

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 Ψ が連続、微係数 $d\Psi/dz$ 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 θ 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 θ の選び方にはほとんど依存しない。
 $\theta = 0$ 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ブ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。

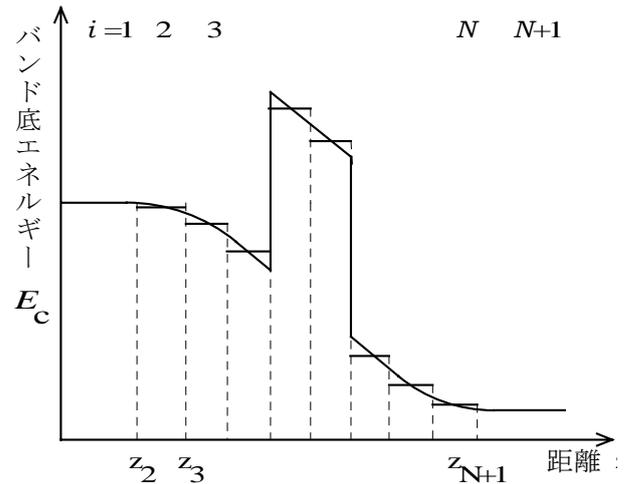
9. 2 ヘテロナノ構造中電子の行列解析

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。

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

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 $E_c(z)$ があるとし、 $z < z_2$ 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。

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

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、 $\theta=0$ とし、以下の近似を用いる。

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

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

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 $\theta=0$ 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。

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

ϕ 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、ブ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、ブ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 $d/dz(\hbar/m^*)d\phi/dz$ とした式が ϕ 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： $R = |r|^2$

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

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。

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

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

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

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

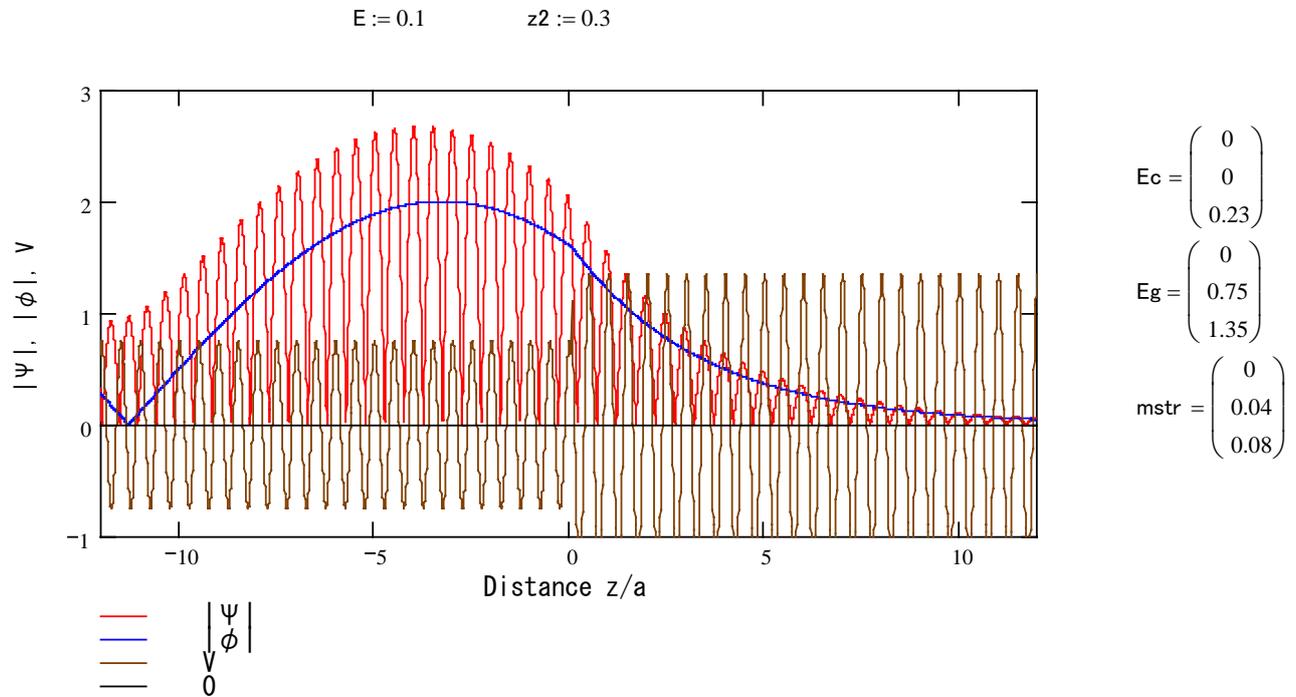
反射確率： $R = |r|^2$

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

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 Ψ および有効質量方程式解 ϕ が境界でどのように繋がるか見てみよう。

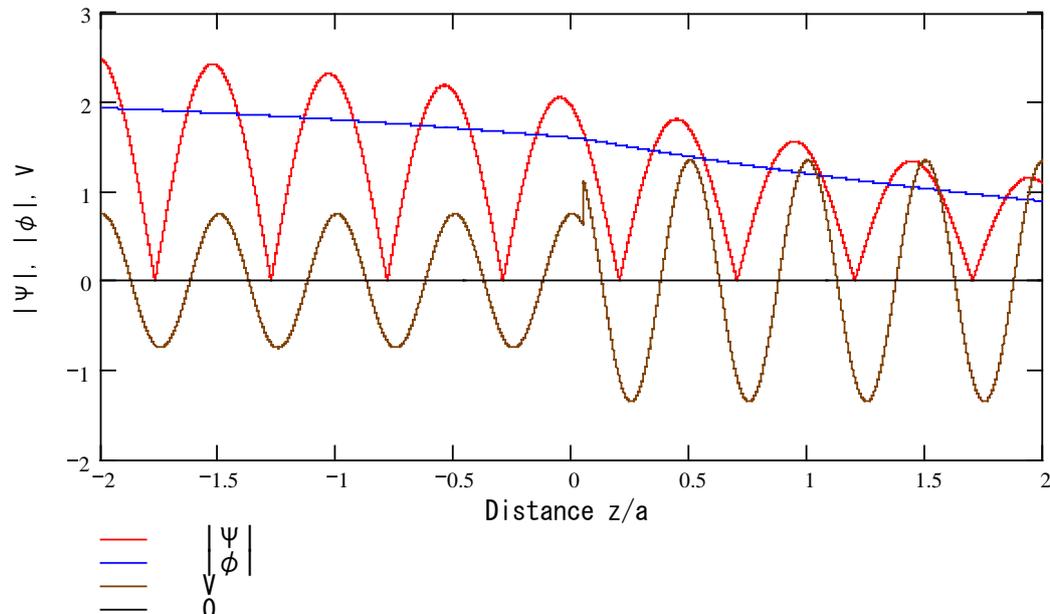
$z := -80, -79.97..80$



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

$E = 0.1$

$z_2 = 0.3$



境界 z_2 での各関数の様子を図示した。 $|\Psi|$ はブロッホ関数の絶対値。 Ψ はなめらかに連続である。 Ψ 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、 $|\phi|$ は有効質量方程式解の絶対値。 ϕ 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 ΔE_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、 $\Delta E_c=0.23\text{eV}$)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

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

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

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

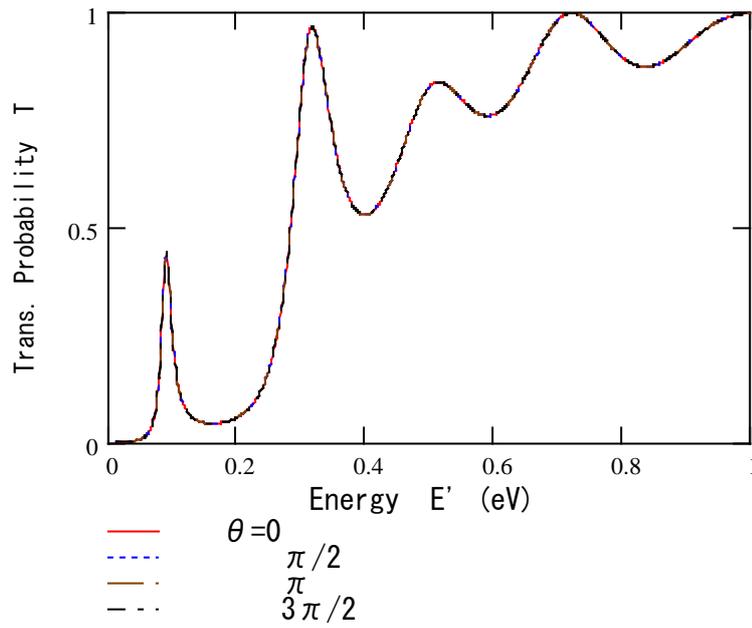
$$P_i^{(2)} \equiv \frac{1 + B_i \exp(i\theta)}{\sqrt{1 + |B_i|^2}} \quad Q_i^{(2)} \equiv \frac{1 - B_i \exp(i\theta)}{\sqrt{1 + |B_i|^2}}$$

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

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

$$T = \frac{1 + B_1^2}{1 - B_1^2} \frac{1 - B_{N+1}^2}{1 + B_{N+1}^2} \left| \frac{(P^{(2)}_1 Q^{(1)}_1 + P^{(1)}_1 Q^{(2)}_1) M_{11} M_{22} - (P^{(1)}_1 Q^{(2)}_1 + P^{(2)}_1 Q^{(1)}_1) M_{12} M_{21}}{M_{11} P^{(2)}_1 Q^{(1)}_{N+1} - M_{12} Q^{(2)}_1 Q^{(1)}_{N+1} - M_{21} P^{(2)}_1 P^{(1)}_{N+1} + M_{22} P^{(1)}_{N+1} Q^{(2)}_1} \right|^2$$

$E := 0.01, 0.0113, 1$



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ブ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。

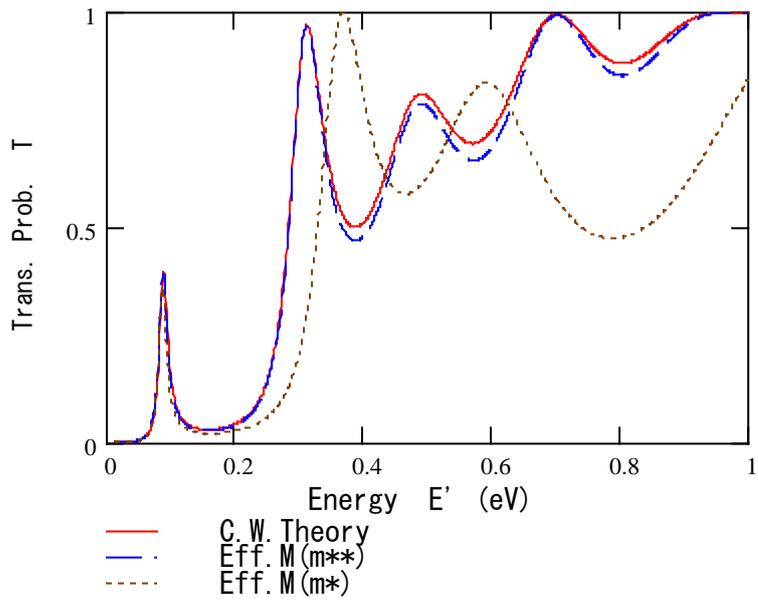
1次元有効質量近似方程式に基づく行列解析に用いる式

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

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

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

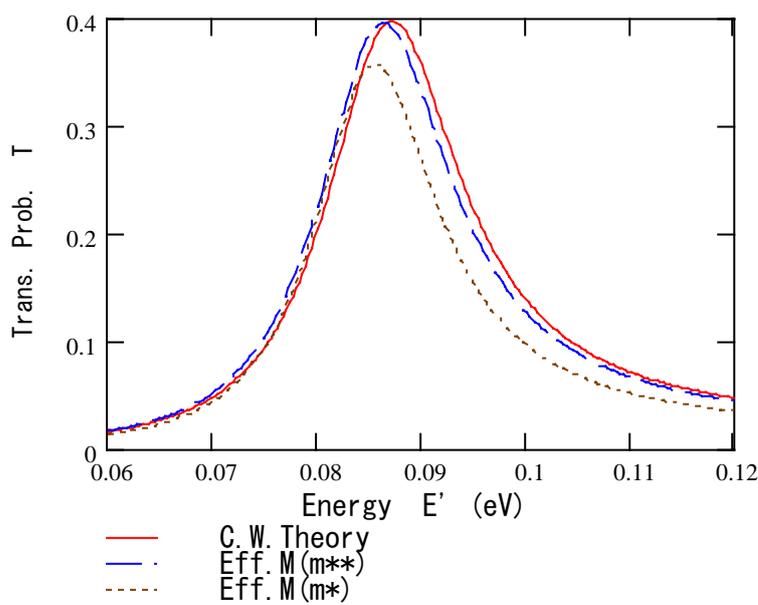
$$T = \frac{4 \frac{k'_1}{m_{1}^{**}} \frac{k'_{N+1}}{m_{N+1}^{**}}}{\left| \frac{k'_{N+1}}{m_{N+1}^{**}} M_{11} - i M_{12} \frac{k'_1}{m_{1}^{**}} \frac{k'_{N+1}}{m_{N+1}^{**}} + i M_{21} + M_{22} \frac{k'_1}{m_{1}^{**}} \right|^2}$$



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

$$m_{str} = \begin{pmatrix} 0.04 \\ 0.08 \\ 0.04 \\ 0.08 \\ 0.04 \end{pmatrix}$$

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。