

8. 結合波理論による近似解析

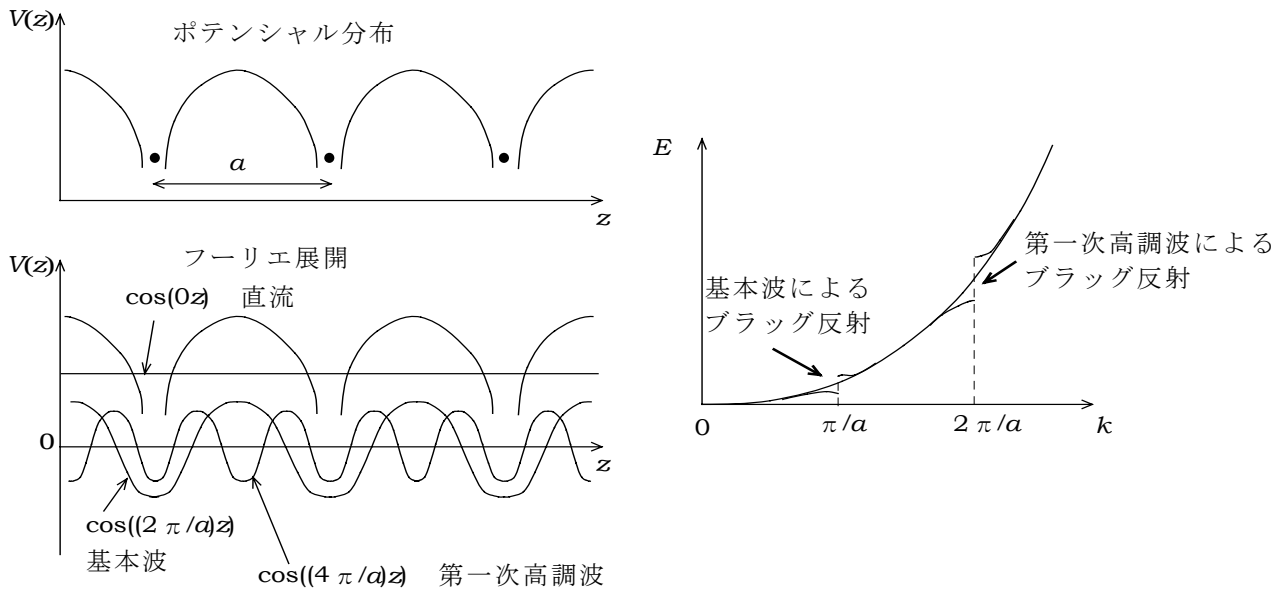
8. 1 ブラッグ反射係数によるブロッホ関数表現

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 ϕ_1 と ϕ_2 との重ね合わせで与えられる。

$$\psi_1(z) = \left(\exp(ik_0 z) + \frac{a - k'}{b} \exp(-ik_0 z) \right) \exp(ik'z) = u_1(z) \exp(ikz)$$

$$\text{where} \quad u_1(z) \equiv 1 + \frac{a - k'}{b} \exp(-i2k_0 z) \quad k \equiv k_0 + k'$$

$$\psi_2(z) = \left(\exp(ik_0 z) + \frac{a + k'}{b} \exp(-ik_0 z) \right) \exp(-ik'z) = u_2(z) \exp(-ikz)$$

$$\text{where} \quad u_2(z) \equiv \exp(i2k_0 z) + \frac{a + k'}{b}$$

$2k_0 a = 2 \frac{2\pi}{\lambda_B} a = 2 \frac{2\pi}{2a/n} a = 2\pi n$ 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 ϕ_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

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

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 $E' \rightarrow 0$ 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、

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

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 Å と計算され、InP の実際の格

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

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。

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

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

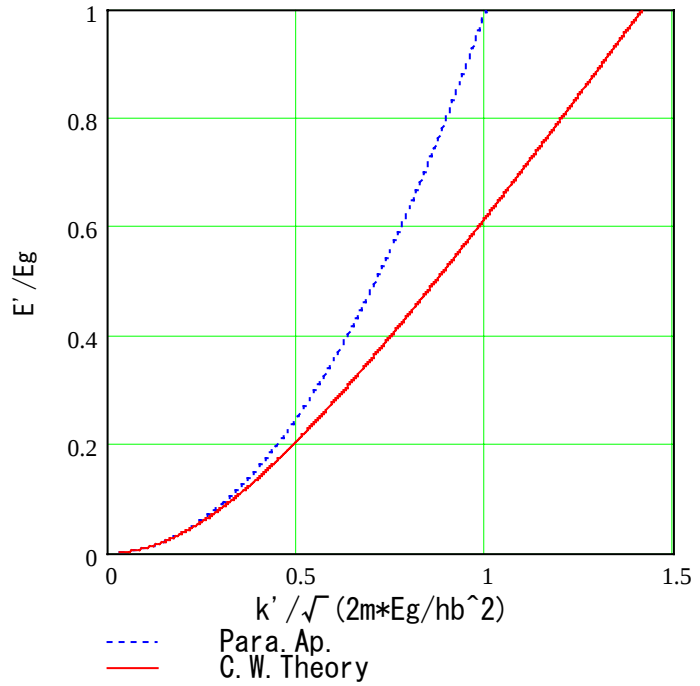
これらより次の関係が成り立つ。

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

8. 3 分散関係

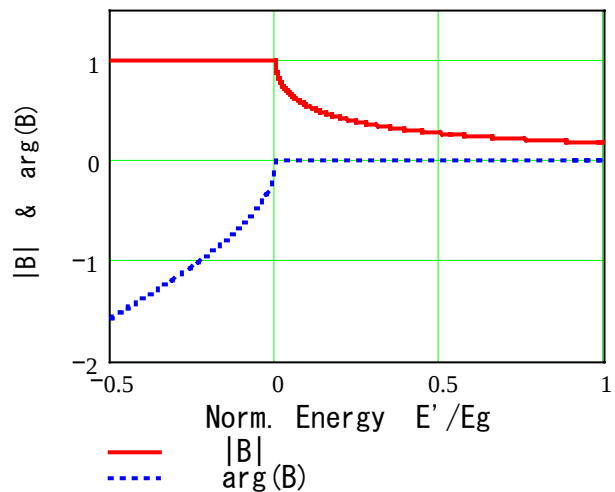
周期ポテンシャルに対応する分散特性 (E' - k 関係、式(11))を図に示す。実線は結合波理論、破線は $E' \rightarrow 0$ の極限で成り立つ近似、放物線近似、である。これより放物線近似が妥当なのは、バンド底から測った電子エネルギーがギャップエネルギーの1/10 程度までである。例えば、GaInAs ($E_g=0.75\text{eV}$) では75meV程度までである。

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、バンド内での正值まで変化すると、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。

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

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、

$$\begin{aligned} \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d\psi}{dz} &= \frac{\hbar}{m} \frac{|C|^2}{(1+B^2)a} (k_0 + k' - (k_0 - k')B^2 + 2k'B \cos(2k_0 z) + i2k_0 B \sin(2k_0 z)) \\ &\simeq \frac{\hbar}{m} \frac{|C|^2}{(1+B^2)a} (k_0 - k_0 B^2 + i2k_0 B \sin(2k_0 z)) \end{aligned}$$

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

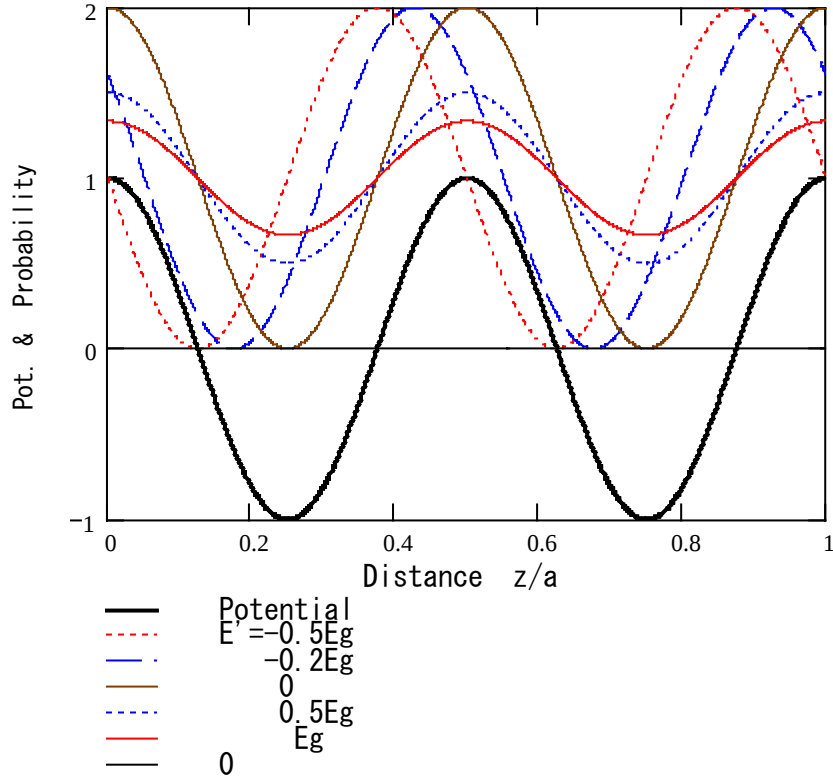
ネルギー E を0から正に増加させるとブラッグ反射係数 B は1から1以下の値に減少する。確率流は0から正の値に増加し、電子が動き始める。式(15)は、定在波を構成している前進波と後進波の振幅バランスが崩れる (振幅比 B が1以下になる) ことにより電子の流れが生じることを表現している。電子の確率流密度 j を電子の存在確率密度 p で割ると電子

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。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 $\Phi(z, t=0)$ 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 $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ 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持ち、また位置は $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ 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、 δ 関数 $\delta(x) = \lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin(gx)}{\pi x}$ を使い、 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うち切り、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

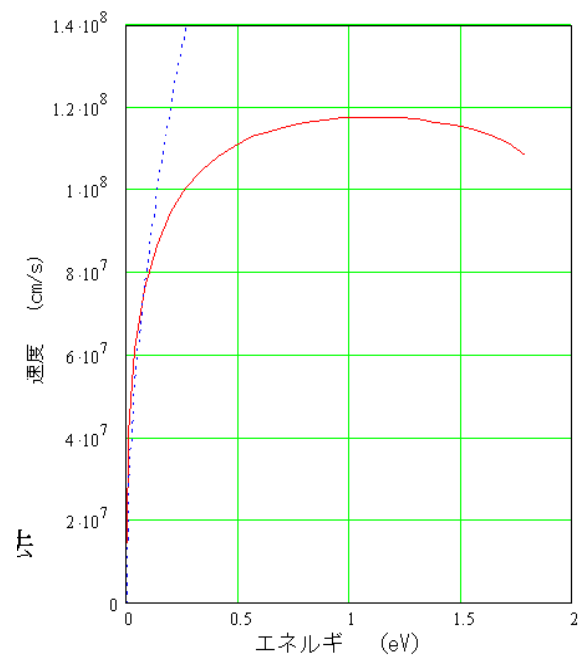
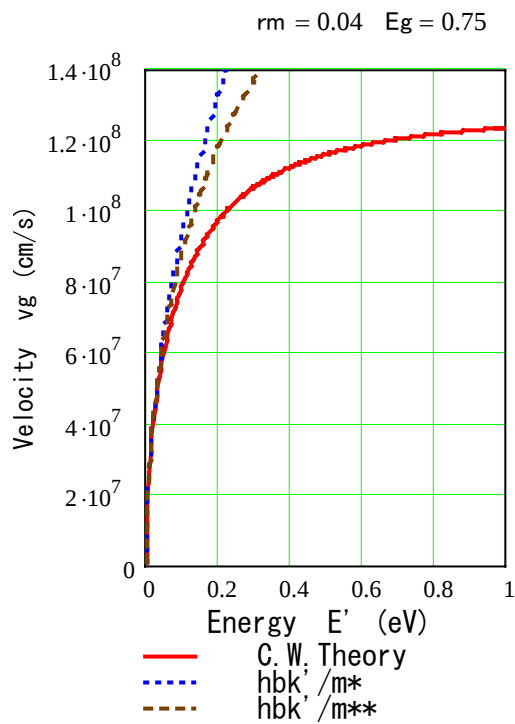
なり時間とともに広がる (分散関係が異なる電磁波の場合と対照的)。

群速度は式(11)を用いて次式で与えられる。

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

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

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、 0.62eV ($= \Delta E_{\text{TL}}$) 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

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したが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。