = 0.09$ nm の面を通過していない。すなわち確率密度が零になる二つの面の間から外に流れ出していない。格子の1周期内のさらに狭い範囲内で電子は行ったり来たりしている。この現象は、振幅が等しい前進波 $\exp(ikz)$ と後進波 $\exp(-ikz)$ とが重なり合っただけで定在波 $\cos kz$ が立っているときに起きる。ラベル1、 $ka=0$ 、あるいはバンドの底の状態は、波動関数が定在波になっている状態であり、そのとき電子は格子の1周期を越えて移動していない。

次にバンド中央の状態(ラベル3)を見てみよう。確率密度分布は、直流成分に小さな振動が重畳されており、次の式で表せそうである。

$$|\exp(ikz) + B\exp(-ikz)|^2 = 1 + B^2 + 2B\cos 2kz \quad (\text{ただし } B \text{ は実数で } 1 \text{ より小の時})$$

このとき電子は $+z$ 方向に流れる。したがって k を零から増加させる($E-k$ 図においてバンドの底から中央に向けて状態を移す)と電子は移動するようになる(図2bの曲線2,3)。これは前進波に比べて後進波振幅が減少し、定在波のバランスが崩れたためと解釈できる。この検証は次の節で行う。

図2aには破線曲線も描かれている。これは図1のポテンシャル振幅 V_0 を零にしたとき(周期ポテンシャルが無いとき)の $E-k$ 曲線である。前進波と後進波との結合によって分散曲線が変化している。この変化は $ka=0$ および $\pm \pi/2$ 付近で顕著である。これらは周期ポテンシャルによる前進波と後進波との結合(ブラッグ反射)が強く生じる点である。

7.4 結晶中電子の奇異な振る舞いの起源

冒頭で述べた奇異な振る舞いの解釈が得られそうだ。簡単のために1次元モデルで考えている。そのために散乱は後方散乱のみである。電子が粒子ならば散乱源の一つに衝突しただけで散乱されるだろう。しかし波動ならばいくつもの散乱源を同時に見て、多くの散乱源からの散乱波が重なり合って散乱が生じる。

今散乱源は等間隔で規則的に並んでいる。これらからの後方散乱波が重なり合うと干渉を起こす。干渉が建設的(位相が合って振幅が足し合わされる)ならば波動は強めあうが、破壊的(位相が180度ずれていて振幅が引き算される)ならば波動は打ち消し合う。規則的に並んだ散乱体から一定間隔の位相差で散乱波が発生する。これらが均一に加算されるとすると、180度に近い位相差をもつ散乱波対が存在し、互いに打ち消し合う。

上記の結果として散乱波は打ち消し合って抑制される。結晶中の電子は散乱が抑制される。イオンが多数存在しているにもかかわらず電子は真空中と同様の伝搬をする。ところがすべての散乱波が建設的に干渉する場合がある。それは散乱が強調される場合すなわちブラッグ反射である。これが奇異な現象の起源だ。

もう一つの奇異、軽い質量の起源は何か？ブラッグ反射による建設的な干渉が生じると波動関数は定在波になって伝搬しなくなり電子は止まる。結晶中でブラッグ反射によって動きを止められている電子は、波長を変化させて建設的干渉を崩してやれば動き出す。この動きだし易さ(難さ)が実効的な質量を決める。したがって建設的干渉状態がどれほど強固かが実効的な質量を決める。このために軽い質量も起こり得る。

以上の解釈を近似解析理論で確認し定量的議論に発展させるのが次の節の主題である。

8 . 結合波理論による近似解析

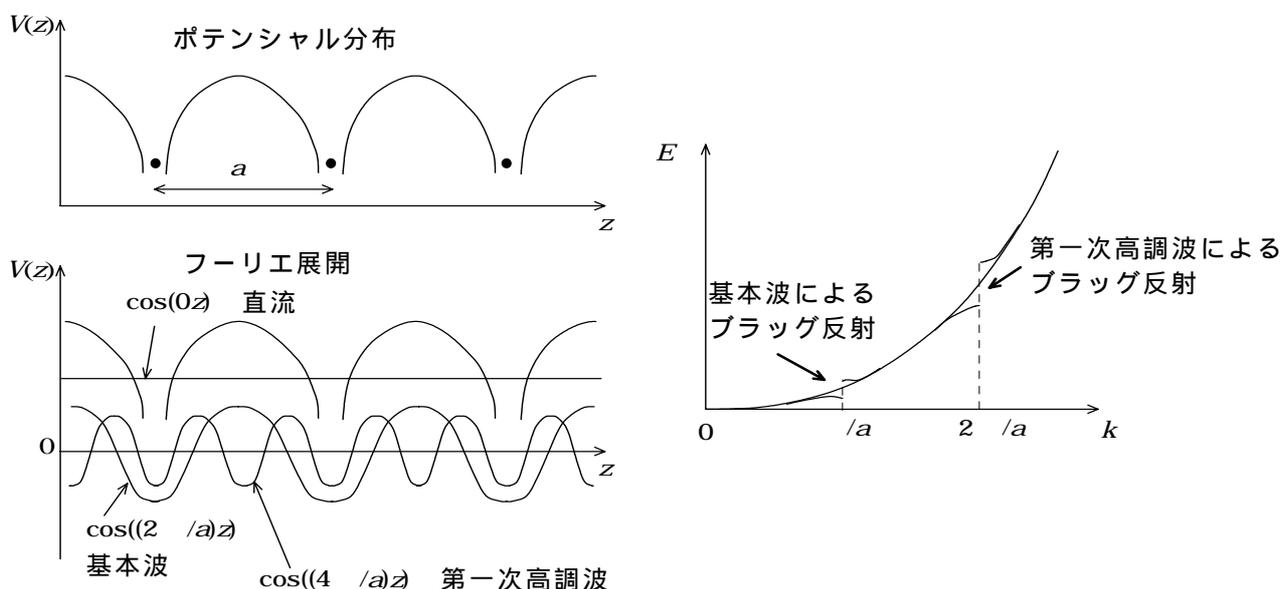
8 . 1 ブラッグ反射係数によるブロッホ関数表現

前章で述べたように、波動関数の波長が $2a/n$ (波数 k が $n\pi/a$) に近づくと、前進波と後進波との結合が顕著になる。波動関数は前進波項と後進波項とからなり、結合により、後進波の振幅が前進波のそれに近づく。 $k = n\pi/a$ では両波の振幅が完全に釣り合って定在波となり、確率流は零となる。本節では k が $n\pi/a$ からずれるとともに、前・後進波の振幅釣り合いが崩れ、確率流が増加する様子を解析的に表す。この解析表現を用いて、バンド底付近での電子の振る舞いを定量的に記述する。解析的に表すために近似を導入する。この近似が成り立つのはポテンシャルの周期変動振幅が十分に小さいときである (弱結合近似)。この解析は DFB レーザの解析に用いられた結合波理論*を結晶中の波動関数の解析に応用したものである (*H. Kogelnik and C. V. Shank, "Coupled-Wave Theory of Distributed Feedback Lasers," J. Appl. Phys., 43, 5, pp.2327-2335 (1972))。

ポテンシャル分布に含まれる波数 $2n\pi/a$ の周期変動成分のみに注目する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi + A \cos(2k_0 z) \psi = E\psi \quad k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_B} \quad \lambda_B = \frac{2a}{n} \quad (6)$$

ここに A はポテンシャルの周期変動振幅である。 n は自然数で、図に示すように結晶の周期ポテンシャル関数をフーリエ展開したときの調波次数である。



結合波理論を適用して式(6)の解を求める。まず次の解を代入する。

$$\psi(z) = F(z) \exp(ik_0 z) + G(z) \exp(-ik_0 z) \quad (7)$$

F および G は緩やかに空間変化するとして、それらの 2 階微係数を無視し、さらに空間高調波 $\exp(i3k_0 z)$ および $\exp(-i3k_0 z)$ を無視する近似を行い、 $\exp(ik_0 z)$ および $\exp(-ik_0 z)$ のそれ

それぞれの係数が両辺で等しいとして、

$$\begin{aligned} iF'(z) + aF(z) &= bG(z) \\ iG'(z) - aG(z) &= -bF(z) \end{aligned} \quad \text{ただし} \quad a \equiv \frac{1}{2k_0} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - k_0^2 \right) \quad b \equiv \frac{1}{2k_0} \frac{A}{2} \frac{2m}{\hbar^2}$$

この連立一階微分方程式を解く。Gを消去して

$$F''(z) = -k'^2 F(z) \quad k' \equiv \sqrt{a^2 - b^2}$$

この二階微分方程式の解は $F(z) = F_1 \exp(ik'z) + F_2 \exp(-ik'z)$ これより

$$G(z) = -\frac{k'}{b} (F_1 \exp(ik'z) - F_2 \exp(-ik'z)) + \frac{a}{b} (F_1 \exp(ik'z) + F_2 \exp(-ik'z))$$

結局、式(6)の解は、次の二つの互いに独立な関数 ψ_1 と ψ_2 との重ね合わせで与えられる。

$$\psi_1(z) = \left(\exp(ik_0z) + \frac{a-k'}{b} \exp(-ik_0z) \right) \exp(ik'z) = u_1(z) \exp(ikz)$$

$$\text{where} \quad u_1(z) \equiv 1 + \frac{a-k'}{b} \exp(-i2k_0z) \quad k \equiv k_0 + k'$$

$$\psi_2(z) = \left(\exp(ik_0z) + \frac{a+k'}{b} \exp(-ik_0z) \right) \exp(-ik'z) = u_2(z) \exp(-ikz)$$

$$\text{where} \quad u_2(z) \equiv \exp(i2k_0z) + \frac{a+k'}{b}$$

$2k_0a = 2 \frac{2\pi}{\lambda_B} a = 2 \frac{2\pi}{2a/n} a = 2\pi n$ であるから、 u 関数は、周期 a の周期関数になり、二つの波

動関数はともにブロッホ関数になっている。以下では ψ_1 に注目する。波動関数は前進波

$\exp(i(k_0 + k')z)$ と後退波 $\frac{a-k'}{b} \exp(-i(k_0 - k')z)$ からなる。二つの波は、波数の絶対値が

ずれるが、これは近似誤差と考えられる。後退波の振幅、ブラッグ反射係数を B とおく。

$$B = \frac{\frac{1}{2k_0} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - k_0^2 \right) - k'}{\frac{1}{2k_0} \frac{A}{2} \frac{2m}{\hbar^2}} = \frac{2E}{A} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{mA} - \frac{2\hbar^2 k_0 k'}{mA} \quad k' = \frac{k_0}{2} \sqrt{\left(\frac{2mE}{\hbar^2 k_0^2} - 1 \right)^2 - \left(\frac{A}{2} \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} \right)^2} \quad (8)$$

波長がブラッグ波長に等しい、すなわち $k=k_0$ あるいは $k'=0$ のとき、式(8)から

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2 k_0^2} - 1 \right)^2 = \left(\frac{A}{2} \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} \right)^2 \quad \frac{2mE}{\hbar^2 k_0^2} = 1 \pm \frac{A}{2} \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} \quad \text{あるいは} \quad E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \pm \frac{A}{2}$$

複号はエネルギーギャップの上と下とに対応する。すなわちギャップエネルギーは A に等しい。そこで以下では A の代わりに E_g と書くことにする。エネルギーと波数の関係は、

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_0 k'}{m} \right)^2 + \left(\frac{E_g}{2} \right)^2} \quad \text{となる。さらにバンド底から測ったエネルギー}$$

$$E' \equiv E - \left(\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + \frac{E_g}{2} \right) \quad \text{を用いて書き直すと} \quad E' = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_0 k'}{m} \right)^2 + \left(\frac{E_g}{2} \right)^2} - \frac{E_g}{2} \quad \text{となる。}$$

これは $(k, E) = \left(k_0, \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + \frac{E_g}{2} \right)$ を原点にした E - k 関係 (E' - k') である。 k' について解いて

$$k' = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \sqrt{E' E_g} \sqrt{1 + \frac{E'}{E_g}} \quad (9)$$

8.2 有効質量

式(9)は $E' = 0$ で $k' = \frac{m}{\hbar^2 k_0} \sqrt{E' E_g}$ となる。有効質量を $m^* \equiv \hbar^2 \frac{d^2 k}{dE^2} = \hbar^2 \frac{d^2 k'}{dE'^2}$ とすると、

$$m^* = \frac{m^2 E_g}{2\hbar^2 k_0^2} \quad \frac{m}{m^*} E_g = \frac{2\hbar^2 k_0^2}{m} \quad (10)$$

二つの結晶で、格子定数が共通ならば $E_g(m/m^*)$ も共通になる。実際に InP に格子整合した GaInAs の対について調べてみると、 $1.35/0.08=16.9$ (InP) , $0.75/0.04=18.8$ (GaInAs) と十分に近い。さらに式(10)に基づいて格子定数 a は $k_0 = n\pi/a$ (式(6)の定義参照) を用いて、 $n=2$ とすると 5.97 と計算され、InP の実際の

格子定数 5.87 と 2%以内で一致する。 $\left(k_0 = \frac{\pi n}{a} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{m^*} E_g \frac{m}{2}} \quad a = \frac{\pi n \hbar}{\sqrt{\frac{m}{m^*} E_g \frac{m}{2}}} \right)$

ここで関係式をまとめよう。無次元の補助パラメータ F を次のように定義し用いる。

$$k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* \left(1 + \frac{E'}{E_g} \right) E'} \quad (11)$$

$$B = \sqrt{F+1} - \sqrt{F} \quad F \equiv \frac{4\hbar^4 k_0^2 k'^2}{m^2 E_g^2} = 4 \left(1 + \frac{E'}{E_g} \right) \frac{E'}{E_g} \quad (12)$$

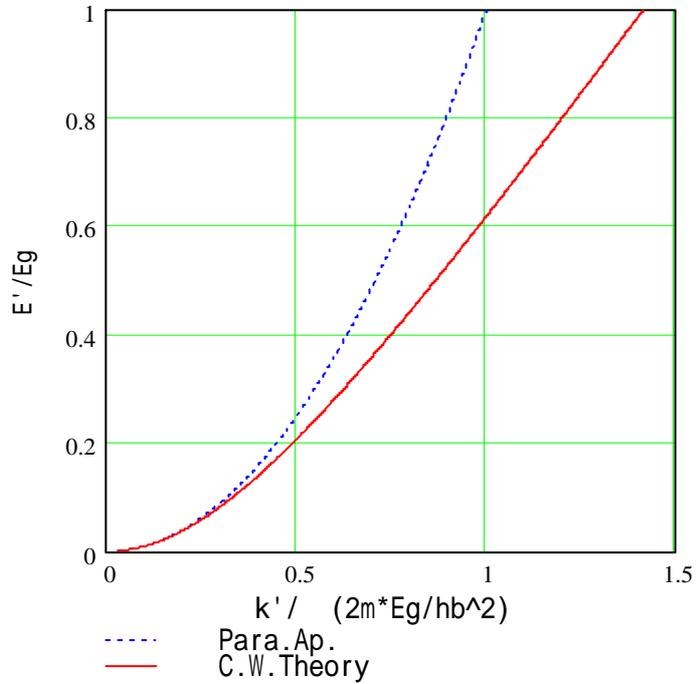
これらより次の関係が成り立つ。

$$\frac{1-B^2}{1+B^2} = \frac{\sqrt{F}}{\sqrt{F+1}} \quad E = E' + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + \frac{E_g}{2} = E' + \frac{E_g}{2} \left(\frac{m}{2m^*} + 1 \right)$$

8.3 分散関係

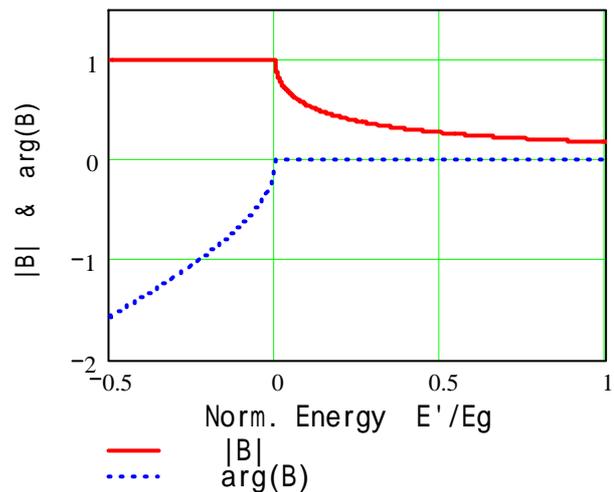
周期ポテンシャルに対応する分散特性 (E' - k 関係、式(11))を図に示す。実線は結合波理論、破線は $E = 0$ の極限で成り立つ近似、放物線近似、である。これより放物線近似が妥当なのは、バンド底から測った電子エネルギーがギャップエネルギーの $1/10$ 程度までである。例えば、GaInAs ($E_g=0.75\text{eV}$) では 75meV 程度までである。

分散特性が放物線関数でないならば支配方程式も真空中とは異なる。質量だけを有効質量に置き換えた真空中と同形の支配方程式 (有効質量方程式) は厳密には成り立たない。誤差評価が必要である。後で結合波解析の枠内で厳密式を導き、それとの比較から (非放物線特性を組み込んだ) 有効質量近似方程式解析の精度を検討する。



8.4 ブラッグ反射係数

ブラッグ反射係数 B 、式(12)、のエネルギー依存性を調べる。エネルギー E がバンドギャップ中央値 $-E_g/2$ からバンド底値 0 、バンド内での正値まで変化すると、補助パラメータ F は、 -1 から 0 そして正の値をとる。そしてブラッグ反射係数 B は右図のように変化する。すなわちギャップ内では、絶対値は 1 に固定され、位相が変化する。一方、バンド内では、位相は零に固定され振幅が変化する。



8.5 平均確率密度と確率流密度

結晶中電子の波動関数はバンド内およびギャップ内状態ともに次式で表される。

$$\psi(z) = C u_k(z) \exp(ikz) \quad k = k_0 + k' \quad u_k(z) = \frac{1}{\sqrt{(1+|B|^2)a}} (1 + B \exp(-i2k_0 z)) \quad (13)$$

単位格子内の存在確率が1になるように規格化した。単位格子内の平均確率密度 p および確率流密度 j はバンド内状態 (B は実数) に対して次式となる。

$$p = \langle |\psi(z)|^2 \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a |\psi(z)|^2 dz = \frac{|C|^2}{a} \quad (14)$$

$$j = \text{Re} \left[\psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d\psi}{dz} \right] \simeq \frac{|C|^2}{a} \frac{\hbar k_0}{m} \frac{1-B^2}{1+B^2} = \frac{|C|^2}{a} \sqrt{\frac{2E'}{m^*} \left(1 + \frac{E'}{E_g} \right)} \frac{1}{1 + 2 \frac{E'}{E_g}} \quad (15)$$

確率流密度の計算では $k' \ll k_0$ を用いたが、これは $\frac{k'}{k_0} = 2 \frac{m^*}{m} \sqrt{\frac{E'}{E_g} \left(1 + \frac{E'}{E_g} \right)}$ であることから

比有効質量が十分に小さいときには、広いエネルギー範囲で成り立つ。数値例として

$\frac{m^*}{m} = 0.04$ の場合 $\frac{E'}{E_g} < 0.8$ で $\frac{k'}{k_0} < 0.1$ であり近似条件は成り立つ。このとき、

$$\begin{aligned} \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d\psi}{dz} &= \frac{\hbar}{m} \frac{|C|^2}{(1+B^2)a} (k_0 + k' - (k_0 - k')B^2 + 2k'B \cos(2k_0z) + i2k_0B \sin(2k_0z)) \\ &\simeq \frac{\hbar}{m} \frac{|C|^2}{(1+B^2)a} (k_0 - k_0B^2 + i2k_0B \sin(2k_0z)) \end{aligned}$$

バンド内状態における確率流は $j = \frac{|C|^2}{a} \frac{\hbar k_0}{m} \frac{1-B^2}{1+B^2}$ で表される。8.4 で述べたように、エ

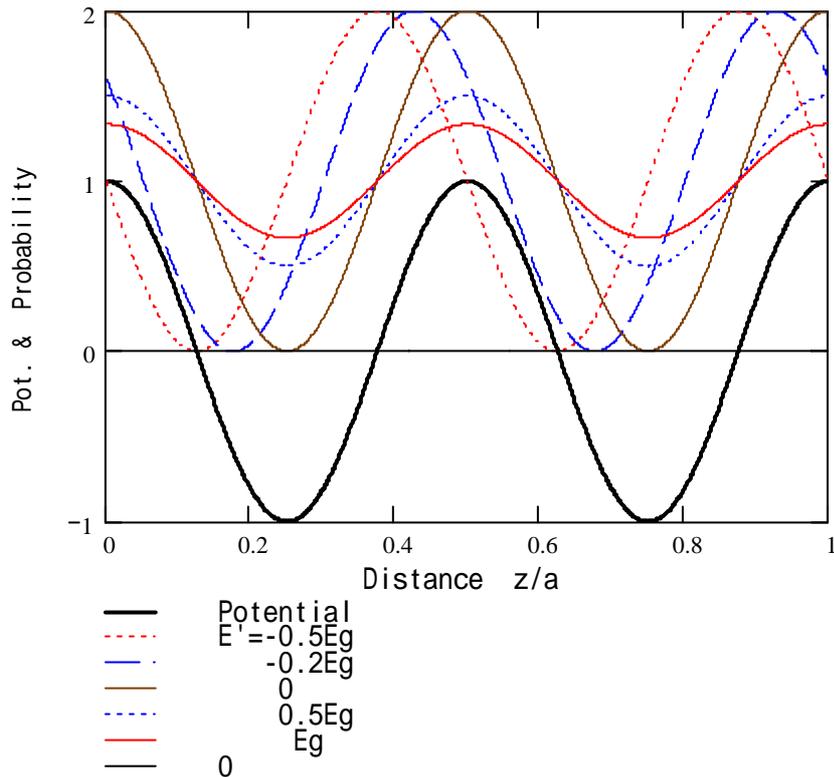
ネルギー E を0から正に増加させるとブラッグ反射係数 B は1から1以下の値に減少する。確率流は0から正の値に増加し、電子が動き始める。式(15)は、定在波を構成している前進波と後進波の振幅バランスが崩れる(振幅比 B が1以下になる)ことにより電子の流れが生じることを表現している。電子の確率流密度 j を電子の存在確率密度 p で割ると電子

速度 $v = \sqrt{\frac{2E'}{m^*} \left(1 + \frac{E'}{E_g} \right)} \left(1 + 2 \frac{E'}{E_g} \right)^{-1}$ が得られる。エネルギーに対する速度の依存性 ($2E'/v^2$)

から実効的な質量、有効質量、が決まる。エネルギー E を零から正に増やしたときに、ブラッグ反射係数 B がどれだけ速く減少するかが電子の軽さを表すことになる。と言うことは、有効質量は自由電子質量に比べて小さくなり得る(ポテンシャルの周期変化振幅を零に近づけると有効質量も零に近づく。そしてポテンシャルの周期変化振幅はギャップエネルギーに等しい)。

結晶内のバンド内状態およびギャップ内状態の電子波動関数の様子を図示する。

$$|\psi(z)|^2 = |u_k(z)|^2 = \frac{1}{(1+|B|^2)a} \left(1 + |B|^2 + 2 \text{Re} \left[B \exp \left(-i \frac{2n\pi}{a} z \right) \right] \right)$$



ギャップ内状態では波動関数は定在波をなす。その定在波とポテンシャル分布の相対位相はエネルギーに依存する。バンド内状態では、定在波と進行波とが混合しており、定在波とポテンシャル分布との相対位相は固定され、定在波振幅がエネルギーに依存する。これは上にのべたブラッグ反射係数のエネルギー依存性と対応している。

8.6 波束の運動速度

波動関数 $\Psi(z, t, k) = u_k(z) \exp(ikz) \exp\left(-i \frac{E(k)}{\hbar} t\right)$ を様々な波数 k について重ね合わせた波動(これを波束と呼ぶ) $\Phi(z, t)$ の伝搬を調べる。今、格子内の特定の位置、 $z = m\pi / k_0$ ($m = 0, 1, 2, \dots$) なるサンプリング点に注目する。式(13)を用いて波束は

$$\Phi(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1 + B(k)}{\sqrt{1 + |B(k)|^2}} \exp(ikz) \exp\left(-i \frac{E(k)}{\hbar} t\right) dk = \int_{-\infty}^{\infty} S(k) \exp(ikz) \exp\left(-i \frac{E(k)}{\hbar} t\right) dk$$

で記述される。ここで $S(k) \left(\equiv C(k) (1 + B(k)) / \sqrt{1 + |B(k)|^2} \right)$ は初期条件 ($z, t=0$) によって決まる係数である。初期条件を次で与える。

$$\Phi(z, 0) = \exp\left[-\left(\frac{z}{\sqrt{2}w}\right)^2\right] \exp(ik_c z) \quad \text{あるいは} \quad |\Phi(z, 0)|^2 = \exp\left[-\left(\frac{z}{w}\right)^2\right]$$

確率密度分布は $z = 0$ を中心として $1/e$ 値半幅が w であるガウス関数で表される。 k_c は波束の中心波数で、電子の運動量は $\hbar k_c$ を中心として広がりをもち、また位置は $z=0$ を中心として広がりをもつ。すなわち位置と運動量についての不確定性原理が成り立つ。このとき任意の時刻 t における波束は次で与えられる。

$$\Phi(z, t) = \frac{w}{\sqrt{w^2 + i \frac{t}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2}}} \exp\left[-\frac{\left(z - \frac{t}{\hbar} \frac{dE}{dk}\right)^2}{2\left(w^2 + i \frac{t}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2}\right)}\right] \exp\left(i\left(k_c z - \frac{E(k_c)}{\hbar} t\right)\right)$$

式の導出は以下の通りである。 $t = 0$ で成り立つ $\exp\left(-\left(\frac{z}{\sqrt{2}w}\right)^2\right) \exp(ik_c z) = \int_{-\infty}^{\infty} S(k) \exp(ikz) dk$ の両辺に

$\exp(-ik'z)$ をかけて z で $-\infty$ から ∞ まで積分し、関数 $\delta(x) = \lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin(gx)}{\pi x}$ を用い、 k 積分を実行し、

$$S(k') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{z}{\sqrt{2}w}\right)^2\right] \exp(i(k_c - k')z) dz = \frac{w}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{w^2(k_c - k')^2}{2}\right] \text{ を得る(フーリエ変}$$

換公式 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) \exp(ixy) dx = \frac{1}{\sqrt{2a}} \exp\left(-\frac{y^2}{4a}\right)$ をもちいた、これを代入して任意の時刻 t の波動

関数は、 $\Phi(z, t) = \frac{w}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{w^2(k - k_c)^2}{2}\right] \exp(ikz) \exp\left(-i\frac{E(k)}{\hbar} t\right) dk$ となる。 E を k_c 付近でテー

ラー展開し第二項で打ち切り、上のフーリエ変換公式を再び用いると次になり、目的の式が導出できる。

$$\begin{aligned} \Phi(z, t) &\simeq \frac{w}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{w^2(k - k_c)^2}{2} + ikz - i\frac{t}{\hbar} \left(E(k_c) + \frac{dE}{dk}(k - k_c) + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dk^2}(k - k_c)^2\right)\right] dk \\ &= \frac{w}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(i\left(k_c z - \frac{E(k_c)}{\hbar} t\right)\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(w^2 + i \frac{t}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2}\right) k'^2\right] \exp\left(i\left(z - \frac{t}{\hbar} \frac{dE}{dk}\right) k'\right) dk' \end{aligned}$$

波束の中心は群速度 $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ で z 方向に移動し、 $1/e$ 値半幅は $w \sqrt{1 + \left(\frac{1}{w^2 \hbar} \frac{d^2 E}{dk^2}\right)^2 t^2}$ と

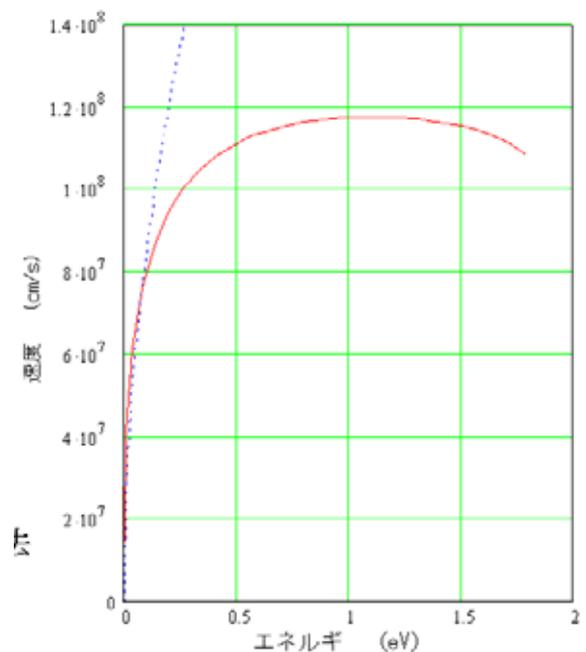
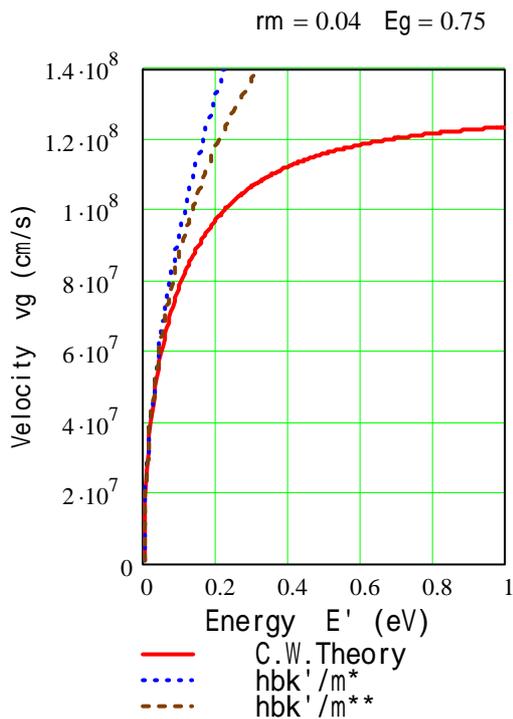
なり時間とともに広がる(分散関係が異なる電磁波の場合と対照的)。

群速度は式(11)を用いて次式で与えられる。

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{dk}{dE}\right)^{-1} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{dk'}{dE'}\right)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2m^*}} \left(\frac{d}{dE'} \sqrt{E' + \frac{E_g'^2}{E_g}}\right)^{-1} = \sqrt{\frac{2E'}{m^*}} \frac{\sqrt{1 + \frac{E'}{E_g}}}{1 + 2 \frac{E'}{E_g}} = \frac{\hbar k'}{m^{***}} \quad (16)$$

$$\text{where } m^{***} \equiv m^* \left(1 + 2 \frac{E'}{E_g}\right)$$

この群速度は 8.5 で j/p として求めた電子速度と一致する。



経験的擬ポテンシャル法による速度
(町田信也氏による)

本近似理論で得た電子速度（左図の"C.W.Theory"）はフルバンド計算結果（右図）と比較して、 $0.62\text{eV} (= E_L)$ で、前者が $1.2 \times 10^8 \text{cm/s}$ 、後者が $1.15 \times 10^8 \text{cm/s}$ と 5% 以内で一致する。後者は、町田信也氏によるもので、経験的擬ポテンシャル法を用い、GaInAs の(100)方向の $E-K$ 関係が解析された。多バンドの影響が顕著にならない低エネルギーでは、結合波近似理論（1次元モデル）で電子速度を十分に正確に見積もることができる。左のグラフには、放物線関係の場合 $v_g = \hbar k / m^*$ 、非放物線効果を考慮した有効質量を用いた場合 $v_g = \hbar k / m^{**}$ （ m^{**} は 9.5 参照）も示した。数値例ではエネルギーが 50meV 程度までは放物線特性が使える、0.2eV 以上では放物線特性は全く使えない。また非放物線特性を考慮した有効質量を用いても速度は精度よくは表せない（非放物線分散特性を微分すれば精度よく表すことができる）。

以上、均一な周期構造中の電子の振る舞いを定式化した。次に、格子定数は共通だが、ギャップエネルギーは違って有効質量が異なる複数の結晶が接合された一次元空間内の電子の振る舞いについて考察する。この一次元ポテンシャル分布には電界によるポテンシャル傾斜も含めることができる。ナノサイズヘテロ接合構造中の電子の振る舞い解析手段を定式化する。

9 . ヘテロ接合ナノ構造中の電子

9 . 1 ヘテロ界面での境界条件

ポテンシャル周期関数の k_0 値 (格子定数 a) は共通だが有効質量 m^* 、バンド底エネルギー E_c が異なる二つの領域 i および $i+1$ の界面 z_{i+1} における境界条件を求める。

それぞれの領域における波動関数は、接合での反射を考慮して、式(13)で与えられる波と、それと反対方向に伝搬する波の和で与える。バンド内状態およびギャップ内状態とも次で表される。

$$\begin{aligned} \psi_j(z) &= C_j w_{kj}(z) \exp(ik'_j z) + D_j w_{-kj}(z) \exp(-ik'_j z) \quad j = i, i+1 \\ w_{kj}(z) &= \frac{\exp(ik_0 z) + B_j \exp(-ik_0 z)}{\sqrt{(1 + |B_j|^2) a}} \quad w_{-kj}(z) = \frac{\exp(-ik_0 z) + B_j \exp(ik_0 z)}{\sqrt{(1 + |B_j|^2) a}} \\ E_j' &\equiv E - E_{cj} \\ k_j'^2 &= \frac{2m_j^* E_j'}{\hbar^2} \left(1 + \frac{E_j'}{E_{gj}}\right) \quad F_j = 4 \frac{E_j'}{E_{gj}} \left(1 + \frac{E_j'}{E_{gj}}\right) \quad B_j = \sqrt{F_j + 1} - \sqrt{F_j} \end{aligned} \quad (17)$$

ここに $w_{kj}(z) \equiv u_{kj}(z) \exp(ik_0 z)$ である。 $w_{kj}(z)$ は周期 $2a$ の周期関数である。境界で波動関数が連続、微係数 d/dz が連続であることから以下が成り立つ。

$$\begin{aligned} &\frac{\exp(i2k_0 z_{i+1}) + B_i}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) + \frac{1 + B_i \exp(i2k_0 z_{i+1})}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} D_i \exp(-ik'_i z_{i+1}) \\ &= \frac{\exp(i2k_0 z_{i+1}) + B_{i+1}}{\sqrt{1 + |B_{i+1}|^2}} C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) + \frac{1 + B_{i+1} \exp(i2k_0 z_{i+1})}{\sqrt{1 + |B_{i+1}|^2}} D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1}) \end{aligned}$$

$k'_j \ll k_0$ を用いて (8.5 参照)

$$\begin{aligned} &\frac{\exp(i2k_0 z_{i+1}) - B_i}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) - \frac{1 - B_i \exp(i2k_0 z_{i+1})}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} D_i \exp(-ik'_i z_{i+1}) \\ &= \frac{\exp(i2k_0 z_{i+1}) - B_{i+1}}{\sqrt{1 + |B_{i+1}|^2}} C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) - \frac{1 - B_{i+1} \exp(i2k_0 z_{i+1})}{\sqrt{1 + |B_{i+1}|^2}} D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1}) \end{aligned}$$

領域境界点 z_{i+1} の微視的位置に対応するポテンシャル余弦関数位相 $2k_0 z_{i+1}$ は任意だが、一定値をとるものとする (各領域 (層) の厚さは格子定数の整数倍とする)。このとき、

$$P^{(1)} C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) + P^{(2)} D_i \exp(-ik'_i z_{i+1}) = P^{(1)} C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) + P^{(2)} D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1})$$

$$Q_i^{(1)}C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) - Q_i^{(2)}D_i \exp(-ik'_i z_{i+1}) = Q_{i+1}^{(1)}C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) - Q_{i+1}^{(2)}D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1})$$

ここに $j = i, i+1$

$$\begin{aligned} P_i^{(1)} &\equiv \frac{1}{\sqrt{1+|B_i|^2}} (\exp(i\theta) + B_i) & Q_i^{(1)} &\equiv \frac{1}{\sqrt{1+|B_i|^2}} (\exp(i\theta) - B_i) \\ P_i^{(2)} &\equiv \frac{1}{\sqrt{1+|B_i|^2}} (1 + B_i \exp(i\theta)) & Q_i^{(2)} &\equiv \frac{1}{\sqrt{1+|B_i|^2}} (1 - B_i \exp(i\theta)) \end{aligned} \quad (18)$$

9.7 で示すようにヘテロ接合構造中の波動関数は の選び方にはほとんど依存しない。
 $= 0$ とすると境界条件は次のように簡単化できる。

$$P_j = P_i^{(1)} = P_i^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{1+|B_j|^2}} (1 + B_j) \quad Q_j = Q_j^{(1)} = Q_j^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{1+|B_j|^2}} (1 - B_j)$$

$$P_i (C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) + D_i \exp(-ik'_i z_{i+1})) = P_{i+1} (C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) + D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1}))$$

$$Q_i (C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) - D_i \exp(-ik'_i z_{i+1})) = Q_{i+1} (C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) - D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1}))$$

上の境界条件は、二つの領域が、両方とも電子がバンド内状態にある場合、両方ともギャップ内状態にある場合、バンド内状態とギャップ内状態の場合、などどんな組み合わせに対しても成り立つ。

ヘテロ接合境界におけるプロッホ関数の様子を数値計算した結果は 9.6 節で示す。これを計算するには次に述べる反射係数および透過係数が必要である。

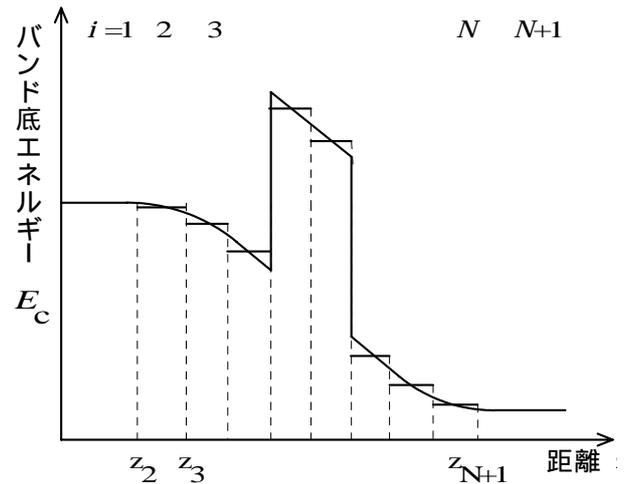
9.2 ヘテロナノ構造中電子の行列解析

一つ一つの層内では有効質量およびバンド底エネルギーが一定であるような層が多数あり、異なる層では k_0 値は共通 (格子定数 a は共通) だが、有効質量 and/or バンド底エネルギーが異なっているとす。このような多層構造内の電子状態は、上で導き出した波動関数と界面での境界条件を用いて決定できる。このために以下の行列法を用いる。今、

$$V(z) = P_i^{(1)}C_i \exp(ik'_i z) + P_i^{(2)}D_i \exp(-ik'_i z)$$

$$I(z) = Q_i^{(1)}C_i \exp(ik'_i z) - Q_i^{(2)}D_i \exp(-ik'_i z)$$

とおくと



$$\begin{pmatrix} V(z_{i+1}) \\ I(z_{i+1}) \end{pmatrix} = G_i \begin{pmatrix} V(z_i) \\ I(z_i) \end{pmatrix}$$

$$G_i = \begin{pmatrix} \frac{P^{(1)}_i Q^{(2)}_i \exp(ik'_i d_i) + P^{(2)}_i Q^{(1)}_i \exp(-ik'_i d_i)}{P^{(1)}_i Q^{(2)}_i + Q^{(1)}_i P^{(2)}_i} & i \frac{2P^{(1)}_i P^{(2)}_i \sin k'_i d_i}{P^{(1)}_i Q^{(2)}_i + Q^{(1)}_i P^{(2)}_i} \\ \frac{i2Q^{(1)}_i Q^{(2)}_i \sin k'_i d_i}{P^{(1)}_i Q^{(2)}_i + Q^{(1)}_i P^{(2)}_i} & \frac{P^{(2)}_i Q^{(1)}_i \exp(ik'_i d_i) + P^{(1)}_i Q^{(2)}_i \exp(-ik'_i d_i)}{P^{(1)}_i Q^{(2)}_i + Q^{(1)}_i P^{(2)}_i} \end{pmatrix}$$

$$|G_i|^2 = 1 \quad (19)$$

が成り立つ (C_j, D_j を消去し $V(z_{i+1}), I(z_{i+1}), V(z_i), I(z_i)$ の間の関係式を導出) 式(19)で $i = 1, 2, \dots, N$ とした式が各層間境界で成り立つ。その結果として次の行列式が成り立つ。

$$\begin{pmatrix} P^{(1)}_{N+1} C_{N+1} \exp(ik'_{N+1} z_{N+1}) + P^{(2)}_{N+1} D_{N+1} \exp(-ik'_{N+1} z_{N+1}) \\ Q^{(1)}_{N+1} C_{N+1} \exp(ik'_{N+1} z_{N+1}) - Q^{(2)}_{N+1} D_{N+1} \exp(-ik'_{N+1} z_{N+1}) \end{pmatrix} = G_N G_{N-1} \dots G_3 G_2 \begin{pmatrix} P^{(1)}_1 C_1 \exp(ik'_1 z_1) + P^{(2)}_1 D_1 \exp(-ik'_1 z_1) \\ Q^{(1)}_1 C_1 \exp(ik'_1 z_1) - Q^{(2)}_1 D_1 \exp(-ik'_1 z_1) \end{pmatrix}$$

これは4つの変数 $C_1, C_{N+1}, D_1, D_{N+1}$ についての2連立方程式であり、4変数の内の2つの値を指定すると、残りの変数値を決定できる。さらに式(19)を用いてすべての層における C, D の値を決めることができる。すなわち電子状態が決まる。ポテンシャル分布は不連続点を含む任意形状を指定できる。分割を十分に細かくすることにより、連続分布に対する解を得ることもできる。

$z < z_2 (=0)$ の領域 ($i = 1$) と $z > z_{N+1}$ の領域 ($i = N+1$) との間にヘテロ接合や電界印加によるポテンシャル分布 $E_c(z)$ があると、 $z < z_2$ から平面波が入射し $z > z_{N+1}$ へ通過する場合を考える。このとき次式が成り立つ。

$$\begin{pmatrix} P^{(1)}_{N+1} t \exp(ik'_{N+1} z_{N+1}) \\ Q^{(1)}_{N+1} t \exp(ik'_{N+1} z_{N+1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P^{(1)}_1 + P^{(2)}_1 r \\ Q^{(1)}_1 - Q^{(2)}_1 r \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \equiv G_N G_{N-1} \dots G_3 G_2 \quad (20)$$

これを解いて

$$r = \frac{M_{11} P^{(1)}_1 Q^{(1)}_{N+1} + M_{12} Q^{(1)}_1 Q^{(1)}_{N+1} - M_{21} P^{(1)}_1 P^{(1)}_{N+1} - M_{22} P^{(1)}_{N+1} Q^{(1)}_1}{-M_{11} P^{(2)}_1 Q^{(1)}_{N+1} + M_{12} Q^{(2)}_1 Q^{(1)}_{N+1} + M_{21} P^{(2)}_1 P^{(1)}_{N+1} - M_{22} P^{(1)}_{N+1} Q^{(2)}_1} \quad (21)$$

$$t = \frac{P^{(2)}_1 Q^{(1)}_1 + P^{(1)}_1 Q^{(2)}_1}{M_{11} P^{(2)}_1 Q^{(1)}_{N+1} - M_{12} Q^{(2)}_1 Q^{(1)}_{N+1} - M_{21} P^{(2)}_1 P^{(1)}_{N+1} + M_{22} P^{(1)}_{N+1} Q^{(2)}_1} \exp(-ik'_{N+1} z_{N+1}) \quad (22)$$

バンド内状態による確率流密度、式(15)、を参照して反射と透過の確率は次になる。

$$R = |r|^2 \quad T = \frac{1 + B_1^2}{1 - B_1^2} \frac{1 - B_{N+1}^2}{1 + B_{N+1}^2} |t|^2 \quad (23)$$

以上、1次元結晶ヘテロ接合構造中の電子の振る舞いが定式化された。これを用いたヘテロナノ構造における電子波伝搬特性を後で調べる。その前に近似解析法について述べる。

9.3 放物線近似

ここまでは近似条件 $k'/k_0 \ll 1$ を使ってきた。ここではさらに、 $E/E_g \ll 1$ が成り立つ場合を考えよう。式(11)および(12)は次のように近似できる。

$$k' \simeq \frac{\sqrt{2m^* E'}}{\hbar} \quad \therefore \quad E' \simeq \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} \quad (24)$$

分散関係は放物線特性になる。バンド内状態の確率流密度は式(15)より次になる。

$$j = \frac{|C|^2}{a} \sqrt{\frac{2E'}{m^*}} = \frac{|C|^2}{a} \frac{\hbar k'}{m^*} \quad (25)$$

質量が有効質量に置き換わり $\exp(ik'z)$ で表される自由電子の確率流になっている。

境界条件 (バンド内状態とギャップ内状態) は、 $\psi = 0$ とし、以下の近似を用いる。

$$F \simeq 4 \frac{E'}{E_g} \quad B = \sqrt{F+1} - \sqrt{F} \simeq 1 - \sqrt{F} \quad \therefore P_i \equiv \frac{1+B_i}{\sqrt{1+|B_i|^2}} \simeq \sqrt{2}$$

$$1-B \simeq \sqrt{F} \simeq 2 \sqrt{\frac{E'}{E_g}} \quad \therefore Q_i \equiv \frac{1-B_i}{\sqrt{1+|B_i|^2}} \simeq \frac{1-B_i}{\sqrt{2}} \simeq \sqrt{2} \sqrt{\frac{E'}{E_{gi}}} \simeq \sqrt{\frac{1}{E_{gi}} \frac{(\hbar k'_i)^2}{m_i^*}} = \frac{mk'_i}{\sqrt{2}m_i^*k_0}$$

このとき、 P_i が全層共通の定数になり、 Q_i が各層の波数 k_i に比例する。この結果、式(17)で $\psi = 0$ の場合の式に代入すると境界条件は次になる。

$$C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) + D_i \exp(-ik'_i z_{i+1}) = C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) + D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1}) \quad (26)$$

$$\frac{k'_i}{m_i^*} (C_i \exp(ik'_i z_{i+1}) - D_i \exp(-ik'_i z_{i+1})) = \frac{k'_{i+1}}{m_{i+1}^*} (C_{i+1} \exp(ik'_{i+1} z_{i+1}) - D_{i+1} \exp(-ik'_{i+1} z_{i+1}))$$

式(26)が意味することは：

$$\phi(z) \equiv C \exp(ik'z) + D \exp(-ik'z) \quad (27)$$

と関数を定義すると、境界で ϕ と $(1/m^*) d\phi/dz$ が連続、である。すなわち

『二つの周期構造界面で ψ および $d\psi/dz$ が連続であるためには、 ϕ と $(1/m^*) d\phi/dz$ が連続であればよい。ただし ϕ は波動関数 ψ から w 関数を除去した関数である』

バンド内状態に対して単位格子内平均確率密度および確率流密度は次のようになる。

$$\langle |\psi(z)|^2 \rangle = |\phi(z)|^2 \quad \text{および} \quad \text{Re} \left[\psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d\psi}{dz} \right] = \text{Re} \left[\phi^* \frac{\hbar}{im^*} \frac{d\phi}{dz} \right]$$

関数を電子の波動関数とみなし、質量 m を有効質量 m^* に置き換えて、量子力学標準の確率密度分布および確率密度流の式を適用することによって、1周期内の平均確率密度、確率流密度を計算できる。放物線近似が使える場合には ϕ 関数を結晶中の電子の波動関数と呼び、プロッホ形波動関数は露わに用いることなく解析できる。

放物線近似が妥当な範囲は狭い。しかし後から述べるように、有効質量に非放物線性を取り込むことで適用範囲を大きく拡大できる。

9.4 有効質量近似方程式

放物線近似の下での境界条件を表現するために定義した式(27)の関数 ϕ について考える。この関数 ϕ はどんな方程式の解になっているのか？有効質量およびバンド底エネルギーが一定の空間では $\exp(ik'z)$ および $\exp(-ik'z)$ 、ただし $k' = \sqrt{2m^*(E - E_c)}/\hbar$ が一般解であって $\text{Im}\left[\phi^* \left(\hbar/m^*\right) d\phi/dz\right]$ で与えられる確率流密度が至るところ連続であるような関数 ϕ はどんな微分方程式の解として得られるのか・・・と探すと次の方程式が見つかる。

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*} \frac{d\phi}{dz} \right) + E_c(z)\phi = E\phi \quad (28)$$

以下の通り確率流密度の発散は零になる。

$$\frac{d}{dz} \left[\text{Im} \left[\phi^* \left(\hbar/m^* \right) d\phi/dz \right] \right] = \text{Im} \left[\frac{d\phi^*}{dz} \frac{\hbar}{m^*} \frac{d\phi}{dz} + \hbar\phi^* \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*} \frac{d\phi}{dz} \right) \right] = \text{Im} \left[\frac{\hbar}{m^*} \left| \frac{d\phi}{dz} \right|^2 - \frac{2}{\hbar} (E - E_c(z)) |\phi|^2 \right] = 0$$

方程式(28)を満たす関数 ϕ を用いると、プロッホ関数で表される結晶内波動関数を用いて得るのと同じ単位格子内平均確率密度および確率流密度が得られる。したがって式(28)をナノ構造中の電子の振る舞いを調べるのに用いることができ、これを有効質量(近似)方程式と呼ぶ。

有効質量方程式の別の導き方として、結晶中の電子は放物線近似が成り立つ範囲で、確率密度および確率流密度に関して、有効質量 m^* をもつ自由電子と見なすことができる。そこで自由電子に対するシュレーディンガー方程式において質量を有効質量に換えた式、ただし有効質量が空間的に変化する場合には $(1/m^*)d^2\phi/dz^2$ ではなくて $d/dz(\hbar/m^*)d\phi/dz$ とした式 (28) を支配する方程式である、として導き出すこともできる。

1次元有効質量方程式の拡張として次の3次元有効質量方程式を得る。

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \nabla \phi(\mathbf{r}) \right) + E_c(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}) \quad (29)$$

1次元有効質量近似方程式もまた行列法で解析することができる。すなわち

$$k'_j = \frac{\sqrt{2m_j^*(E - E_{c_j})}}{\hbar}, \quad G_j = \begin{pmatrix} \cos(k'_j d_j) & \frac{m_j^*}{k'_j} \sin(k'_j d_j) \\ -\frac{k'_j}{m_j^*} \sin(k'_j d_j) & \cos(k'_j d_j) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = G_{N+1} G_N \cdots G_3 G_2 \quad \begin{pmatrix} \phi(z_{N+1}) \\ \frac{1}{m_{N+1}^*} \frac{d\phi}{dz} \Big|_{z_{N+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(z_2) \\ \frac{1}{m_1^*} \frac{d\phi}{dz} \Big|_{z_2} \end{pmatrix}$$

$$\phi(z_{N+1}) = t \exp(ik'_{N+1} z_{N+1}) \quad \phi(z_2) = \exp(ik'_1 z_2) + r \exp(-ik'_1 z_2)$$

$$r = -\exp(i2k'_1 z_2) \frac{\frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} M_{11} + iM_{12} \frac{k'_1}{m_1} \frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} + iM_{21} - M_{22} \frac{k'_1}{m^*_1}}{\frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m_1} \frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m^*_1}}$$

$$t = 2 \frac{k'_1}{m^*_1} \exp(ik'_1 z_2 - ik'_{N+1} z_{N+1}) \frac{1}{\frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m_1} \frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m^*_1}}$$

反射確率： $R = |r|^2$

透過確率： $T = |t|^2 \frac{k'_{N+1}}{k'_1} \frac{m^*_1}{m^*_{N+1}} = \frac{4 \frac{k'_1}{m^*_1} \frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}}}{\left| \frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m_1} \frac{k'_{N+1}}{m^*_{N+1}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m^*_1} \right|^2}$ **(30)**

9.5 非放物線特性を取り入れた有効質量近似方程式

分散関係を放物線特性で近似できる範囲は狭い。しかし有効質量近似方程式は単純で見通しがよい。ところで $k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* \left(1 + \frac{E'}{E_g}\right) E'}$ (式(11)) から次の非放物線補正を加えた有効質量 m^{**} (エムダブルスター) が示唆される。

$$m^{**}(E') = m^* \left(1 + \frac{E'}{E_g}\right) \quad (31)$$

そこで経験的手法として有効質量方程式(28)に含まれる有効質量 m^* を、有効質量 m^{**} (エムダブルスター) に置き換えた次の有効質量近似方程式の使用を検討する。使用した結果の妥当性は9.7で検証する。

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^{**}} \frac{d\phi}{dz} \right) + E_C(z) \phi = E\phi,$$

1次元有効質量近似方程式に基づく行列解析は、9.4の行列定式化において、すべての m^* を m^{**} に置き換えた以下の式で行う。

$$k'_j = \frac{\sqrt{2m^{**}_j(E - E_{Cj})}}{\hbar} \quad G_j = \begin{pmatrix} \cos(k'_j d_j) & \frac{m^{**}_j}{k'_j} \sin(k'_j d_j) \\ -\frac{k'_j}{m^{**}_j} \sin(k'_j d_j) & \cos(k'_j d_j) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = G_{N+1} G_N \cdots G_3 G_2$$

$$r = -\exp(i2k'_1 z_2) \frac{\frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} M_{11} + iM_{12} \frac{k'_1}{m^{**}_1} \frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} + iM_{21} - M_{22} \frac{k'_1}{m^{**}_1}}{\frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m^{**}_1} \frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m^{**}_1}}$$

$$t = 2 \frac{k'_1}{m^{**}_1} \exp(ik'_1 z_2 - ik'_{N+1} z_{N+1}) \frac{1}{\frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m^{**}_1} \frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m^{**}_1}}$$

反射確率: $R = |r|^2$

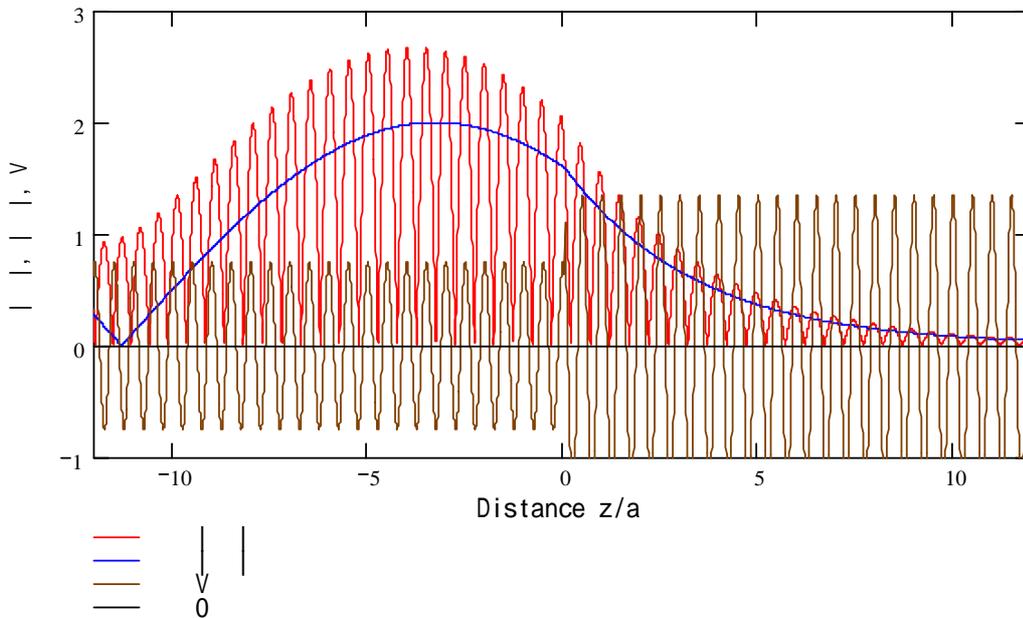
$$\text{透過確率: } T = 4 \frac{k'_1}{m^{**}_1} \frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} \frac{1}{\left| \frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m^{**}_1} \frac{k'_{N+1}}{m^{**}_{N+1}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m^{**}_1} \right|^2} \quad (32)$$

9.6 ヘテロ接合境界でのブロッホ関数接続の様子

ブロッホ関数 および有効質量方程式解 が境界でどのように繋がるか見てみよう。

$z := -80, -79.97..80$

$E := 0.1 \quad z_2 := 0.3$



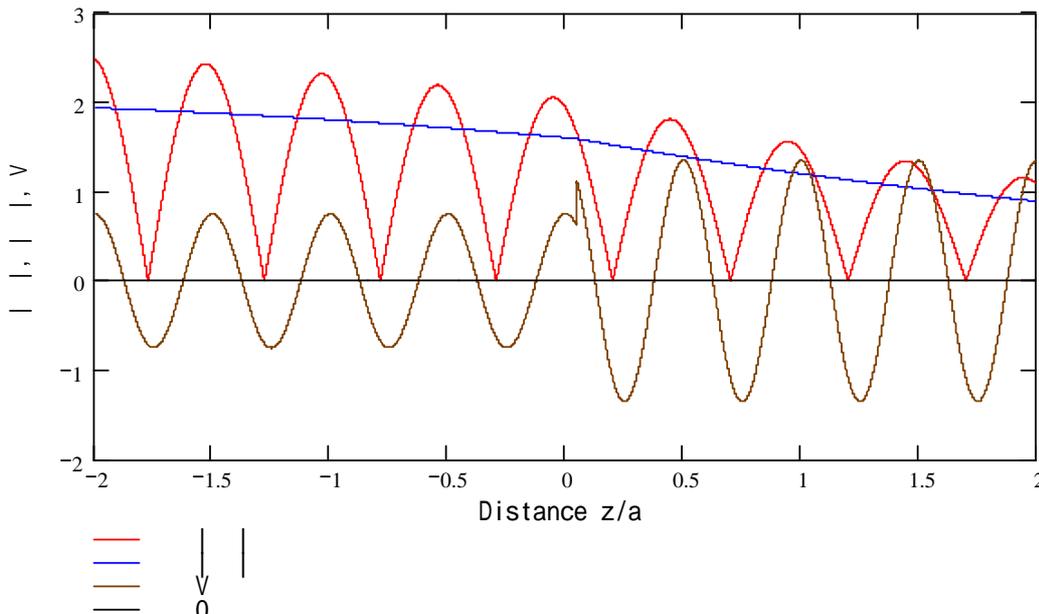
$$E_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.23 \end{pmatrix}$$

$$E_g = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.75 \\ 1.35 \end{pmatrix}$$

$$mstr = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.04 \\ 0.08 \end{pmatrix}$$

$z := -4 \cdot \pi, -4 \cdot \pi \cdot 0.9997..4 \cdot \pi$

$E = 0.1 \quad z_2 = 0.3$



境界 z_2 での各関数の様子を図示した。| ψ | はブロッホ関数の絶対値。はなめらかに連続である。は z_2 に依存はするが、変化は僅かである (Mathcad ライブ。 z_2 を変えて変化を見よ)。一方、| u | は有効質量方程式解の絶対値。は連続だが、滑らかではなく、折れ曲がる。これは有効質量の違いによる。ポテンシャルの飛びは E_c による。

9.7 結合波近似解析、有効質量近似方程式解析（放物線、非放物線性補正）比較

二重バリア構造(GaInAs/InP/GaInAs/InP/GaInAs 構造、2/5/4nm、 $E_c=0.23\text{eV}$)の透過確率特性を例にとって、結合波近似解析と有効質量近似方程式に基づく解析（放物線近似解析、非放物線性を取り込んだ解析）の数値解析結果を比較する。

結合波理論による行列解析に用いる式

$$E'_j = E - E_{c_j}$$

$$k'_j = \sqrt{\frac{2m_j^* E'_j}{\hbar^2} \left(1 + \frac{E'_j}{E_{g_j}}\right)} \quad F_j = 4 \frac{E'_j}{E_{g_j}} \left(1 + \frac{E'_j}{E_{g_j}}\right) \quad B_j = \sqrt{F_j + 1} - \sqrt{F_j}$$

$$P_i^{(1)} \equiv \frac{\exp(i\theta) + B_i}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} \quad Q_i^{(1)} \equiv \frac{\exp(i\theta) - B_i}{\sqrt{1 + |B_i|^2}}$$

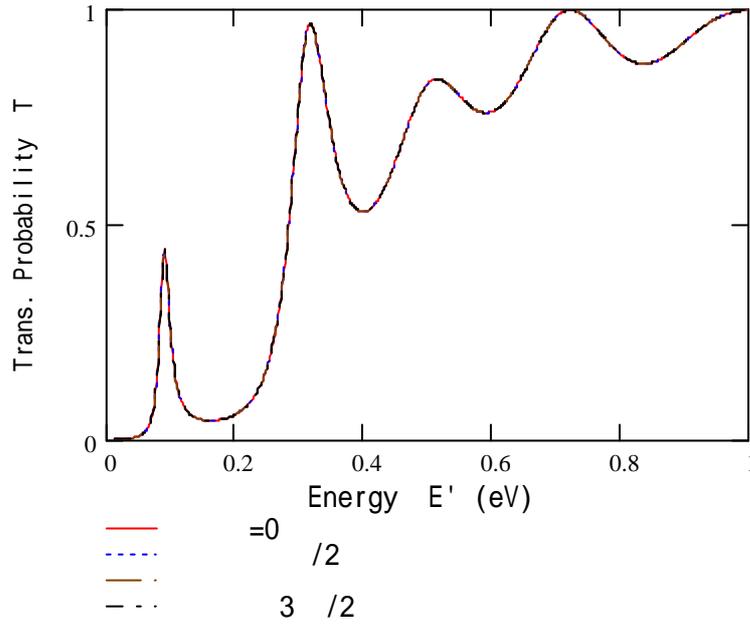
$$P_i^{(2)} \equiv \frac{1 + B_i \exp(i\theta)}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} \quad Q_i^{(2)} \equiv \frac{1 - B_i \exp(i\theta)}{\sqrt{1 + |B_i|^2}}$$

$$G_j = \begin{pmatrix} \frac{P_i^{(1)} Q_i^{(2)} \exp(ik'_i d_i) + P_i^{(2)} Q_i^{(1)} \exp(-ik'_i d_i)}{P_i^{(1)} Q_i^{(2)} + Q_i^{(1)} P_i^{(2)}} & i \frac{2P_i^{(1)} P_i^{(2)} \sin k'_i d_i}{P_i^{(1)} Q_i^{(2)} + Q_i^{(1)} P_i^{(2)}} \\ \frac{i2Q_i^{(1)} Q_i^{(2)} \sin k'_i d_i}{P_i^{(1)} Q_i^{(2)} + Q_i^{(1)} P_i^{(2)}} & \frac{P_i^{(2)} Q_i^{(1)} \exp(ik'_i d_i) + P_i^{(1)} Q_i^{(2)} \exp(-ik'_i d_i)}{P_i^{(1)} Q_i^{(2)} + Q_i^{(1)} P_i^{(2)}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = G_{N+1} G_N \cdots G_3 G_2$$

$$T = \frac{1 + B_1^2}{1 - B_1^2} \frac{1 - B_{N+1}^2}{1 + B_{N+1}^2} \left| \frac{(P_i^{(2)} Q_i^{(1)} + P_i^{(1)} Q_i^{(2)}) M_{11} M_{22} - (P_i^{(1)} Q_i^{(2)} + P_i^{(2)} Q_i^{(1)}) M_{12} M_{21}}{M_{11} P_i^{(2)} Q_i^{(1)} - M_{12} Q_i^{(2)} Q_i^{(1)} - M_{21} P_i^{(2)} P_i^{(1)} + M_{22} P_i^{(1)} Q_i^{(2)}} \right|^2$$

$E := 0.01, 0.0113, .1$



領域境界の微視的位置を表す位相パラメータ θ には依存しないことが分かる。9.6 でヘテロ接合境界付近のプロッホ関数の様子を観察して確認したとおりである。そこで結合波理論による以下の解析では $\theta = 0$ の場合だけを示す。

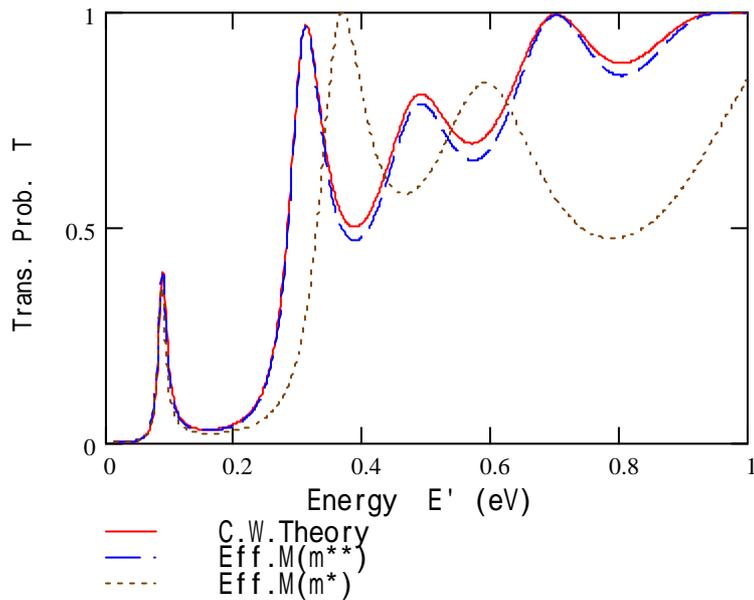
1次元有効質量近似方程式に基づく行列解析に用いる式

$$m_{j}^{**}(E_j) = m_j^* \left(1 + \frac{E_j}{E_{gj}} sw \right) \quad sw=0 : \text{放物線近似} \quad sw=1 : \text{非放物線性考慮}$$

$$k_j = \frac{\sqrt{2m_{j}^{**}(E - Ec_j)}}{\hbar} \quad G_j = \begin{pmatrix} \cos(k'_j d_j) & \frac{m_{j}^{**}}{k'_j} \sin(k'_j d_j) \\ -\frac{k'_j}{m_{j}^{**}} \sin(k'_j d_j) & \cos(k'_j d_j) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = G_{N+1} G_N \cdots G_3 G_2$$

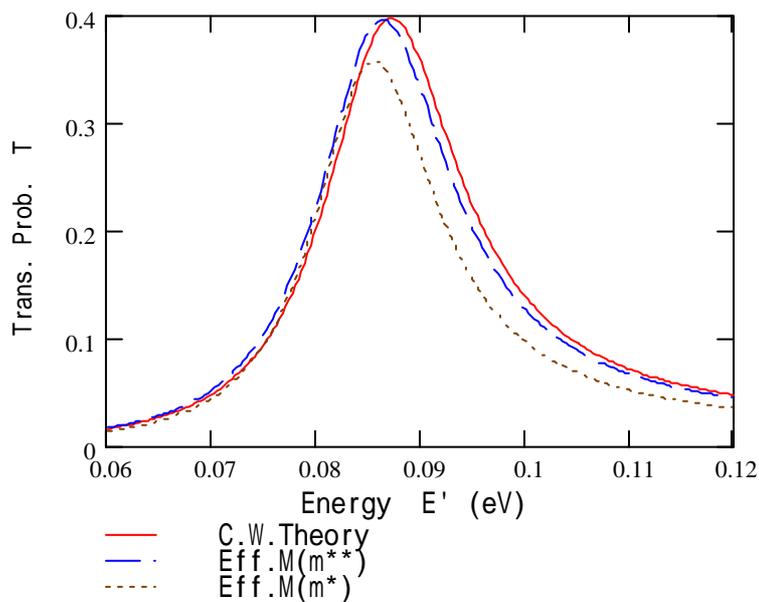
$$T = \frac{4 \frac{k'_1}{m_{1}^{**}} \frac{k'_{N+1}}{m_{N+1}^{**}}}{\left| \frac{k'_{N+1}}{m_{N+1}^{**}} M_{11} - iM_{12} \frac{k'_1}{m_{1}^{**}} \frac{k'_{N+1}}{m_{N+1}^{**}} + iM_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m_{1}^{**}} \right|^2}$$



$$E_g = \begin{pmatrix} 0.75 \\ 1.35 \\ 0.75 \\ 1.35 \\ 0.75 \end{pmatrix}$$

$$mstr = \begin{pmatrix} 0.04 \\ 0.08 \\ 0.04 \\ 0.08 \\ 0.04 \end{pmatrix}$$

E := 0.06, 0.0603, 0.12



$$d = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \times 10^{-9} \\ 5 \times 10^{-9} \\ 4 \times 10^{-9} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.23 \\ 0 \\ 0.23 \\ 0 \end{pmatrix}$$

実線が結合波近似理論、破線は非放物線性を考慮した (m^* を用いた) 有効質量方程式解析、そして点線は有効質量方程式の解析結果である。二重バリアおよびそれ以外の領域の有効質量 / 質量比、ギャップエネルギー、伝導帯底エネルギーは、それぞれ 0.08 と 0.04、1.35 と 0.75eV、0 と 0.23eV である。各層厚は図示のとおり。

放物線近似以外は互いによく一致する。非放物線性補正を施した有効質量を用いることで、結合波理論に近い結果を広い範囲で得られる。しかし m^* を用いても有効質量方程式解は結合波理論と完全には一致しない。

結合波理論、そして有効質量方程式解析法はいずれも近似理論である。また周期構造とは、本来、無限に広がった構造である。それに対してナノ構造は結晶格子の周期ポテンシャルを断ち切ったり、異なる結晶格子をつなぎ合わせたりして構成される。周期構造の理論であるブロッホ関数を基礎としてナノ構造の波動関数を表すことについて、どれだけ適切なものか、どれだけ厳密なものかは検証が必要かもしれない。個々の原子すべてを直接扱って波動関数を解析する第一原理計算によって精度判定する必要があるだろう。

しかしナノ構造中の電子現象について直感や洞察を効かせるために、定量的精度を犠牲にしても、定性的に妥当で見通しのよい近似解析を行う価値は高い。非放物線性を取り込んだ有効質量方程式による解析はこのような用途に適する。

魅力あるヘテロナノ構造デバイス概念を有効質量近似解析を用いて創り出した後で、詳細な定量的性能評価を第一原理計算で行うことは至極適切である。

ここで真空中と結晶中の電子の波動関数、分散関係、確率流密度をまとめよう。

真空中の電子

$$\psi = \exp(ikz) \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad j = \frac{1}{L} \frac{\hbar k}{m}$$

結晶中の電子（放物線近似）

$$\psi = u_k(z) \exp(ikz) \quad u_k(z) = \frac{1}{\sqrt{(1+|B|^2)a}} (1 + B \exp(-i2k_0 z)) \quad B \simeq 1 - 2 \sqrt{\frac{E'}{E_g}}$$

$$k \simeq k_0 + k' \quad k' = \frac{\sqrt{2m^* E'}}{\hbar} \quad j = \frac{1}{a} \frac{\hbar k_0}{m} \frac{1-B^2}{1+B^2} \simeq \frac{1}{a} \frac{\hbar k'}{m^*}$$

結晶中では分散関係は、一般には、非放物線特性となり真空中電子とは異なる。しかし限られた範囲では放物線近似が成り立つ。放物線近似が成り立つ範囲では、分散関係、確率流密度は真空中の式で質量を有効質量に置き換えた形となり真空中の電子と同じように結晶中を波動として伝搬する。有効質量に非放物線性補正を加えることでこの波動伝搬描像をより広い範囲まで適用できる。

10 . 半導体中の非熱平衡電子波伝搬実証

量子効果デバイスに重要な半導体中での非熱平衡電子の波動伝搬を実証した研究成果を以下で紹介する。

二重スリット構造による電子波干渉パターン測定干渉縞観測の方法を図 1 (a) に示す。まず電子はエミッタから平面波として放射され、二重スリットを通過し、細い電極を配置したコレクタ面に到達する。二重スリットによりコレクタ面上の波動関数 $\psi(x)$ には干渉縞が現れる。位置 x にある微細コレクタ電極が電子を捕捉する確率は $|\psi(x)|^2$ に比例することから、複数の微細電極の電流測定から $|\psi(x)|^2$ の分布を測定し干渉縞を見ることができる。もう一つの方法として、図示の磁束密度 B によるローレンツ力で電子の行路を曲げて干渉縞全体を x 軸方向に平行移動させ、一つの微細電極電流 I_c の B 依存性から $|\psi(x)|^2$ の分布すなわち干渉縞を見ることができ、今回はこちらの方法を採用した。

ホットエレクトロン生成と伝搬を図 1 に示す。図 1(a) の網掛け部は不純物半導体で熱平衡電子が存在し導電層である。エミッタとベースの導電層間に薄いポテンシャルバリア層があり、電圧 V_{EB} が印加されると電子はこのバリア層をトンネル効果で透過し、図 1(b) に示した電子伝搬方向に急激に加速される。この急加速された電子は熱平衡状態から大きく外れたホットエレクトロンとなり、緩和時間だけ無衝突で高速走行する。

ホットエレクトロンのエネルギー E と半導体の伝導帯底エネルギー E_c との関係を図 1(b) に示す。 E は、ベース電極層でフェルミレベルより 50meV 以上高く、二重スリットバリア層ではバリアの頂上から 50meV ほど低く、伝搬層では伝導帯底より 50meV 以上高い。二重スリットバリア層は十分に厚くトンネル透過はほとんど生じない。

干渉縞が明瞭に見えるよう二点を考慮した³⁾。第一点として、干渉縞周期に比べて観測用微細電極周期を十分に小さくするために、電子波長 λ 、スリット間隔 d 、微細コレクタ電極周期 T 、伝搬距離 L に対して $dT \leq \lambda L/2$ とした。伝搬距離は電子が位相破壊を受けずに走行できる距離、位相コヒーレント長、より短くなければならない。そこで $\lambda=20\text{nm}$ (電子エネルギー 100meV に対応)、 $L=200\text{nm}$ 、 $d=25\text{nm}$ および $T=80\text{nm}$ とした。

第二点として、二重スリットバリアに垂直入射した平面波が作る干渉縞と、斜め入射した波の干渉縞とが互いに打ち消し合わないように入射角広がりを制限した。このために図 1(b) に示すようにエミッタ半導体のフェルミレベルと伝導帯底エネルギーとの差 $E_F - E_c$ を小さな値、6meV、にし、図 1(a) に示すように傾斜組成層を挿入して V_{EB} が印加された状態でエミッタ・ベース間バリアのエミッタ側に電子が蓄積しないようにした。

試料は図 1(a) に示すように InP、GaInAs および GaInAsP のヘテロ接合層構造をもち、全体が同じ格子定数をもつ単結晶からなる。これを、有機金属気相成長、埋込結晶成長、二重スリットと微細コレクタ電極との 10nm オーダーでの位置合わせ、電子ビームおよび光リソグラフィ、化学エッチング、ドライエッチング、電子銃蒸着、リフトオフ、の各ブ

ロセスを実施して作製した。電子ビームおよび光リソグラフィはそれぞれ 11 および 3 回行った。スリット幅 12nm、二重スリット中心間隔 25nm、コレクタ電極幅 40nm、間隔 40nm という超微細構造をもつ試料を作製した。

印加磁束密度 B に対する中央コレクタ電流 I_c の変化を測定した(図 2)。エミッタ・ベース端子間電圧 V_{EB} を 160mV に固定し、液体ヘリウムに浸して温度を 4.2K とし、超伝導磁石を用いた。各磁束密度で 7 回測定し中央値をプロットした。挿入図に全データを示す。

図 2 の実線は量子ビーム伝搬法で求めた二重スリット干渉縞の理論曲線である。磁界変調特性は干渉縞の理論とよく一致している。電流値および磁界変調振幅について検討した結果、電子がエミッタから放射された後、途中で位相破壊を受けずにコレクタ電極に到達する確率について、実験では 0.7%であり、これはベース層中の電子電子散乱、伝搬層中の縦光学 (LO) フォノン散乱を考慮して見積もった理論値と 3 倍以内で一致する。

参考文献

1. K. Furuya, Y. Ninomiya, N. Machida and Y. Miyamoto, Phys. Rev. Lett. 91, 216803-1 (2003)
K. Furuya, Y. Ninomiya, N. Machida and Y. Miyamoto, Jpn. J. Appl. Phys., 44, 2936 (2005)
2. H. Hongo et al., Jpn. J. Appl. Phys. 33, 925(1994),
および H. Hongo, Y. Miyamoto, M. Gault and K. Furuya, J. Appl. Phys. 82, 3846(1997).
3. K. Furuya, J. Appl. Phys. 62, 1492(1987), J. Crystal Growth 98, 234(1989),
および Jpn. J. Appl. Phys. 30, 82(1991).

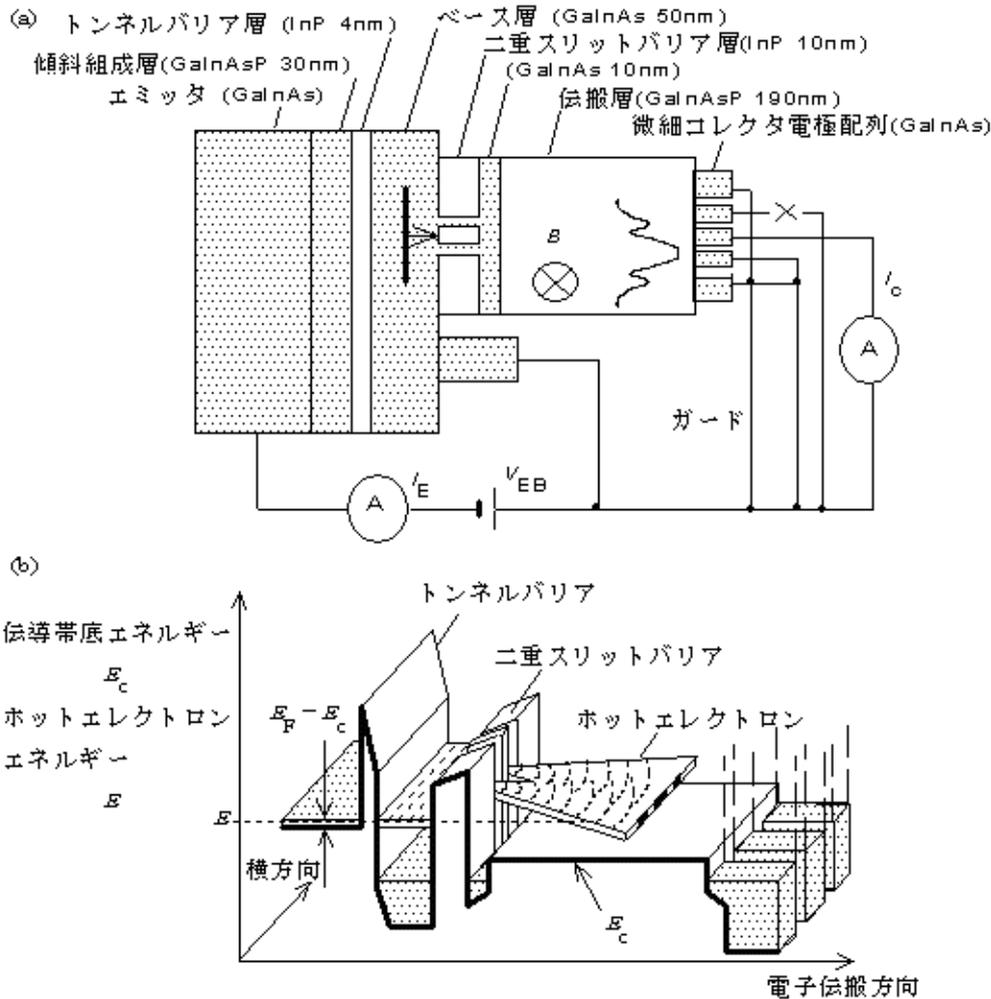


図1 ホットエレクトロンの二重スリット干渉を観測したデバイス構造
 (a)は化合物半導体ヘテロ接合層構造の断面模式図で、紙面に垂直方向には $2\mu\text{m}$ にわたり均一構造をもつ。電圧 V_{EB} がかかるエミッタ・ベース間バリアをトンネル効果で通過した電子が平面波として二重スリット層に入射し、スリットを通過した電子の波動関数に干渉縞が現れる。磁束密度 B により干渉縞は微細電極上を掃引される。(b)はヘテロ接合層構造における伝導帯底エネルギーの空間分布とホットエレクトロンのエネルギーを示す。太線はバンドプロファイルである。

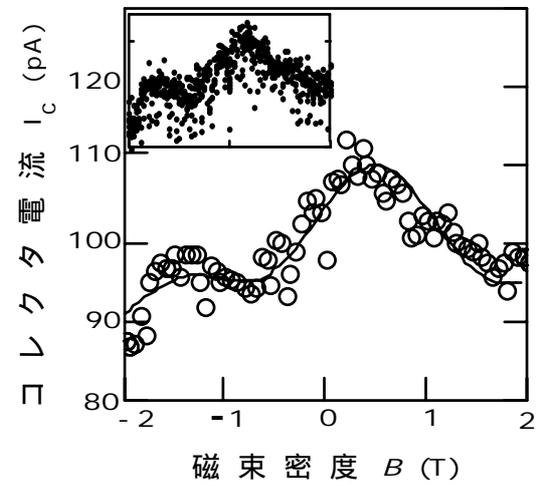


図2 印加磁束密度に対するコレクタ電流の変調特性
 温度 4.2K 、ベースエミッタ間電圧 160mV で測定した。各磁束密度で7回測定し、それらの中央値をプロットした。挿入図は全データを示す。実線は二重スリットを通過した電子波に磁界が加わった時のコレクタ電流を量子ビーム伝搬法を用いて理論的に求めたものである。