

学位論文
光変調反射分光法による
半導体歪ヘテロ構造に関する研究

東京大学大学院
工学系研究科物理工学専攻
矢口 裕之

目次

1 序論	1
1.1 本研究の背景	1
1.2 本研究の目的	3
1.3 本論文の構成	5
2 半導体歪ヘテロ構造	7
2.1 変形ポテンシャル理論	8
2.1.1 価電子帯に対する歪の影響	8
2.1.2 伝導帯に対する歪の影響	12
2.2 半導体歪量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造	13
3 光変調反射分光法	23
3.1 光変調反射分光法の特長	23
3.2 光変調反射分光法の原理	25
3.2.1 光変調反射分光法の変調機構	25
3.2.2 定性的議論	27
3.2.3 摂動論による取り扱い	28
3.2.4 光変調反射分光法の量子井戸構造への適用	29
4 X線回折による構造解析	35
4.1 歪薄膜に対する回折条件	35

4.2 動力学の X 線回折理論	38
4.2.1 Takagi-Taupin 方程式の導出	40
4.3 動力学の X 線回折理論の超格子構造・量子井戸構造への適用	44
5 GaAs/GaAsP 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量	47
5.1 序	47
5.2 実験	48
5.3 結果及び考察	50
5.4 まとめ	59
6 GaAsP/GaP 歪量子井戸構造におけるバンド不連続量	61
6.1 序	61
6.2 実験	61
6.3 結果及び考察	66
6.4 まとめ	83
7 Ge/SiGe 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量及び界面の評価	85
7.1 序	85
7.2 実験	86
7.3 結果及び考察	89
7.4 まとめ	103
8 結論	105
A スピン軌道相互作用による分裂エネルギーへの歪の影響	107
B ヘテロ界面における包絡関数の境界条件	111
C 電場変調による誘電関数の変化	115
D Maxwell 方程式の X 線回折への適用	121

E 局所逆格子ベクトルの導出	123
F 散乱振幅の微分方程式の導出	125
G 積分型の導出	127
H X_j の複素数表示	129
I 伝導帯の非放物線性	131
謝辞	137
参考文献	141
本論文に関する研究論文リスト	148
それ以外の研究論文	150

目次

2.1	歪による価電子帯構造の変化	11
2.2	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造	16
2.3	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造における価電子帯のバンドラインアップ	17
2.4	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性	18
2.5	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性	19
2.6	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造の価電子帯のバンドラインアップ	20
2.7	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性	21
2.8	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸構造における価電子帯のバンドラインアップ	22
3.1	光変調反射分光法の変調機構	24
3.2	光変調反射分光法の光学系	26
3.3	GaAs/Al _x Ga _{1-x} As 量子井戸構造	30
3.4	GaAs/Al _x Ga _{1-x} As 量子井戸構造の光変調反射スペクトルおよびフォトルミネッセンススペクトルとフォトルミネッセンス励起スペクトル	31
3.5	PR および PL から求めた遷移の半値幅と PL のストークスシフトの井戸幅依存性	32
4.1	歪薄膜に対する回折条件	37

5.1	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸構造の X 線ロッキングカーブ	49
5.2	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸の試料構造	51
5.3	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸構造におけるバンドラインアップ	51
5.4	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸の PR スペクトル	52
5.5	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸の PR スペクトルの井戸幅依存性	53
5.6	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸のヘテロ界面におけるバンド不連続量	55
5.7	Pistol と Liu の測定した PLE スペクトル	58
5.8	円偏光 PLE によって求められた光学遷移エネルギー	60
6.1	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸の試料構造	62
6.2	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.807, L_z = 30.4 \text{ \AA}$) の X 線回折ロッキングカーブ	63
6.3	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.832, L_z = 63.4 \text{ \AA}$) の X 線回折ロッキングカーブ	64
6.4	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.818, L_z = 91.1 \text{ \AA}$) の X 線回折ロッキングカーブ	65
6.5	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.807, L_z = 30.4 \text{ \AA}$) の PR スペクトル	67
6.6	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.832, L_z = 63.4 \text{ \AA}$) の PR スペクトル	68
6.7	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.818, L_z = 91.1 \text{ \AA}$) の PR スペクトル	69
6.8	P 組成 $x = 0.807$, 井戸幅 30.4 \AA の GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造に対する PR 測定から得られた遷移エネルギーと, 伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとした量子準位計算による遷移エネルギーとの比較	70

6.9	P 組成 $x = 0.832$, 井戸幅 63.4 \AA の GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造に対する PR 測定から得られた遷移エネルギーと, 伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとした量子準位計算による遷移エネルギーとの比較	71
6.10	P 組成 $x = 0.818$, 井戸幅 91.1 \AA の GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造に対する PR 測定から得られた遷移エネルギーと, 伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとした量子準位計算による遷移エネルギーとの比較	72
6.11	LH と SO の結合を考慮した場合としない場合の量子準位計算に基づく遷移エネルギーの違い	73
6.12	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸 ($x = 0.807, L_z = 30.4 \text{ \AA}$) のフォトルミネッセンススペクトル	75
6.13	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸 ($x = 0.832, L_z = 63.4 \text{ \AA}$) のフォトルミネッセンススペクトル	76
6.14	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸 ($x = 0.818, L_z = 91.1 \text{ \AA}$) のフォトルミネッセンススペクトル	77
6.15	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸のフォトルミネッセンスピークの井戸幅依存性	79
6.16	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸のフォトルミネッセンススペクトルの温度依存性	80
6.17	GaAs _{1-x} P _x /GaP ヘテロ界面における Γ 点, X 点の相対関係	82
6.18	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造のバンドラインアップ	83
7.1	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸の試料構造	87
7.2	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造の X 線ロッキングカーブ	88
7.3	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造のバンドラインアップ	90
7.4	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造の PR スペクトル	90
7.5	伝導帯の非放物線性を考慮した場合と考慮しない場合の遷移エネルギー	94
7.6	Ge/Si _{1-x} Ge _x ヘテロ界面におけるバンド不連続量	95
7.7	Ge と, Ge に格子整合するように歪んだ Si の模式的なエネルギーバンド図	96

7.8	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸の PR スペクトルの温度依存性	98
7.9	重い正孔の量子準位に関する光学遷移の線幅の温度依存性	99
7.10	Ge/Si _{1-x} Ge _x ヘテロ界面の平坦性の評価	100
7.11	10 ML 程度の大きな段差が生じていることを示す PR スペクトル	101
7.12	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造における界面の平坦性を示す模式図	103
A.1	変形ポテンシャル a_2 および b_2 の影響を考慮した場合としない場合の Ge の価電子帯に対する歪の効果の違い	109
I.1	伝導帯の非放物線性を導くために考慮すべきバンド	133

表目次

5.1	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸構造の X 線回折ロッキングカーブの計算に用いたパラメータ	50
5.2	GaAs/GaAs _{1-x} P _x 歪障壁量子井戸の量子準位の計算に用いたパラメータ	54
5.3	応力がゼロの場合の GaAs/GaP ヘテロ界面における価電子帯のバンド不連続量	54
5.4	GaAs/GaP ヘテロ界面における応力がゼロの場合の価電子帯のバンド不連続量を計算するために用いたパラメータ	56
5.5	GaAs/GaAs _{1-x} P _x ($x = 0.23$) 歪障壁量子井戸のヘテロ界面におけるバンド不連続量	57
6.1	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸構造におけるバンド不連続量を決定するために用いた試料の構造	62
6.2	GaAs _{1-x} P _x /GaP 歪量子井戸における量子準位の計算に用いたパラメータ	74
6.3	PL 測定より求められたフォノンエネルギー	78
7.1	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸の X 線回折ロッキングカーブの計算に用いたパラメータ	89
7.2	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量を決定するために用いた試料の構造	91
7.3	PR 測定から得られた光学遷移エネルギー	92
7.4	Ge/Si _{1-x} Ge _x 歪障壁量子井戸における量子準位の計算に用いたパラメータ	92
7.5	異なる井戸幅による遷移エネルギー差	102

A.1 変形ポテンシャル a_2 および b_2 109

第1章

序論

1.1 本研究の背景

近年、分子線エピタキシー (molecular beam epitaxy: MBE) 法、有機金属気相エピタキシー (metalorganic vapor phase epitaxy: MOVPE) 法等の結晶成長技術の進歩によって、きわめて急峻な界面をもつヘテロ構造を作製する事が可能となってきた。そのような結晶成長技術を利用して、異種の半導体材料を接合させた半導体ヘテロ構造を量子サイズで作製すると、元々の材料にはなかった、すなわち人工的にしか得られない新しい物性をもたせることが可能になる。例えば、異種の材料を交互に繰り返し成長することによって結晶の周期性を人工的に制御する半導体超格子構造、電子 (ないしは正孔) を量子サイズのポテンシャル井戸に閉じこめて2次元性を得る半導体量子井戸構造が、人工的にしか得られない物性を有する半導体ヘテロ構造の典型であろう。このような半導体ヘテロ構造のもつ特異な性質は、実際に半導体量子井戸レーザ、変調ドープトランジスタ等に生かされ、製品化されるに至っている。

半導体ヘテロ構造を作製する場合には、ミスフィット転位の発生を防ぐために、通常は、互いの格子定数の近い材料が選ばれる。その最も典型的な例は $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 系である。実際、この系が格子整合系であったことが半導体ヘテロ構造の研究の発展に大きく寄与したことは間違いない。

しかし、この格子整合という条件は材料の選択の幅を狭くする。例えば、 InP 基板上に $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 層を成長させる場合には、格子整合条件を考えると、 In の組成は $x = 0.53$ で

なければならず、必然的にバンドギャップエネルギーも $E_g = 0.73 \text{ eV}$ と決まってしまう。もし、格子定数の異なる材料間のヘテロ構造の作製が可能になれば、より材料選択の幅が広がるはずである。

そして実際に、成長層の膜厚が十分薄い場合には、格子定数の差は、ミスフィット転位を発生することなく、膜内に歪を生じることで解消される [1]。このような格子定数の異なる材料間における歪ヘテロエピタキシャル成長も、膜厚制御性の高い MBE 法、MOVPE 法によって実現が容易になってきた。歪ヘテロエピタキシャル成長においては、格子定数の異なる材料間での成長が可能になることで材料選択の幅が広がるというだけでなく、意図的に成長層に歪を導入できるという点も重要である。なぜならば、歪の導入によってバンド構造を人工的に変化させられるからである。特に顕著なのは歪によるバンドギャップエネルギーの変化である。このようにバンド構造を人工的に変化させられるという観点から歪超格子に最初に着目したのは Osbourn [2]-[5] である。材料系には $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 系を用い、歪超格子を作製することによってバンドギャップエネルギーと格子定数とを独立に変化させられることを実証して、歪ヘテロ構造の有用性を示した [6]。

歪の導入は、単にバンドギャップエネルギーの変化だけでなく、対称性の低下にともなう価電子帯の分裂をもたらす。特に、歪のない状態では縮退している重い正孔の価電子帯と軽い正孔の価電子帯を分裂させることによって、有効質量や状態密度を制御できる可能性がある。これを実際のデバイスに応用した例が歪量子井戸レーザーで、しきい値電流の低下等の特性の向上がみられる [7]-[10]。

このように、歪ヘテロ構造では従来の格子整合条件下でのヘテロ構造に比べると、材料の選択の幅が広がり、かつ歪を意図的に導入することで、より自由にバンド構造を変えられることがわかる。

本研究では、この歪ヘテロ構造に注目し、おもにヘテロ界面におけるバンド不連続量に関する検討を行った。バンド不連続量は量子井戸のポテンシャル障壁の高さとなるから、ヘテロ構造を考える上できわめて重要なパラメータである。それにもかかわらず、実験的に正確な決定を行うことは難しく、理論的に数値を予測することも困難である。例えば最も詳細に研究が行われている $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ヘテロ接合の場合でさえ、Dingle 等 [11,12]

が量子井戸の光吸収スペクトルの測定結果に基づいて $\Delta E_c = (0.85 \pm 0.03)\Delta E_g$ という値を報告し、それからほぼ 10 年後に Miller 等 [13] の実験をきっかけに $\Delta E_c = 0.6\Delta E_g$ 程度であると修正されるようになってきたという状況である。理論的検討についても数多くの手法が提案されているが [14]-[18]、精度良くバンド不連続量を予測できるものは皆無といっても過言ではない。歪ヘテロ構造の場合には、バンド不連続量が歪の大きさに依存することから、一層取扱いが困難で、実験的にも理論的にも検討が不十分な状況にある。

1.2 本研究の目的

前節で述べたように、ヘテロ構造におけるバンド不連続量はきわめて重要なパラメータであるにもかかわらず、その検討は不十分である。特に、歪ヘテロ構造の場合にはバンド不連続量が歪の大きさに依存するために、問題がより一層複雑化している。本研究では、このように検討が不十分な歪ヘテロ構造におけるバンド不連続量を光変調反射分光法を用いて調べた。この手法は、後述するように非破壊・非接触の評価法であるので、歪ヘテロ構造のように外部からの影響によって変化を受けやすい試料を調べるのに適した手法である。

本研究で対象とした歪ヘテロ構造は

- $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 歪障壁量子井戸構造
- $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造
- $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸構造

の3つである。

光変調反射分光法を用いた本研究の特色は

- (1) 光変調反射分光法が最低エネルギーの光学遷移だけでなく、より高エネルギーの遷移も観測できるという特長を利用して、ヘテロ界面におけるバンド不連続量の決定を行っている。特に、量子数 n の大きい準位に関する遷移エネルギーはバンド不連続量に対して敏感であるという点と、障壁層のバンドギャップエネルギーを直接測定できるという点から、正確にバンド不連続量の決定を行う事が可能となる。

- (2) 直接遷移ギャップが最小エネルギーギャップではない間接遷移型の材料系に対しても、光変調反射分光法では光学遷移エネルギーを容易に測定できる事を利用している。

という点にある。

本研究の目的は光変調反射分光法によって歪ヘテロ構造におけるバンド不連続量を明らかにすると同時に、光変調反射分光法という手法の有効性を示すことにある。具体的に述べると

- (1) GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造のヘテロ界面におけるバンド不連続量の P 組成依存性を明らかにする。この系では、歪の影響によって GaAs_{1-x}P_x 障壁層の価電子帯が分裂し、重い正孔に関するバンドギャップと軽い正孔に関するバンドギャップが現れる。光変調反射分光法を用いることによって、これらのバンドギャップを直接測定し、それぞれのバンド不連続量の決定を行う。
- (2) GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造のヘテロ界面におけるバンド不連続量を明らかにする。本研究では P 組成が大きい間接遷移型の領域を対象とする。光変調反射分光法によって求まるのは Γ 点におけるバンド不連続量となる。この Γ 点におけるバンド不連続量に基づいて最小バンドギャップを形成している X 点におけるバンドラインアップについても検討を行い、間接バンドギャップに関するフォトルミネッセンス測定の結果と比較を行う。
- (3) Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造のヘテロ界面におけるバンド不連続量の Ge 組成依存性を明らかにする。この系は Si_{1-x}Ge_x 障壁層が歪むとともに間接遷移型材料から構成される量子井戸である。したがって、(1)(2) で述べたことが、ともに当てはまり、光変調反射分光法の対象としてふさわしい系である。
- (4) Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造の光変調反射スペクトルでは、光学遷移の線幅が量子数 n に依存している様子が明瞭に観測される。この線幅の量子数依存性から Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面の平坦性について検討を行う。

ということにある。

光学遷移の線幅からヘテロ界面の平坦性について検討するという手法は GaAs/AlGaAs ヘテロ界面等の直接遷移型半導体からなる系に対しては、フォトルミネッセンス法 [19] を用いて行われているが、Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面の場合、フォトルミネッセンスが観測されていないために、このような検討がなされていなかった。すなわち、光変調反射分光法による Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面の平坦性の検討は、この系に関して初めての光学測定による検討であるということを強調しておく。

1.3 本論文の構成

本論文は以下のように構成されている。

第1章 序論

本章では、本研究の背景となる半導体歪ヘテロ構造の有する特徴について簡単にふれ、その中で重要なバンド不連続量を光変調反射分光法により調べることを目的とする事を述べている。さらに光変調反射分光法を用いる本研究の特色を具体的な目的と合わせて述べている。

第2章 半導体歪ヘテロ構造

この章では、バンド構造に対する歪の影響を変形ポテンシャル理論に基づいて記述を行う。さらに、歪量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造について、有効質量近似に基づいた理論を紹介する。

第3章 光変調反射分光法

この章では、本研究で用いる光変調反射分光法の特長および原理について述べる。

第4章 X線回折による構造解析

本研究では量子井戸構造を精密に決定するために X 線回折を用いた。この章においては、構造解析に用いた X 線回折の動力学的理論および量子井戸構造への適用方法

6 第1章 序論

について述べる。

第5章 GaAs/GaAsP 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量

この章では、GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸におけるバンド不連続量を決定するための実験方法および実験結果について述べ、他の研究による結果との比較を行う。

第6章 GaAsP/GaP 歪量子井戸構造におけるバンド不連続量

この章では、GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸のΓ点におけるバンド不連続量の決定を行うための実験方法および実験結果について述べる。さらに、フォトルミネッセンス測定から得られたX点に関する実験結果との整合性を検討する。

第7章 Ge/SiGe 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量及び界面の評価

この章では、Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造のΓ点におけるバンド不連続量を決定するための実験方法および実験結果について述べる。また、光変調反射スペクトル中の光学遷移の線幅の量子数依存性からヘテロ界面の平坦性について検討した結果について述べる。

第8章 結論

この章では、本研究の総括を行う。

第2章

半導体歪ヘテロ構造

膜厚制御性の高いMBE法、MOVPE法の技術的進歩によって、格子定数の異なる材料間のヘテロ構造の作製が実現可能となってきた。もし、膜厚が臨界膜厚と呼ばれるある膜厚よりも薄ければ、格子定数の差は、ミスフィット転位を発生することなく膜内に歪を生じることによって解消される[1]。また、たとえ臨界膜厚をこえるような場合でも、MBE法等の成長法における成長温度は比較的低いため、ほとんど歪の緩和を生じない薄膜が得られることがわかってきた[20,21]。

歪ヘテロエピタキシャル成長においては、格子定数の異なる材料間での成長が可能になるというだけでなく、意図的に歪を導入し、バンド構造を人工的に変えられる点も重要である。

現在、さかんに研究がすすめられている歪ヘテロ材料系としてはSi_{1-x}Ge_x系、In_xGa_{1-x}As系、GaAs_{1-x}P_x系、等がある。この中で、Si_{1-x}Ge_xは本来は歪を積極的に利用するというよりはSiに対するヘテロ材料として選ばれたという性格が強かった。しかしながら、次第に歪を利用するという立場からのアプローチが行われるようになってきた。例えば、Si_{1-x}Ge_x/Siヘテロ構造に変調ドーピングを行うと、Si基板上に作製したSi_{1-x}Ge_x/Siヘテロ構造の場合には、正孔に対してキャリアの閉じ込めによる移動度の増大がみられ[22]、一方、Si_{1-x}Ge_xバッファ層上に作製した場合には電子について移動度の増大がみられる[23]という現象が発見された。この現象は歪の生じ方によってバンドラインアップが変化したことによるものである。これは一つの例にすぎないが、歪によってバンド構造が変化する

ことをうまく利用すれば、より自由度の高いバンドエンジニアリングが行えることを意味している。

この章では、歪によるバンド構造の変化を取り扱う変形ポテンシャル理論 (deformation potential) について述べ、さらに歪量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造についての記述を行う。

2.1 変形ポテンシャル理論

バンド構造に対する歪の影響は、体積変化と対称性の低下という観点から記述することが出来る。この節では、変形ポテンシャル理論に基づいて、バンド構造がどのように変化するかを見ていくことにする。

2.1.1 価電子帯に対する歪の影響

まず、価電子帯に対する歪の影響がどのように現れるかを記述していく。

ダイヤモンド構造 (O_h^T) をもつ半導体においては、強結合近似の観点から見ると、価電子帯の頂点は原子の p 軌道関数の対称和から形成されている。この状態では、価電子帯の頂点は3重に縮退していて、対称性は $\Gamma_{25'}$ に対応する。ところが、スピン軌道相互作用によってハミルトニアン固有状態は2重空間群の既約表現にしたがって分かれるので、価電子帯の頂点は Γ_6^+ と Γ_7^+ の対称性をもつ状態に分裂する。別の言い方をすれば、合成角運動量が $J = 3/2$ と $J = 1/2$ の原子軌道関数からなる2つの状態に分裂する。 Γ_6^+ の対称性に対応するのは4つの原子軌道関数 $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$ からなる状態である。これら Γ_7^+ の対称性に対応するのは2つの原子軌道関数 $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ からなる状態である。これらの原子軌道関数は重い正孔 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$ 、軽い正孔 $|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ 、スピン軌道相互作用によって分裂した価電子帯 $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ という対応をしている。

一方、多くの III-V 族化合物半導体の結晶構造は閃亜鉛鉱構造 (T_d^2) である。この構造において、価電子帯の頂点は対称性 Γ_{15} に対応する。閃亜鉛鉱構造は反転対称性がないので、価電子帯の頂点で、必ずしも $dE/dk = 0$ となるとは限らないが、通常、このような

ことは無視して、ダイヤモンド構造と同様の取扱いをしている。閃亜鉛鉱構造においても価電子帯の頂点は原子の p 軌道関数から形成されているので3重に縮退しているが、スピン軌道相互作用によって Γ_8, Γ_7 に分裂する。具体的には、 Γ_8 には $|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$ (重い正孔) と $|\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ (軽い正孔) が、 Γ_7 には $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ (スピン軌道相互作用により分離した価電子帯) がそれぞれ対応している。

価電子帯に対する歪の影響を記述する歪ハミルトニアン [24]-[26] は

$$H_{\text{strain}} = a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - 3b[(L_x^2 - \frac{1}{3}L^2)\varepsilon_{xx} + \text{c.p.}] - \sqrt{3}d[(L_xL_y + L_yL_x)\varepsilon_{xy} + \text{c.p.}] \quad (2.1)$$

と表せる。ただし、 ε_{ij} は歪テンソルの成分を表す。 L, L_i は角運動量演算子、 a_v は価電子帯に対する静水圧変形ポテンシャル (hydrostatic deformation potential)、 b, d はせん断変形ポテンシャル (shear deformation potential) である。スピン軌道相互作用を考慮し、(2.1) 式を用いると、ハミルトニアンは

$$H = - \begin{bmatrix} P_x + Q_x & -S_x & R_x & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}S_x & -\sqrt{2}R_x \\ -S_x^\dagger & P_x - Q_x & 0 & R_x & \sqrt{2}Q_x & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_x \\ R_x^\dagger & 0 & P_x - Q_x & S_x & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_x^\dagger & -\sqrt{2}Q_x \\ 0 & R_x^\dagger & S_x^\dagger & P_x + Q_x & \sqrt{2}R_x^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}S_x^\dagger \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S_x^\dagger & \sqrt{2}Q_x & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_x & \sqrt{2}R_x & P_x + \Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2}R_x^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_x^\dagger & -\sqrt{2}Q_x & \frac{1}{\sqrt{2}}S_x & 0 & P_x + \Delta_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

で与えられる。ただし、

$$P_x = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.3)$$

$$Q_x = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (2.4)$$

$$R_x = \frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} \quad (2.5)$$

$$S_x = -d(\varepsilon_{xx} - i\varepsilon_{yz}) \quad (2.6)$$

である。また Δ_0 はスピン軌道相互作用による分離エネルギーである。なお、ここでは Δ_0 の歪依存性を無視している。実際に、いくつかの研究結果 [27]-[29] によって、 Δ_0 の歪依存性の影響は小さく、無視しても差し支えないことがわかる (付録 A 参照)。

以下の議論では、(001) 基板上にヘテロ構造を作製する場合について取り扱うことにする。この場合には、歪層に2軸応力が加わり、

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz} \quad (2.7)$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0 \quad (2.8)$$

となるために

$$R_e = S_e = 0 \quad (2.9)$$

となる。

歪のない状態で a という格子定数を持つ材料を、格子定数 a_0 の基板上に面内方向の格子定数が同じになるようにコヒーレント成長させた場合、歪層中の歪の大きさは

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a} \quad (2.10)$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}} \epsilon_{xx} \quad (2.11)$$

で与えられる。ただし、 c_{ij} は弾性定数である。なお、ダイヤモンド構造、閃亜鉛鉱構造のような立方晶構造においては、弾性定数は歪 ϵ_{ij} と応力 σ_{kl} によって次のように定義されている。

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

以上のことから、(001) 基板上に成長させた歪層においては、重い正孔の価電子帯 (HH バンド)、軽い正孔の価電子帯 (LH バンド)、スピン軌道相互作用によって分裂した価電子帯 (SO バンド) の元々のエネルギー位置からのエネルギーシフトは

$$\Delta E_{HH} = -\delta E_H - \frac{1}{2} \delta E_{001} \quad (2.13)$$

$$\Delta E_{LH} = -\delta E_H - \frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E_{001} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2} \quad (2.14)$$

$$\Delta E_{SO} = -\delta E_H - \frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{001} + \frac{9}{4} (\delta E_{001})^2} \quad (2.15)$$

となる。ただし、

$$\delta E_H = -a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \quad (2.16)$$

$$\delta E_{001} = -b(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) \quad (2.17)$$

である。

ここで、重要な点は、 $k=0$ においては、歪の存在によって HH バンドは他の価電子帯と結合しないが、LH バンドと SO バンドの間では結合を生じるために、どちらの状態も、もはや純粋な状態ではなくなっている点である。また、応力が圧縮か引張りかによって、HH バンドと LH バンドの位置が入れ替わる。その様子を模式的に示したのが図 2.1 である。歪層に2軸の引張り応力が加わる場合には、通常扱う半導体材料では $b < 0$ な

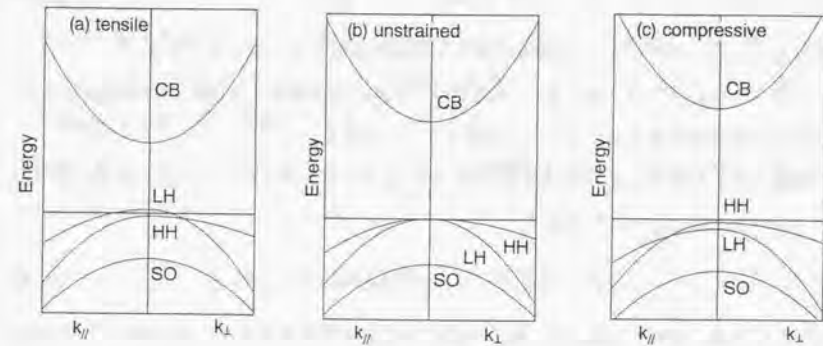


図 2.1 歪による価電子帯構造の変化。2軸の引張り応力が加わる場合 (a)、LH バンドの方が HH バンドよりも上に来る。また、価電子帯の平均位置はエネルギーの高い方へシフトする。2軸の圧縮応力が加わる場合 (c) には、それとは全く反対の挙動を示す。

ので、 $\delta E_{001} > 0$ となり、LH バンドの頂点の方が HH バンドの頂点よりも上に来る。また体積は増加するので、 $\delta E_H < 0$ となり、価電子帯の平均位置はエネルギーの高い方へとシフトする。一方、歪層に2軸の圧縮応力が加わる場合には全く反対の挙動を示す。

以上の説明からもわかるように、体積変化 (すなわち δE_H) は価電子帯の平均位置をシ

フトさせる効果として、対称性の低下(すなわち δE_{001})は価電子帯を分裂させる効果として現れる。

2.1.2 伝導帯に対する歪の影響

伝導帯に対する歪の影響は、価電子帯の場合に比べると、より簡単に記述できるが、体積変化及び対称性の低下が関係する点は同様である。

ダイヤモンド構造における伝導帯の Γ 点は s 軌道関数の反結合軌道からなり、対称性は Γ_6^- (閃亜鉛鉱構造の場合は Γ_6) に対応する。この状態はスピンの違いによって2重に縮退しているだけなので、歪の影響としては体積変化の効果のみが現れる。したがって、この場合の歪によるエネルギーシフトは簡単に

$$\Delta E_c = a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.18)$$

で与えられる。ただし a_c は伝導帯に対する静水圧変形ポテンシャルである。

一方、 Γ 点以外の点、例えば X 点などは、結晶の対称性から等価な点が存在するため、これらが対称性の低下にともなって分裂することがある。

問題とする点が $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i$ にあるときには、歪によるエネルギーのシフト量 ΔE_c^i は Herring と Vogt の表式 [30] にしたがえば、

$$\Delta E_c^i = (\Xi_d \uparrow + \Xi_u \{\hat{a}_i, \hat{a}_i\}) : \hat{\varepsilon} \quad (2.19)$$

で与えられる。ただし、 \hat{a}_i は \mathbf{k}_i 点における \mathbf{k} 方向の単位ベクトル、 $\{\}$ はディアド積、 \uparrow は単位テンソル、 Ξ_d, Ξ_u は変形ポテンシャルである。

例えば、 X 点是对称性の低下によって、 $[001]$ 軸上の点と、 $[100], [010]$ 軸上の点とが分裂し、

$$\Delta E_c^{001} = (\Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{2}{3}\Xi_u(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \quad (2.20)$$

$$\Delta E_c^{100,010} = (\Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{1}{3}\Xi_u(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) \quad (2.21)$$

というエネルギーシフトをする。なお、

$$E_1 = \Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u \quad (2.22)$$

$$E_2 = \Xi_u \quad (2.23)$$

とする表記法もある。

2.2 半導体歪量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造

この節では、量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造を有効質量近似の立場から記述する。通常の歪のない量子井戸構造においては、SO バンドの存在を無視してサブバンド構造を求める場合が多い。これは、スピン軌道相互作用による分裂エネルギー Δ_0 が大きい場合には良い近似となっている。しかし、 Δ_0 が小さい場合や、歪が存在する場合には、SO バンドとその他の価電子帯との結合を無視できないことがある。特に、前節で述べたように、歪による SO バンドと LH バンドの結合は Γ 点においても存在するため、SO バンドの影響を考慮することは、歪量子井戸構造においては、より重要になる。以下では、Chao と Chuang の論文 [31] にしたがって議論を展開する。なお、ここでは (001) 面をヘテロ界面とする量子井戸構造に話を限ることとする。

価電子帯サブバンドのエネルギー $E(\mathbf{k}_{\parallel})$ 及び包絡関数 $F(\mathbf{k}_{\parallel}, z)$ は次の方程式を解くことによって得られる。

$$\sum_{\nu} \{H_{\mu\nu} + V_h(z)\delta_{\mu\nu}\} F_{\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = E(\mathbf{k}_{\parallel})F_{\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}, z), \quad (2.24)$$

$$\mu, \nu \in \left\{ \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \quad (2.25)$$

ただし、 $H_{\mu\nu}$ は Luttinger-Kohn [32,33] と Bir-Pikus [24]-[26] の理論に基づくハミルトニアンで

$$H_{\mu\nu} = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}S & -\sqrt{2}R \\ -S^{\dagger} & P-Q & 0 & R & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^{\dagger} & 0 & P-Q & S & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^{\dagger} & -\sqrt{2}Q \\ 0 & R^{\dagger} & S^{\dagger} & P+Q & \sqrt{2}R^{\dagger} & \frac{1}{\sqrt{2}}S^{\dagger} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S^{\dagger} & \sqrt{2}Q & -\sqrt{\frac{3}{2}}S & \sqrt{2}R & P+\Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2}R^{\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}S^{\dagger} & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

と表される。ここで、

$$P = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_1 \left(k_{\parallel}^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.27)$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_2 \left(k_{\parallel}^2 + 2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (2.28)$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} \left\{ \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) e^{-2i\phi} + \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} \right) e^{2i\phi} \right\} k_{\parallel}^2 \quad (2.29)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m} 2\sqrt{3} \gamma_3 k_{\parallel} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z} e^{-i\phi} \quad (2.30)$$

である。 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ は Luttinger パラメータで、 k_{\parallel} は面内方向の波数、 ϕ は

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{k_y}{k_x} \right) \quad (2.31)$$

である。 $V_h(z)$ は正孔に対する量子井戸のポテンシャルである。また、包絡関数は

$$F_\nu(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{r}) = F_\nu(\mathbf{k}_{\parallel}, z) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}) \quad (2.32)$$

と表される。ただし、 $\mathbf{k}_{\parallel} = k_x \mathbf{x} + k_y \mathbf{y}$, $\boldsymbol{\rho} = x\mathbf{x} + y\mathbf{y}$ で、 \mathbf{x}, \mathbf{y} はそれぞれ x 方向、 y 方向の単位ベクトルである。

さらに、axial 近似 ($\gamma_2 = \gamma_3$) を使うと

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) k_{\parallel}^2 e^{-2i\phi} \quad (2.33)$$

と近似できることから、(2.26) 式に示したハミルトアンは基底を変換することで、次式に示すようにならずと簡単な形に書き表すことができる。

$$H = \begin{bmatrix} H_{3 \times 3} & 0 \\ 0 & H_{3 \times 3}^{\dagger} \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

$$H_{3 \times 3} = - \begin{bmatrix} P+Q & -R_p - iS_p & -\sqrt{2}R_p + \frac{i}{2}S_p \\ -R_p + iS_p & P-Q & \sqrt{2}Q + i\sqrt{\frac{3}{2}}S_p \\ -\sqrt{2}R_p - \frac{i}{2}S_p & \sqrt{2}Q - i\sqrt{\frac{3}{2}}S_p & P + \Delta_0 \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

である。ただし、

$$R_p = -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) k_{\parallel}^2 \quad (2.36)$$

$$S_p = \frac{\hbar^2}{2m} 2\sqrt{3} \gamma_3 k_{\parallel} k_z \quad (2.37)$$

である。

もし、ポテンシャルエネルギーが、 $V_h(-z) = V_h(z)$ というように、鏡映操作に対して不変ならば、 $H_{3 \times 3}$ だけを解けばよい。

量子井戸におけるサブバンド構造を求めるには、まず、井戸層と障壁層内の平面波解をすべて見つけて、包絡関数 ($F_\nu, \nu = 1, 2, 3$) をそれぞれの領域の平面波の線形結合として書き表す。

次に、サブバンドエネルギーと線形結合の係数を以下の境界条件に基づいて解く。すなわち

$$\begin{bmatrix} F_1(z) \\ F_2(z) \\ F_3(z) \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

と

$$\begin{bmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & \sqrt{3} \gamma_3 k_{\parallel} & -\sqrt{\frac{3}{2}} \gamma_3 k_{\parallel} \\ \sqrt{3} \gamma_3 k_{\parallel} & (\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & -\frac{3}{\sqrt{2}} \gamma_3 k_{\parallel} - 2\sqrt{2} \gamma_2 \frac{\partial}{\partial z} \\ \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma_3 k_{\parallel} & \frac{3}{\sqrt{2}} \gamma_3 k_{\parallel} - 2\sqrt{2} \gamma_2 \frac{\partial}{\partial z} & \gamma_1 \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1(z) \\ F_2(z) \\ F_3(z) \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

について井戸と障壁の間の界面を横切って連続であるという条件を考慮する (付録 B 参照)。

なお、(2.39) 式は Chao と Chuang の論文中 [31] では誤っているのに注意する必要がある。

以下にこの理論に基づく計算結果の例を示す。図 2.2 は Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造を示したものである。Si_{1-x}Ge_x 障壁層中の Ge 組成 0.8 で、井戸幅 160 Å という構造について計算を行った。この構造における価電子帯のバンドラインアップは図 2.3 に示すようになっている。図 2.2 の中で、SO バンドとの結合を考慮した場合を実線で、考慮しない場合を破線で示す。 k_{\parallel} が大きくなるにしたがって、SO バンドとの結合を考慮した場合としない場合の差が大きくなるのがわかる。もう一つ重要な点は $k_{\parallel} = 0$ において、HH サブバンドの準位は SO バンドとの結合を考慮した場合としない場合で一致するのに対して、LH サブバンドの準位は一致しないという点である。

この LH サブバンド準位に注目して、いくつかの系について計算を行った。図 2.4 は Ge/Si_{0.2}Ge_{0.8} 歪障壁量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性を示したものである。実線が SO バンドを考慮した場合に、破線が考慮しない場合に対応している。 $n = 1$ の準位については井戸幅が広い場合には両者はほぼ一致しているが、井戸幅が狭く

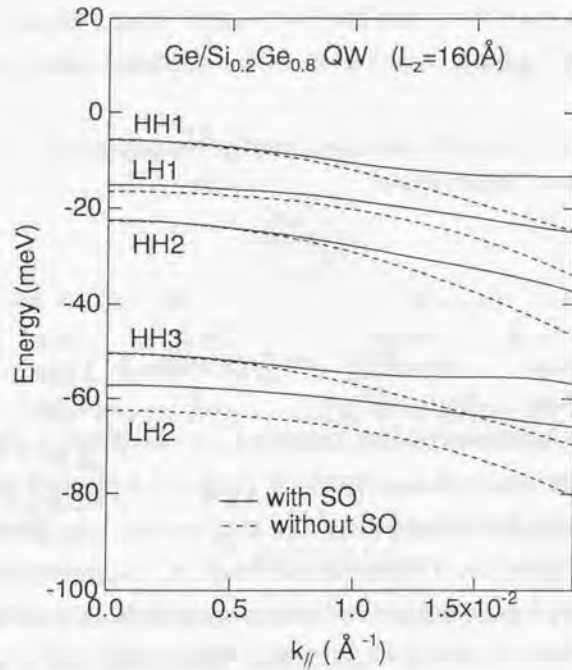


図 2.2 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造における価電子帯サブバンド構造. Si_{1-x}Ge_x 障壁層中の Ge 組成 0.8, 井戸幅 160 Å である. SO バンドとの結合を考慮した場合を実線で, 考慮しない場合を破線で示す. k_{\parallel} が大きくなるにしたがって, 実線と破線のエネルギー差が大きくなる. また, $k_{\parallel} = 0$ において, LH サブバンドの準位は, SO バンドとの結合を考慮した場合としない場合とで一致しない.

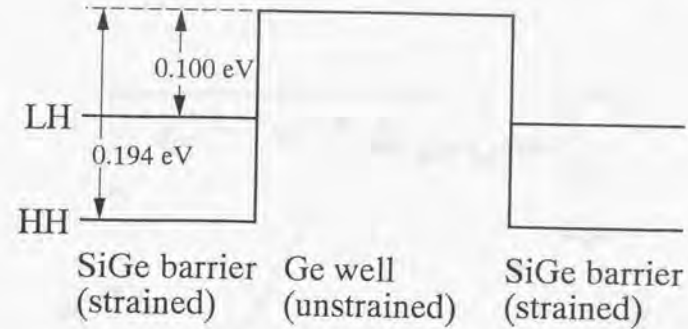


図 2.3 図 2.2 に示した価電子帯サブバンド構造を計算するのに対象とした Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造におけるバンドラインアップ. Si_{1-x}Ge_x 障壁層中の Ge 組成は 0.8 である. Si_{1-x}Ge_x 障壁層が 2 軸の引っ張り応力を受ける歪層となっているために LH バンドと HH バンドが分裂している.

なり, 準位が高エネルギーへシフトしていくと差が大きくなっていく. また, $n = 2, 3$ の準位も両者の差は大きい. つまり, 準位が高エネルギーになってくると, SO バンドを考慮した場合とそうでない場合の差が大きくなるのがわかる. この場合の準位のエネルギー差の最大値は 7 meV である.

図 2.5 は GaAs_{0.16}P_{0.84}/GaP 歪量子井戸構造における LH バンドのサブバンド準位の井戸幅依存性を示したものである. 図 2.6 には, このとき対象とした価電子帯のバンドラインアップを示す. この系ではスピン軌道相互作用による分離エネルギーが $\Delta_0 = 0.122$ eV と小さいことと, 井戸層が歪んでいることによって, SO バンドを考慮した場合と考慮しない場合の差が顕著である. 特に, 井戸幅が狭くない場合でも, $n = 1$ の準位エネルギーの差は大きい. さらに, $n = 3$ の準位は SO バンドを考慮しない場合には 200 Å 以下の井戸幅では存在しないが, 考慮すると存在することがわかる. この場合のエネルギー差の最大値は 10 meV となる.

一方, スピン軌道相互作用による分離エネルギー Δ_0 が大きい例として, GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造についての計算結果を図 2.7 に示す. 図 2.8 にはこのとき計算の対象

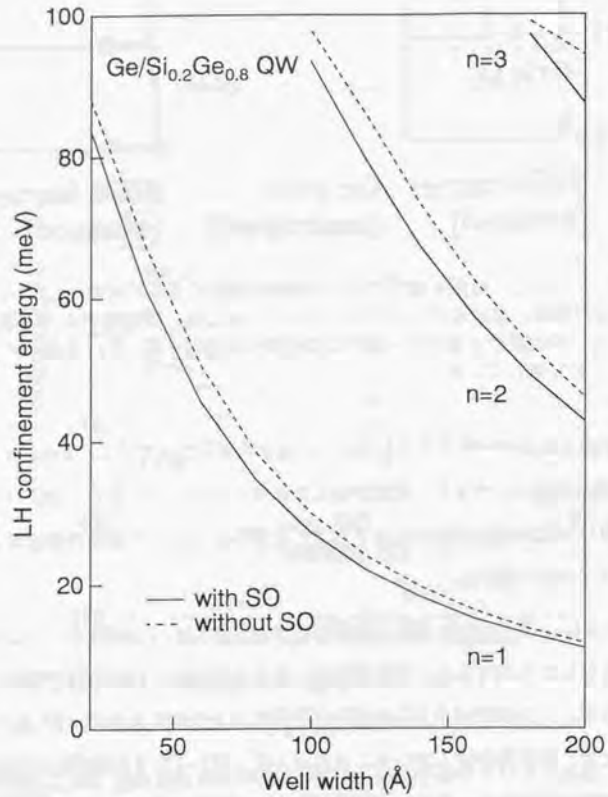


図 2.4 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性. Si_{1-x}Ge_x 障壁層の Ge 組成 0.8 である. 実線が SO バンドを考慮した場合に, 破線が考慮しない場合に対応している. 高エネルギーにある準位ほど, 両者の差が大きい.

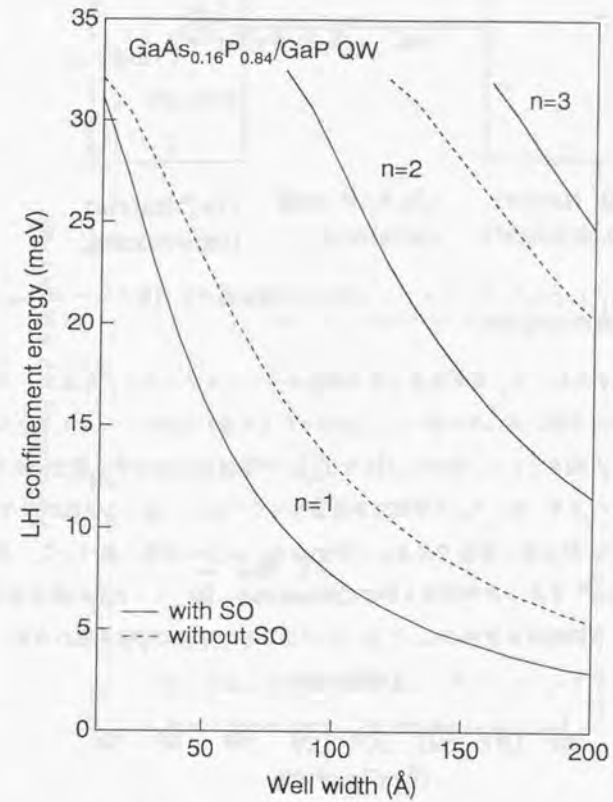


図 2.5 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性. GaAs_{1-x}P_x 井戸層の P 組成 0.84 である. 実線が SO バンドを考慮した場合に, 破線が考慮しない場合に対応している. Δ_0 が比較的小さいことと, 井戸層が歪層になっていることから, SO バンドとの結合の影響が顕著である.

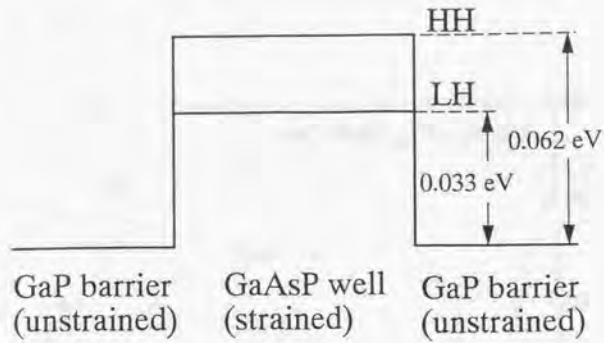


図 2.6 図 2.5 に示した LH サブバンド準位を計算するのに対象とした $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造の価電子帯のバンドラインアップ。

とした $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 歪障壁量子井戸構造のバンドラインアップを示す。スピン軌道相互作用による分離エネルギーが $\Delta_0 = 0.341 \text{ eV}$ と大きいため、 $n = 1, 2$ ともに SO バンドを考慮した場合としない場合の LH サブバンド準位のエネルギー差は小さく、1 meV 以下である。つまり、SO バンドの存在を考慮しなくてもよいという近似が成り立つのは、このように Δ_0 が大きい場合であることがわかる。以上の考察に基づいて、本研究では $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸の量子準位についてのみ、SO バンドとの結合を考慮した。 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸においても SO バンドとの結合の影響が現れるが、主に HH の準位に注目することによって、この問題を避けることにした。

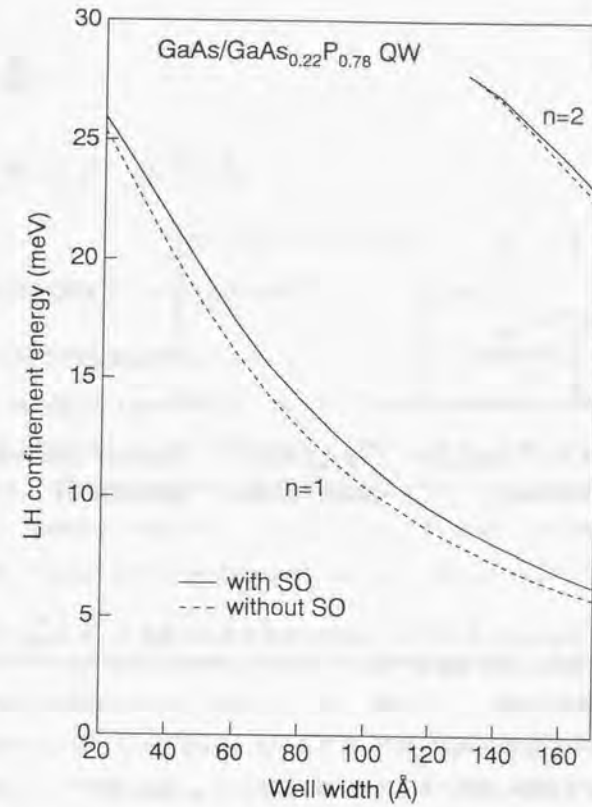


図 2.7 $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 歪障壁量子井戸構造における LH サブバンド準位の井戸幅依存性。 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 障壁層の P 組成は 0.22 である。実線が SO バンドを考慮した場合に、破線が考慮しない場合に対応している。 Δ_0 が大きいため、SO バンドとの結合の影響は小さい。

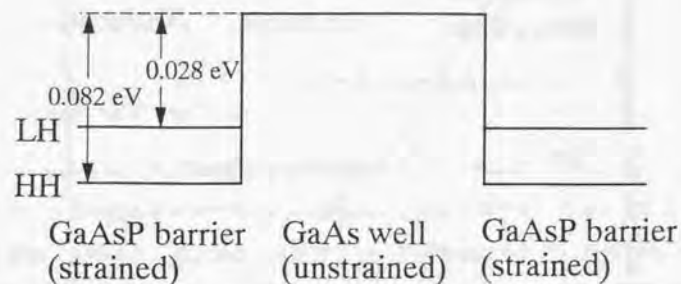


図 2.8 図 2.7 に示した LH サブバンド準位を計算するのに対象とした GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造における価電子帯のバンドラインアップ。

第3章

光変調反射分光法

3.1 光変調反射分光法の特長

本研究で用いる光変調反射分光 (photoreflectance: PR) 法は変調分光法の一つで、反射分光を行う際に別の光 (多くの場合レーザー光) を変調用の励起光として用いて、光を照射したときと照射しないときの反射率の変化のスペクトルを測定する方法である。光変調反射分光法における励起光の役割は、後述するように、自由キャリアを生成して図 3.1 に示すように、表面電場を変調することにある。したがって、原理的には外部から電圧を印加して試料中の電場を変調する電場変調反射分光 (electroreflectance: ER) 法と同様なものと考えることができる。

ER 法は通常の反射分光法と比較して、微分スペクトルが得られることから、エネルギー精度及び感度が非常に高いため、従来からバルク半導体のバンド構造の解明にその威力を発揮してきた [34,35]。しかしながら、ER 法においては、試料に電場変調を加えるために電極を形成しなければならない。そのため、量子井戸構造や超格子構造を有する半導体の評価に対しては、何らかの形で試料に影響を与えてしまうという問題が生じてくる。(ER 法では電極を形成せずに電解液を用いる方法もあるが、この場合には低温測定を行えないという問題がある。)

これに対して、PR 法は試料に手を加えることを一切必要としない、いわゆる非破壊・非接触評価法である。このような理由から、最近、特に量子井戸構造や超格子構造における光学遷移の測定に対して PR 法が用いられることが多くなってきた [36]-[38]。

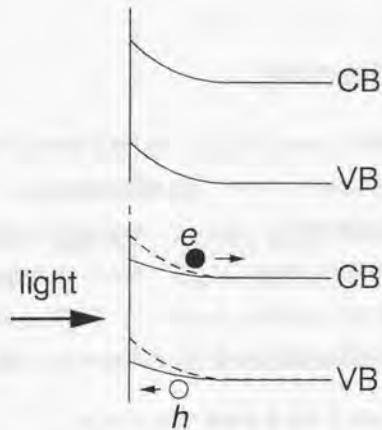


図 3.1 光変調反射分光法の変調機構。励起光によって自由キャリアが生成され、表面電場が変調される。原理的には電場変調反射分光法と同じである。

PR 法は ER 法と比較した場合だけでなく、他の広く用いられている光学的手法と比較した場合においても多くの利点がある。

フォトルミネッセンス (photoluminescence: PL) 法は半導体の光学的評価を行うのに最も広く用いられ、極めて有力な評価手段である。しかしながら、通常の場合、最も低いエネルギーの光学遷移のみがその対象となるため、例えば、量子井戸構造における高次の光学遷移を観測するには適していない。また、フォトルミネッセンス励起 (photoluminescence excitation: PLE) 分光法の場合、試料の加工を行う必要がなく、高次の光学遷移も測定可能である点は PR 法と同様であるが、一般に低温で測定を行う必要がある。これに対して、PR 法の場合は室温においても光学遷移をはっきりと観測することができる。また透過分光法や光電流法のような吸収に関する量を測定する方法では基板を薄くしたり、電極を形成したり、不純物ドーピングを行ったりといった試料の加工を必要としたり、吸収量を増やすために多重量子井戸構造を作成する必要があり、PR 法に比べて対象とする試料が限られる。

本研究ではこのような特長を持つ PR 法を用いて、半導体歪ヘテロ構造についての検討を行った。

本研究で用いた PR 法の光学系を図 3.2 に示す。測定する試料によって用いるレーザと検出器が若干異なるが基本的には同様の光学系を用いている。出力 300 W のハロゲンランプからの白色光を分光器 (日本分光 CT-50C, 600 ℓ/mm , ブレーズ波長 1 μm) によって単色光にして、反射測定のための光源としている。 ΔR に関する情報はロックインアンプによって、 R に関する情報はデジタル電圧計によって測定し、 GPIB を介してコンピュータに取り込んでいる。分光器の波長駆動もコンピュータによって行っている。

3.2 光変調反射分光法の原理

3.2.1 光変調反射分光法の変調機構

PR 法では光励起によって生成されたキャリアが表面電場を変調し、その際の反射率の変化を測定する。したがって、電場変調によってどの様に反射率が変化するかを記述でき

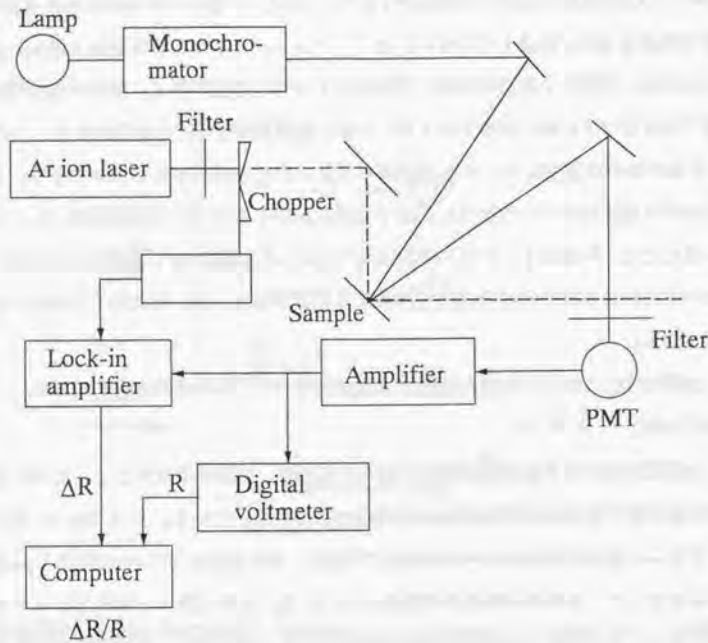


図 3.2 光変調反射分光法の光学系。

ればよい。

ただし、PR 法の変調機構には電場変調機構以外にもいくつかの機構があると考えられている。一つは光照射に伴う温度変化によって反射率が変化するという説明である。Nilsson [39] は PR 法の主要な変調機構は電場変調によるものの、温度変調反射分光法 (thermoreflectance) と同様の効果も含まれているとしている。Gay と Klauder [40] は PR 法の主要な変調機構は光励起によって生成されたキャリアによるバンド・フィリングのためにバンド間遷移に対する有効状態密度が変化することによるとしている。しかし、この説明は Nahory と Shay [41] が GaAs の Λ_3 - Λ_1 間における遷移を観測したことから否定されている。さらに、Nahory と Shay [41] は *n* 型と *p* 型の GaAs について実験を行い、どちらの場合でも PR スペクトルの符号が同じであることから、電場変調は Demmer field (電子と正孔の移動度の違いによって生じる電場) によるものではなく、自由キャリアによって表面電荷が打ち消されるために起こると結論している。また Albers [42] は PR の変調機構として自由キャリアの励起子に対する遮蔽効果の影響を問題にしている。

それらの説明に対して、Aspnes [43] は試料を電解液中に入れ、表面電場を制御しながら PR 測定を行うという巧妙な方法によって、電場変調が主要な変調機構であることを明らかにしている。

以下では PR 法の主要な変調機構は電場変調にあるとして、電場変調による反射率変化の機構について記述を行う。

3.2.2 定性的議論

結晶中に電場 E を印加すると誘電関数 ϵ が変化する。この誘電関数の変化分 $\Delta\epsilon(E)$ は次のように生じると考えられる。まず、結晶中の電場 E が空間的に一様であるとする、摂動ハミルトニアンは $H' = eE \cdot r$ となる。この摂動ハミルトニアンは電子を加速する原因となり、電場方向に対して結晶の並進対称性を失わせることになる [44]。したがって、電場方向に対して運動量はもはや良い量子数ではなくなり、摂動のないときのブロッホ関数が混合を起こすようになる。別の見方をすれば、光学遷移における始状態と終状態の運動量をあいまいにするとはいえる。その結果、電場のある状態とない状態とでは吸収係数

が変化し、それが反射率の変化として観測される。

3.2.3 摂動論による取り扱い

ここでは、電場 E が弱い場合の $\Delta R/R$ の表式を Aspnes と Rowe の論文 [45] に基づいて紹介する。 $\varphi_{nk}(\mathbf{r})$ を結晶中の電子状態を表す Bloch 関数とする。 $\varphi_{nk}(\mathbf{r})$ は次の Schrödinger 方程式を満足する。

$$H_0\varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t} \quad (3.1)$$

ただし、 H_0 は摂動のない場合の Hamiltonian である。また、 $E_{nk} = \hbar\omega_{nk}$ は状態 $\varphi_{nk}(\mathbf{r})$ のエネルギーである。空間的に一様な dc 電場を時間に依存した摂動項として表すと

$$H_1 = eE_1 \cdot \mathbf{x}e^{i\eta t} \quad (3.2)$$

となる。また、反射測定を行うための入射光を表す光子場は摂動項として

$$H_+ + H_- = eE_2 \cdot \mathbf{x} \left(e^{-i\omega_+ t} + e^{i\omega_- t} \right) \quad (3.3)$$

と表される。ただし、

$$E_{\pm} = \hbar\omega_{\pm} = \hbar\omega \pm i\Gamma \quad (3.4)$$

である。ここで、電場 E_1 と E_2 は実数に選ぶことにする。さらに、パラメータ η および Γ は正に選んでおく。こうすると $t \rightarrow -\infty$ の場合、摂動のない状態となる。一電子状態 $\varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t}$ の時間発展を記述する、時間に依存した波動関数 $\psi_{nk}(\mathbf{r}, t)$ は次のように定義される。

$$\begin{aligned} (H_0 + H_1 + H_+ + H_-)\psi_{nk}(\mathbf{r}, t) &= (H_0 + eE_1 \cdot \mathbf{x}e^{i\eta t} \\ &+ eE_2 \cdot \mathbf{x}e^{-i\omega_+ t} + eE_2 \cdot \mathbf{x}e^{i\omega_- t})\psi_{nk}(\mathbf{r}, t) \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{nk}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.5)$$

ただし、

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \psi_{nk}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t} \quad (3.6)$$

である。この波動関数 $\psi_{nk}(\mathbf{r}, t)$ を摂動項によって級数展開し、その波動関数をもとに誘電関数の変化 $\Delta\epsilon$ を求めると (付録 C 参照)

$$\Delta\epsilon(E, \Gamma, E) = \frac{1}{3E^2} \left(\hbar\Omega \frac{\partial}{\partial E} \right)^3 E^2\epsilon(E, \Gamma) \quad (3.7)$$

となる。ただし、 ϵ は摂動のないときの誘電関数で、 Ω は

$$\begin{aligned} (\hbar\Omega)^3 &= \frac{1}{8}e^2(\mathbf{E} \cdot \nabla_k)^2 E \\ &= e^2|\mathbf{E}|^2\hbar^2/8\mu_{||} \end{aligned} \quad (3.8)$$

で与えられる。(3.8) 式中の $\mu_{||}$ は電場方向の還元質量である。さらに、誘電率の変化 $\Delta\epsilon$ は反射率の相対変化 $\Delta R/R$ と次のように関係づけられる [44]。

$$\Delta R/R = \text{Re}[C_s C_{ex} C_{in} \Delta\epsilon] \quad (3.9)$$

ただし、 C_s は試料と雰囲気境界に対する Seraphin 係数 [46] によって書き表される因子、 C_{ex} は電子と正孔のクーロン相互作用を表す因子 [47]、 C_{in} は摂動電場の空間的不均一性から生じる因子 [48] である。

特異点近傍のバンドの形状を放物線であると仮定すると、(3.7)、(3.9) 式より

$$\Delta R/R = \text{Re}[C e^{i\theta} (E - E_g + i\Gamma)^{-n}] \quad (3.10)$$

となる。ここで、 n はバンドの次元性に対応して $n = 5/2$ (3次元)、 $n = 3$ (2次元)、 $n = 7/2$ (1次元) となる。また、 $n = 2$ は励起子遷移の場合の一次微分 [44] に対応している。

3.2.4 光変調反射分光法の量子井戸構造への適用

これまで、バンド間遷移に対する電場変調の効果に基づいて議論を行っていた。この議論はバルク結晶に対しては十分成り立つが、量子井戸構造においては励起子の束縛エネルギーが大きいので、励起子遷移の存在を無視できないと考えられる。実際に、このことに関して、Shanabrook 等 [49] は低温における多重量子井戸の PR 測定と PLE 測定を比

較することによって、PR 測定によって得られる遷移エネルギーはバンド間遷移ではなく励起子遷移に対応していることを示した。

この結果は、本研究においても重要な意味をもつので、実際に確認を行った。用いた試料の構造を図 3.3 に示す。表面側から 25, 50, 75, 100 Å の GaAs 井戸層が 500 Å の $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 障壁層にはさまれた量子井戸構造である。この試料についての PR, PL, PLE の測定結果

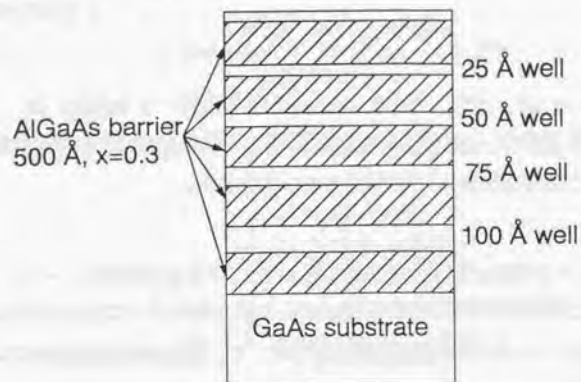


図 3.3 GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 量子井戸構造. 表面側から 25, 50, 75, 100 Å の GaAs 井戸層が 500 Å の $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.3$) 障壁層にはさまれている。

を図 3.4 に示す。PR スペクトル中の矢印はローレンツ関数の一次微分 [49] を使って求めた遷移エネルギーである。PL スペクトル中に示した ΔE の値は PR 測定によって求めた遷移エネルギーと PL のピークエネルギーとのエネルギー差である。PLE 測定は 50, 75 Å の量子井戸についてだけ行ったが、このピークエネルギーは PR 測定によって得られた遷移エネルギーと一致する。このことから、PR 測定によって求まる遷移エネルギーは励起子遷移に対応していることがわかる。さらに、PL 測定においてはピークエネルギーがストークスシフトしていることがわかる。このストークスシフトは井戸幅のゆらぎによって生じた状態密度の低エネルギー側の裾で PL 遷移が起きていることに対応していると考えられる。このように、PL のピークエネルギーのみから遷移エネルギーを求める場合は注意する必要があることがわかる。

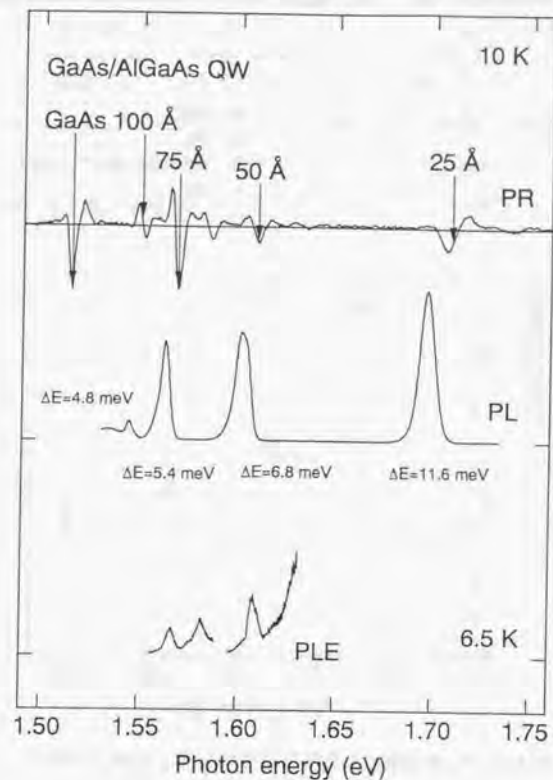


図 3.4 GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 量子井戸構造の光変調反射スペクトルおよびフォトルミネッセンススペクトルとフォトルミネッセンス励起スペクトル。

ところで、このストークスシフトが井戸幅のゆらぎに起因していることは次のことから確かめられる。図 3.5 は PR および PL から求めた遷移の半値幅と PL のストークスシフトの井戸幅依存性を示している。なお、PR 測定から求めた半値幅はローレンツ関数の

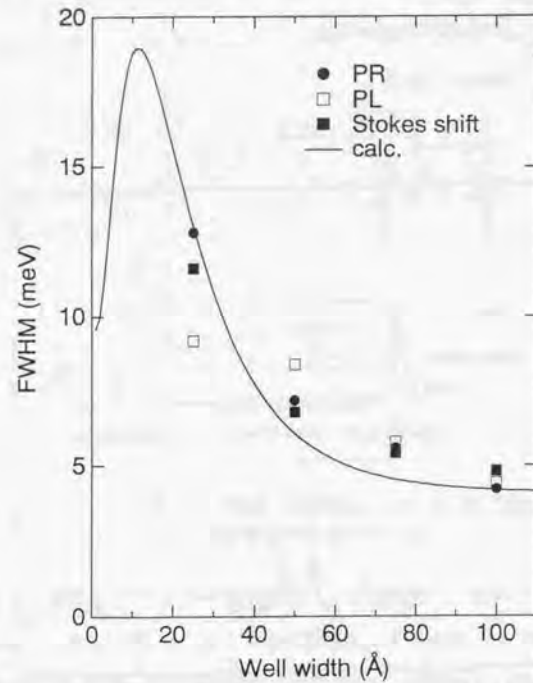


図 3.5 PR および PL から求めた遷移の半値幅と PL のストークスシフトの井戸幅依存性.

の一次微分を用いた結果得られたものである。この図からわかるように、3 者の値は 75, 100 Å の量子井戸については非常に良く一致している。このことから、PR スペクトルを解析する場合、ローレンツ関数の一次微分を適用することは正しいことが確認される。また、ストークスシフトの井戸幅依存性が PR 測定から得られた半値幅の井戸幅依存性と良く一致することから、ストークスシフトの原因が井戸幅のゆらぎにあることがわかる。た

だし、ここで、PL の半値幅が PR の半値幅と 25, 50 Å の量子井戸について一致していないという点を注意しておきたい。これは PL は状態密度の低エネルギーの裾で起こるので、その半値幅は実際の広い実空間範囲での井戸幅のゆらぎを反映していないためと考えられる。このように、ストークスシフトの大きい PL スペクトルから得られる半値幅によって井戸幅のゆらぎ等を議論するのは正しくないことがわかる。図 3.5 には、スペクトルの半値幅が井戸幅のゆらぎに起因するとして、その井戸幅依存性を計算した結果を実線で示してある。PR の半値幅および PL のストークスシフトはこの計算結果と良く一致しているが、PL の半値幅の井戸幅依存性は一致していない。

第4章

X線回折による構造解析

量子井戸構造におけるエネルギー準位を計算する場合、井戸幅、混晶組成等の構造に関するパラメータを正確に知る必要がある。本研究においては、これらの構造に関するパラメータを決定するためにX線回折を用いた。本章では、本研究で行った動力的理論に基づく構造解析の手法について述べることにする。

4.1 歪薄膜に対する回折条件

まず、本研究で取り扱う歪薄膜に対する回折条件を明らかにしておく。ここでは、(001)基板上に歪薄膜を成長した場合について考えることにする。

(hkl)面をX線回折測定を行う対象とすると、その面間隔 d は、基板については

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (4.1)$$

で与えられる。ただし、ここで a は基板の格子定数である。

一方、歪層の面内方向の格子定数が a_{\parallel} 、面垂直方向の格子定数が a_{\perp} であり、かつ基板の格子定数と

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{a} - 1 \quad (4.2)$$

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{a} - 1 \quad (4.3)$$

という関係にあるとき、 (hkl) 面の面間隔 $d + \Delta d$ は

$$d + \Delta d = \frac{a}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{(1 + \varepsilon_{\parallel})^2} + \frac{l^2}{(1 + \varepsilon_{\perp})^2}}} \quad (4.4)$$

で与えられる。

このとき、基板及び歪層の (hkl) 面に対するBragg角 θ_B 及び $\theta_B + \Delta\theta$ は、それぞれ

$$2d \sin \theta_B = \lambda \quad (4.5)$$

$$2(d + \Delta d) \sin(\theta_B + \Delta\theta) = \lambda \quad (4.6)$$

となる。ただし、 λ はX線の波長である。

(4.1)(4.4)(4.5)(4.6)式より

$$\left\{ \frac{h^2 + k^2}{(1 + \varepsilon_{\parallel})^2} + \frac{l^2}{(1 + \varepsilon_{\perp})^2} \right\} \sin^2 \theta_B = (h^2 + k^2 + l^2) \sin^2(\theta_B + \Delta\theta) \quad (4.7)$$

という関係が導かれる。

次に、歪の影響によって歪薄膜における (hkl) 面が基板の (hkl) 面に対して、どれだけ傾くかについて考える。

(001)面と (hkl) 面とのなす角 φ は、基板の場合には

$$\cos \varphi = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (4.8)$$

となる。

一方、歪層の場合には、(001)面と (hkl) 面とのなす角 $\varphi + \Delta\varphi$ は

$$\cos(\varphi + \Delta\varphi) = \frac{l(1 + \varepsilon_{\parallel})}{\sqrt{(h^2 + k^2)(1 + \varepsilon_{\perp})^2 + l^2(1 + \varepsilon_{\parallel})^2}} \quad (4.9)$$

で与えられる。

したがって、(4.7)(4.9)式より、導かれるような $\Delta\theta$ 、 $\Delta\varphi$ の分だけ、基板の回折角からずれた角度が、歪層の回折角となる。図4.1にその様子を示す。この図に示すように、測定する際のX線の入射方向を逆にすることで、回折角のずれが $\Delta\theta + \Delta\varphi$ または $\Delta\theta - \Delta\varphi$

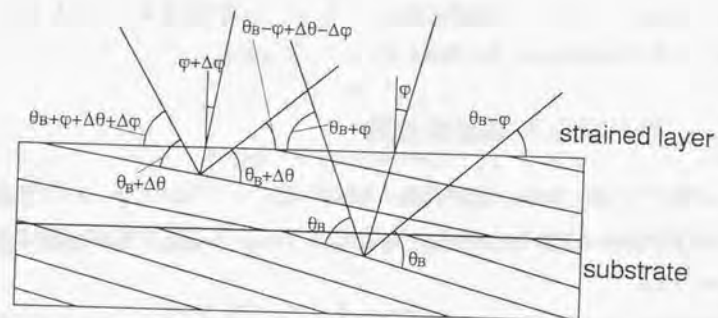


図4.1 歪薄膜に対する回折条件。基板に対する回折角が、表面に対し $\theta_B + \varphi$ 、 $\theta_B - \varphi$ であるのに対して、歪薄膜に対する回折角は $(\theta_B + \varphi) + (\Delta\theta + \Delta\varphi)$ 、 $(\theta_B - \varphi) + (\Delta\theta - \Delta\varphi)$ となる。

なることがわかる。このように基板表面に対する入射角と回折角が等しくない非対称反射のX線回折を2方向から行うことにより、Bragg角のずれ $\Delta\theta$ と (hkl) 面の回転角 $\Delta\varphi$ がそれぞれ求められる。

また、(4.9)式を変形すると

$$(1 + \varepsilon_{\perp})^2 = \frac{l^2 \tan^2(\varphi + \Delta\varphi)}{h^2 + k^2} (1 + \varepsilon_{\parallel})^2 \quad (4.10)$$

となり、(4.7)(4.10)式をまとめると

$$1 + \varepsilon_{\parallel} = \sqrt{\frac{h^2 + k^2}{h^2 + k^2 + l^2}} \frac{\sin \theta}{\sin(\theta + \Delta\theta)} \frac{1}{\sin(\varphi + \Delta\varphi)} \quad (4.11)$$

$$1 + \varepsilon_{\perp} = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \frac{\sin \theta}{\sin(\theta + \Delta\theta)} \frac{1}{\cos(\varphi + \Delta\varphi)} \quad (4.12)$$

が得られる。したがって、実験的に求められた $\Delta\theta$ 、 $\Delta\varphi$ を代入することによって、歪層の面内方向及び面垂直方向の格子定数を求めることが出来る。

4.2 動力的X線回折理論

この節では、動力的X線回折理論の基礎的事項について述べた後、歪んだ結晶中における動力的X線回折理論の基本方程式となるTakagi-Taupin方程式の導出までを行うことにする。

動力的X線回折理論の基礎となるのはMaxwell方程式である。しかしながら、X線の波長は原子間距離と同程度であるために、物質を連続媒質とするような通常の巨視的な扱い方は出来ない[50]。したがって、まず、個々の荷電粒子によるX線の散乱から考え始める必要がある。ただし、付録Dに示すように、座標に依存する誘電率 ε を導入することで、X線に対してもMaxwell方程式を適用可能となる。

これからの議論においては、真電荷密度 ρ 及び真電流密度 j は存在しないものとし、物質の透磁率 μ を真空の場合と同じであると考えれば($\mu = \mu_0$)、取り扱うべきMaxwell方程式は

$$\text{rot} H = \frac{\partial D}{\partial t} \quad (4.13)$$

$$\text{rot} E = -\mu_0 \frac{\partial H}{\partial t} \quad (4.14)$$

$$\text{div} D = 0 \quad (4.15)$$

$$\text{div} H = 0 \quad (4.16)$$

となる。 D 及び H の時間依存性を

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -i\omega D \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -i\omega H \quad (4.18)$$

として、(4.14)式の両辺のrotをとり、(4.18)(4.13)(4.17)式を順番に代入していくと

$$\text{rot rot} E = \omega^2 \mu_0 D \quad (4.19)$$

となる。さらに、 $D = \varepsilon E = \varepsilon_0(1 + \chi)E$ であることから、

$$\text{rot rot} E = \frac{\omega^2}{c^2} (1 + \chi) E \quad (4.20)$$

となる。ただし、ここで、 χ は物質の電気感受率である。また、 $1/c = \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ という関係を用いた。

電磁波の電場 E は、結晶中においては電子密度の周期的分布によって変調を受けて

$$E(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} E_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{r}) \quad (4.21)$$

という形にフーリエ級数展開できる。ただし、

$$\mathbf{k}_{\mathbf{g}} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g} \quad (4.22)$$

で、 \mathbf{g} は結晶の逆格子ベクトルである。

次に、(4.21)式を用いて、(4.20)式の変形を行うことを考える。まず左辺の変形については

$$\begin{aligned} \text{rot rot} \{E_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{r})\} &= -\{\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \times (\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \times E_{\mathbf{g}})\} \exp(i\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{r}) \\ &= |\mathbf{k}_{\mathbf{g}}|^2 E_{\mathbf{g} \perp \mathbf{k}_{\mathbf{g}}} \exp(i\mathbf{k}_{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.23)$$

という関係を利用する。ただし、 $E_{g[\perp k_g]}$ は

$$E_{g[\perp k_g]} = -\frac{1}{|k_g|^2} \{k_g \times (k_g \times E_g)\} \quad (4.24)$$

で与えられ、 k_g に垂直な E_g の成分ベクトルを表す。

一方、右辺については

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{g'} \chi_{g'} \exp(i\mathbf{g}' \cdot \mathbf{r}) \quad (4.25)$$

という形にフーリエ級数展開できることを用いて

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \sum_{g'} \sum_{h'} \chi_{g'} \exp(i\mathbf{g}' \cdot \mathbf{r}) \mathbf{E}_{h'} \exp(i\mathbf{k}_{h'} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_g \sum_{h'} \chi_{g-h'} \mathbf{E}_{h'} \exp(i\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.26)$$

となることを利用する。ただし、 $k_g = g' + k_{h'}$ とした。これらの結果から (4.20) 式は

$$\sum_g \{ |k_g|^2 E_{g[\perp k_g]} - K^2 E_g - K^2 \sum_{h'} \chi_{g-h'} E_{h'} \} \exp(i\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r}) = 0 \quad (4.27)$$

と変形できる。ただし、 K は

$$K = \frac{\omega}{c} \quad (4.28)$$

で、真空中における X 線の波数を表す。ここで、 $\exp(-i\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r})$ を (4.27) 式にかけて、単位胞について \mathbf{r} で積分すると

$$|k_h|^2 E_{h[\perp k_h]} = K^2 E_h + K^2 \sum_{h'} \chi_{h-h'} E_{h'} \quad (4.29)$$

が得られる。これが、動力的回折理論の基本方程式となる。

Takagi [51,52] 及び Taupin [53,54] はこの基本方程式が歪んだ結晶中においてどのように表されるかを独立に導き出している。以下では、その方程式の導出を行う。

4.2.1 Takagi-Taupin 方程式の導出

まず、歪のない完全結晶を考える。この場合には、電気感受率は

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_g \chi_g \exp(i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \quad (4.30)$$

という形にフーリエ級数展開できる。一方、歪んだ結晶中における電気感受率 χ' は、歪が十分小さければ

$$\chi'(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_0)) \quad (4.31)$$

で与えられる。ただし、 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ は座標 \mathbf{r} における原子の変位を表すベクトルであり、 \mathbf{r}_0 は、歪によって \mathbf{r} へと変位した原子がもともといた位置を示すベクトルである。(4.30) 式を (4.31) 式に代入することによって

$$\chi'(\mathbf{r}) = \sum_g \chi_g \exp\{i\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_0))\} \quad (4.32)$$

となる。しかしながら、歪んだ結晶が完全な周期性をもたなければ、(4.32) 式に示すようなフーリエ級数展開はもはや出来ない。そのため、(4.32) 式は何らかの修正を受ける必要がある。その修正の方法として、 χ_g が \mathbf{r} に依存すると考えることにする。すなわち、

$$\chi'(\mathbf{r}) = \sum_g \chi'_g(\mathbf{r}) \exp\{i\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_0))\} \quad (4.33)$$

とする。ただし、ここで、 $\chi'_g(\mathbf{r})$ の空間的変化は X 線の波長と比較して、十分ゆるやかなものであると考えている。また、逆格子ベクトルはもはや空間で一定ではなくなるので、 \mathbf{r} 近傍で定義される局所逆格子ベクトルという概念を次のように導入する (付録 E 参照)。

$$\mathbf{g}' = \mathbf{g} - \text{grad}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}_0)) \quad (4.34)$$

今の場合、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}$ は X 線の波長に比べれば、空間的に十分ゆるやかに変化しているものとする。

Takagi [51,52] や Taupin [53,54] の記述と合わせるために、以下では電気変位 D に関する式を導くことにする。

まず、

$$D = \epsilon_0(1 + \chi')E \quad (4.35)$$

という関係を用いて、(4.20) 式を D に関する式に変形する。 $\chi' \ll 1$ であることから

$$\text{rot rot}\{(1 - \chi')D\} = K^2 D \quad (4.36)$$

となる。さらに

$$\text{rot rot } D = -\nabla^2 D + \text{grad div } D \quad (4.37)$$

となることと、(4.15)式より

$$\nabla^2 D + K^2 D = -\text{rot rot } \chi' D \quad (4.38)$$

が得られる。

歪んだ結晶中における D についても (4.32) 式と同様に

$$D(\mathbf{r}) = \sum_g D'_g(\mathbf{r}) \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} \quad (4.39)$$

という形に展開する。ここでは、 $D'_g(\mathbf{r})$ も空間的にゆるやかに変化しているものと考え、(4.39)式を用いると

$$\begin{aligned} \nabla^2 D(\mathbf{r}) = \sum_g \{ & \nabla^2 D'_g - i D'_g \nabla^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) + 2i(\mathbf{k}'_g \cdot \nabla) D'_g \\ & - |\mathbf{k}'_g|^2 D'_g \} \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

となる。ただし、

$$\mathbf{k}'_g = \mathbf{k}_g - \text{grad}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) \quad (4.41)$$

である。ここで、 D'_g 及び $\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}$ は空間的にゆるやかに変化しているから、その2次微分に関しては無視すると、(4.40)式は

$$\nabla^2 D(\mathbf{r}) = \sum_g \{ 2i(\mathbf{k}'_g \cdot \nabla) D'_g - |\mathbf{k}'_g|^2 D'_g \} \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} \quad (4.42)$$

と近似できる。

また、(4.33)式と(4.39)式より

$$\begin{aligned} \chi'(\mathbf{r}) D(\mathbf{r}) &= \sum_{g'} \sum_{h'} \chi'_{h'}(\mathbf{r}) \exp\{i\mathbf{h}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u})\} D'_{g'}(\mathbf{r}) \exp\{i(\mathbf{k}_{g'} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g}' \cdot \mathbf{u})\} \\ &= \sum_g \sum_{g'} \chi'_{g-g'}(\mathbf{r}) D'_{g'}(\mathbf{r}) \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} \end{aligned} \quad (4.43)$$

となるから、

$$\begin{aligned} \text{rot rot } \{ \chi'(\mathbf{r}) D(\mathbf{r}) \} &= \sum_g [\text{rot rot} (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) + i \nabla^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) \\ &\quad - i \{ (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) \cdot \nabla \} \nabla (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) + i \mathbf{k}'_g \cdot \nabla (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) \\ &\quad - i (\mathbf{k}'_g \cdot \nabla) (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) + i \mathbf{k}'_g \times \{ \text{rot} (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) \} \\ &\quad - \mathbf{k}'_g \times \{ \mathbf{k}'_g \times (\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}) \}] \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} \end{aligned} \quad (4.44)$$

が得られる。ここでも、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}$ の2次微分に関しては無視し、さらに χ'_g が微小量であることを考慮して、 $\sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'}$ の1次以上の微分についても無視すると(4.44)式は

$$\text{rot rot } \{ \chi'(\mathbf{r}) D(\mathbf{r}) \} = \sum_g \sum_{g'} |\mathbf{k}'_g|^2 \chi'_{g-g'} D'_{g'} \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} \quad (4.45)$$

と近似できる。ただし、

$$D'_{g'[\perp \mathbf{k}'_g]} = -\frac{1}{|\mathbf{k}'_g|^2} \{ \mathbf{k}'_g \times (\mathbf{k}'_g \times D'_{g'}) \} \quad (4.46)$$

である。

したがって、(4.38)(4.42)(4.45)式より

$$\sum_g \{ 2i(\mathbf{k}'_g \cdot \nabla) D'_g + (K^2 - |\mathbf{k}'_g|^2) D'_g + |\mathbf{k}'_g|^2 \sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'[\perp \mathbf{k}'_g]} \} \exp\{i(\mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u})\} = 0 \quad (4.47)$$

となる。ここで、(4.27)式から(4.29)式を導いたのと同様の手続きにより、

$$2i(\mathbf{k}'_g \cdot \nabla) D'_g = -(K^2 - |\mathbf{k}'_g|^2) D'_g - |\mathbf{k}'_g|^2 \sum_{g'} \chi'_{g-g'} D'_{g'[\perp \mathbf{k}'_g]} \quad (4.48)$$

が得られる。

さらに、波数ベクトル \mathbf{k}_0 をもつ入射波と、波数ベクトル \mathbf{k}_H をもつ回折波のみが存在するという2波近似を用いると、

$$2i(\mathbf{k}'_0 \cdot \nabla) D'_0 = -K^2 \chi'_0 D'_0 - K^2 \chi'_{-H} D'_H \quad (4.49)$$

$$2i(\mathbf{k}'_H \cdot \nabla) D'_H = -K^2 \chi'_H D'_0 - K^2 \chi'_0 D'_H - (K^2 - |\mathbf{k}'_H|^2) D'_H \quad (4.50)$$

となる。ただし、 $D'_{g[\perp \mathbf{k}'_g]} \cong D'_g$ 、 $|\mathbf{k}'_g|^2 \cong K^2$ であることを用いた。なお、この表式は Takagi [51,52] が最終的に導き出した表式とは多少異なっていることに注意しておく。

4.3 動力的 X線回折理論の超格子構造・量子井戸構造への適用

前節で導出した Takagi-Taupin 方程式に基づいて、超格子構造や量子井戸構造のようないくつかの層からなる構造に対して、動力的 X線回折理論を適用する。なお、以下の議論は Wie 等の論文 [55] によるものであるが、論文中にいくつか間違いがあるので、その部分については訂正してある。Takagi-Taupin 方程式を扱いやすい形式にすると

$$i\frac{\lambda}{\pi}s_0 \cdot \nabla D_0(\mathbf{r}) = \psi_0 D_0(\mathbf{r}) + \psi_{-H} D_H(\mathbf{r}) \quad (4.51)$$

$$i\frac{\lambda}{\pi}s_H \cdot \nabla D_H(\mathbf{r}) = \psi_0 D_H(\mathbf{r}) + \psi_H D_0(\mathbf{r}) - \alpha_H D_H(\mathbf{r}) \quad (4.52)$$

となる。ただし、 $D_{0,H}(\mathbf{r})$ は入射波および回折波の複素振幅、 $s_{0,H}$ は入射波及び回折波の向きを示す単位ベクトルである。また、 $\psi_{0,H} = -(e^2/4\pi\epsilon_0 mc^2)(\lambda^2/\pi)(F_{0,H}/V)$ で、 $F_{0,H}$ は入射波と回折波に対する構造因子、 V は単位胞の体積である。 α_H は

$$\alpha_H = 1 - \frac{|\mathbf{k}_H|^2}{K^2} \quad (4.53)$$

で、近似的に $\alpha_H \sim -2(\theta - \theta_B) \sin 2\theta_B$ で与えられる [56]。

深さ方向に依存した散乱振幅は

$$i\frac{dX}{dA} = P(1+ik)X^2 - 2(y+ig)X + P(1+ik) \quad (4.54)$$

という微分方程式で書き表すことができる (付録 F 参照)。ただし、

$$X = D_H(\mathbf{r})/\sqrt{b}D_0(\mathbf{r}) \quad (4.55)$$

$$b = |\gamma_0/\gamma_H| \quad (4.56)$$

で、 $\gamma_{0,H}$ は表面内向き、垂直方向に対する入射波と回折波の方向余弦である。また、

$$A = (\pi|\psi'_H|/\lambda\sqrt{|\gamma_0\gamma_H|})z \quad (4.57)$$

で z は深さを表す。その他の定義は

$$\psi_{0,H} = \psi'_{0,H} + i\psi''_{0,H} \quad (4.58)$$

$$g = (1+b)\psi''_0/2|\psi'_H|\sqrt{b} \quad (4.59)$$

$$k = \psi''_H/\psi'_H \quad (4.60)$$

$$y = [(1+b)\psi'_0 - b\alpha_H]/2|\psi'_H|\sqrt{b} \quad (4.61)$$

である。(4.54) 式を解析的に積分すると

$$X(A) = \frac{sX_0 + i(B + CX_0) \tan[s(A - A_0)]}{s - i(C + BX_0) \tan[s(A - A_0)]} \quad (4.62)$$

となる (付録 G 参照)。ただし、

$$X(A_0) = X_0 \quad (4.63)$$

$$B = -P(1+ik) \quad (4.64)$$

$$C = y + ig \quad (4.65)$$

$$s = \sqrt{C^2 - B^2} \quad (4.66)$$

である。ただし、 P は偏光因子で

$$P = \begin{cases} 1 & (\sigma \text{ 偏光}) \\ \cos 2\theta_B & (\pi \text{ 偏光}) \end{cases} \quad (4.67)$$

で与えられる。

超格子構造や、量子井戸構造のようにいくつかの層からなる構造に対して (4.62) 式を適用する場合には

$$X_j = \frac{s_j X_{j-1} + i(B_j + C_j X_{j-1}) \tan\{s_j(A_j - A_{j-1})\}}{s_j - i(C_j + B_j X_{j-1}) \tan\{s_j(A_j - A_{j-1})\}} \quad (4.68)$$

という漸化式を用いて、次々に積分を実行していけばよい。最終的に、X線の反射強度は $|X_n|^2$ によって求められる。

ただし、この漸化式は複素数なので実際には扱いにくい。そこで、付録 H に実数部と虚数部に分けた表式をまとめておく。

なお、歪の効果は α_H によって考慮されている。反射面が基板に対して φ だけ傾いていて基板に対する入射角が $\theta \pm \varphi$ の場合には

$$\begin{aligned} \alpha_H = & 4(1 - \epsilon_{\parallel}) \sin \theta_B \sin^2 \varphi \{(1 - \varphi) \sin \theta_B - \sin \theta\} \\ & + 4(1 - \epsilon_{\perp}) \sin \theta_B \cos^2 \varphi \{(1 - \varphi) \sin \theta_B - \sin \theta\} \\ & \pm 4(\epsilon_{\perp} - \epsilon_{\parallel}) \sin \theta_B \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi \end{aligned} \quad (4.69)$$

である。また、対称反射 ($\varphi = 0$) の場合には表式はもっと簡単になって

$$\alpha_H = 4(1 - \epsilon_{\perp}) \sin \theta_B \{(1 - \epsilon_{\perp}) \sin \theta_B - \sin \theta\} \quad (4.70)$$

となる。なお、この α_H の表式はいくつかの論文 [55, 57] で与えられているが、歪の影響を正しく考慮した表式はない。特に Wie 等の表式 [55] は正しくないので注意が必要である。

第5章

GaAs/GaAsP 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量

5.1 序

GaAs_{1-x}P_x 歪ヘテロ構造については Matthews と Blakeslee [1] がミスフィット転位の無い GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪超格子を作製するのに成功して以来、多くの研究がなされてきた [5]。この系のバンド不連続量に関する研究もその重要性から種々の方法によって研究されてきた。しかしながら、この系が歪系であるにもかかわらず、バンド不連続量の歪に対する依存性や混晶組成に対する依存性等は明らかにされていない。この章では対象を GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸に絞り、この系におけるバンド不連続量及びその P 組成に対する依存性を研究した結果について述べる。

PR 法では、PL 法と異なり、エネルギー的に最も低い光学遷移だけでなく、より高エネルギーの光学遷移も観測することができる。実際、高い準位のエネルギー位置はバンド不連続量に対して敏感であるため、エネルギー的に高い光学遷移に関する情報はバンド不連続量を決定する上で有用である。さらに障壁層のバンドギャップに対応する光学遷移も観測できるため、文献値を用いずに直接障壁の高さを得ることができる。以上のような PR 法の利点を活かしてこの研究を行った。

5.2 実験

本研究で用いた GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸はすべて MOVPE 法により成長を行った [58]。GaAs(100) 基板上に成長温度 650°C, 成長圧力 60 Torr で成長した。原料ガスには Ga(CH₃)₃, AsH₃, PH₃ を用いた。井戸幅および P 組成はそれぞれ 5-20 nm および 0.15-0.23 である。

量子井戸構造の決定には X 線二結晶法を用いた。図 5.1 は CuKα₁ 線を用いて得られた (400) ロッキングカーブの一例である。図中, 上の曲線は測定によって得られたロッキングカーブを, 下の曲線は動力学的回折理論に基づいて得られた理論曲線を示している。おおざっぱに言って, 包絡線のピーク的位置が GaAs_{1-x}P_x 障壁層中の P 組成に関係し, ピーク間の間隔が GaAs 井戸層及び GaAs_{1-x}P_x 層の厚さの和に関係している。このようなことから, この試料に対しては井戸層の厚さ 15.9 nm, 障壁層の厚さ 44.0 nm, P 組成 0.23 と求めることができる。なお, この計算に用いたパラメータを表 5.1 にまとめておく。ここで, GaAs(100) 基板上にコヒーレントに成長した GaAs_{1-x}P_x 層では面垂直方向の格子定数は

$$a_{\text{GaAsP}}^{\perp} = a_{\text{GaAsP}} \left(1 - \frac{2c_{12}}{c_{11}} \frac{a_{\text{GaAs}} - a_{\text{GaAsP}}}{a_{\text{GaAsP}}} \right) \quad (5.1)$$

で与えられることを用いた。ただし, a_{GaAs} , a_{GaP} 及び a_{GaAsP} はそれぞれ GaAs, GaP 及び GaAs_{1-x}P_x の歪んでいない状態での格子定数である。なお, 表 5.1 に載せた GaAs_{1-x}P_x の格子定数の表式は Straumanis 等 [59] の結果に 2 次式をフィッティングさせることによって求めたものである。c₁₁ および c₁₂ は GaAs_{1-x}P_x の弾性定数で

$$c_{11} = \frac{x a_{\text{GaP}} c_{11}^{\text{GaP}} + (1-x) a_{\text{GaAs}} c_{11}^{\text{GaAs}}}{a_{\text{GaAsP}}} \quad (5.2)$$

$$c_{12} = \frac{x a_{\text{GaP}} c_{12}^{\text{GaP}} + (1-x) a_{\text{GaAs}} c_{12}^{\text{GaAs}}}{a_{\text{GaAsP}}} \quad (5.3)$$

で与えられる。ただし, c_{ij}^{GaAs} および c_{ij}^{GaP} はそれぞれ GaAs および GaP の弾性定数である。X 線の原子散乱因子には Doyle と Turner [63] が相対的 Hartree-Fock 法による波動関数に基づいて計算した解析関数を利用した。原子散乱因子の分散補正項には表 5.1 に載せた値を用いた [62]。

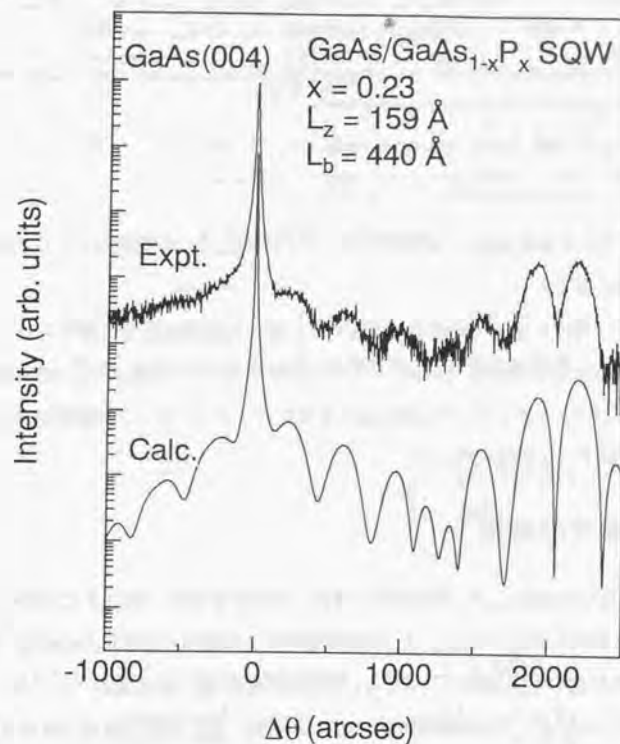


図 5.1 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造の X 線ロッキングカーブ。

表 5.1 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造の X 線回折ロッキングカーブの計算に用いたパラメータ.

Parameters	GaAs	GaP	GaAs _{1-x} P _x
$a(\text{\AA})$	5.65325 [59]	5.4509 [59]	$5.6532 - 0.2174x + 0.0151x^2$ [59]
$c_{11}(\times 10^{10} \text{ N/m}^2)$	11.88 [60]	14.12 [61]	see text
$c_{12}(\times 10^{10} \text{ N/m}^2)$	5.38 [60]	6.393 [61]	see text

	Ga	As	P
$\Delta f'$	-1.354 [62]	-1.011 [62]	0.283 [62]
$\Delta f''$	0.777 [62]	1.006 [62]	0.434 [62]

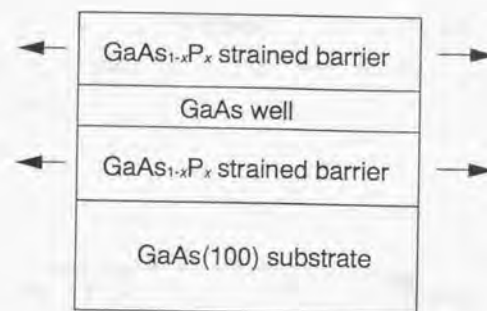
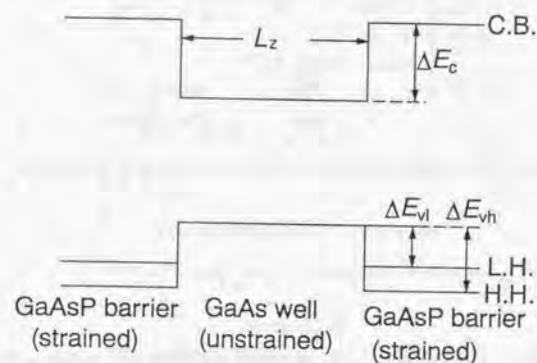
さらに、(511) 非対称反射 X 線回折によって GaAs_{1-x}P_x 障壁層がほとんど緩和していないことを確かめた。

このように、精密に試料の構造の決定を行った後、光変調反射分光測定を行った。試料からの反射光は光電子増倍管 (浜松ホトニクス R633) を用いて検出した。試料を変調するための光源には Ar イオンレーザ (488 nm) を用いた。チョッピング周波数は 210 Hz とした。PR 測定はすべて室温で行った。

5.3 結果及び考察

図 5.2 に GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸の試料の構造を、図 5.3 にそのバンドラインアップを模式的に示す。GaAs_{1-x}P_x 歪障壁層では 2 軸の引っ張り応力のため、図 5.3 に示すように電子-軽い正孔間のバンドギャップの方が電子-重い正孔間のバンドギャップよりも狭くなっている。ここで後の議論のために、伝導帯、重い正孔の価電子帯および軽い正孔の価電子帯のバンド不連続量をそれぞれ ΔE_c 、 ΔE_{vh} および ΔE_{vl} と定義する。

図 5.4 に GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸から得られる典型的な PR スペクトルを示す。この試料の井戸幅および P 組成はそれぞれ 15.9 nm および 0.23 である。この図から明らかのように $n=3$ までの量子準位に対応する光学遷移が明瞭に観測されている。また歪によって分裂している GaAs_{1-x}P_x 歪障壁層のバンドギャップに対応する遷移も観測されている。フィッティング曲線を得るために、非線形最小二乗法 [64] を用いた。

図 5.2 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸の試料構造.図 5.3 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造におけるバンドラインアップ.

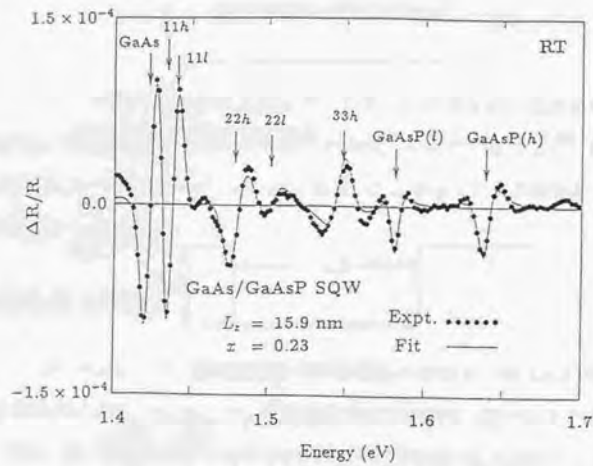


図 5.4 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸の PR スペクトル.

図 5.5 は GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造の PR スペクトルの井戸幅依存性を示したものである。これらの試料においては P 組成はほぼ 0.23 である。井戸幅が狭くなるにつれて、量子準位が次第に高エネルギー側へシフトし、観測される遷移の数も減っていくのがわかる。一方、GaAs_{1-x}P_x 歪障壁層のバンドギャップに対応した遷移は井戸幅が変化してもほとんどその位置を変えない。このことから図 5.5 中に示した光学遷移の同定が正しいことがわかる。

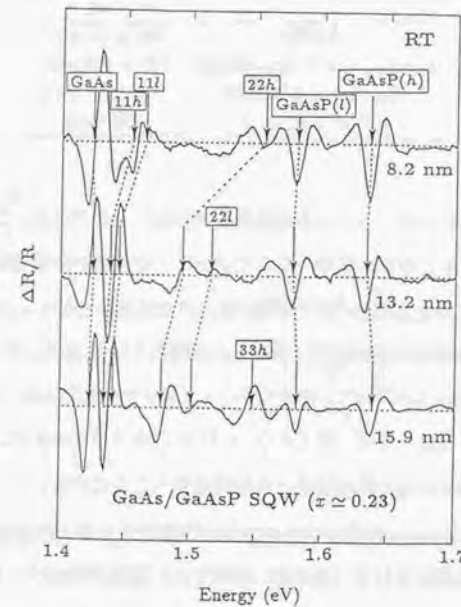


図 5.5 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸の PR スペクトルの井戸幅依存性.

今まで示してきた PR スペクトルから得られた結果を有効質量近似に基いた量子準位の

表 5.2 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸の量子準位の計算に用いたパラメータ.

	GaAs	GaP	GaAs _{1-x} P _x	
electron effective mass	m_0^*	0.067	0.17 [65]	linear interpolation
Luttinger parameters	γ_1	6.85 [66]	4.04 [67]	linear interpolation
	γ_2	2.10 [66]	0.53 [67]	linear interpolation

表 5.3 応力がゼロの場合の GaAs/GaP ヘテロ界面における価電子帯のバンド不連続量.

	ΔE_v
本研究	380 ± 80 meV
Katnani and Margaritondo	630 ± 150 meV
Gourley and Biefeld	600 ± 50 meV
Zhang <i>et al.</i>	390 meV

計算と比較することにより、バンド不連続量を求めることができる。この計算に用いたパラメータを表 5.2 にまとめる。なお、ここでは SO との結合の影響を考えていない。

その結果、図 5.6 に示すようなバンド不連続量の P 組成依存性が得られた。この図からわかるように、バンド不連続量は実験を行った組成の範囲内では P 組成に対してほぼ線形に依存していることがわかる。したがって、伝導帯のバンドオフセット比 $Q_c (= \Delta E_c / (\Delta E_c + \Delta E_{vh}))$ は、この組成範囲内では、ほぼ一定であり、 0.57 ± 0.05 と求められた。

次に、本研究の結果と他の研究結果との比較を行うことにする。

Katnani と Margaritondo [68] はシンクロトロン放射光を用いた光電子分光測定により、GaAs/GaP ヘテロ界面における（歪のない状態での）価電子帯のバンド不連続量を $\Delta E_v = 630 \pm 150$ meV としている。

また、Gourley と Biefeld [69] は GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪超格子について PLE 測定を行い応力がゼロの場合の GaAs/GaP 界面における価電子帯のバンド不連続量を $\Delta E_v = 600 \pm 50$ meV と見積もっている。

これらの結果と比較を行うために、本研究の結果から変形ポテンシャル理論に基づいて、

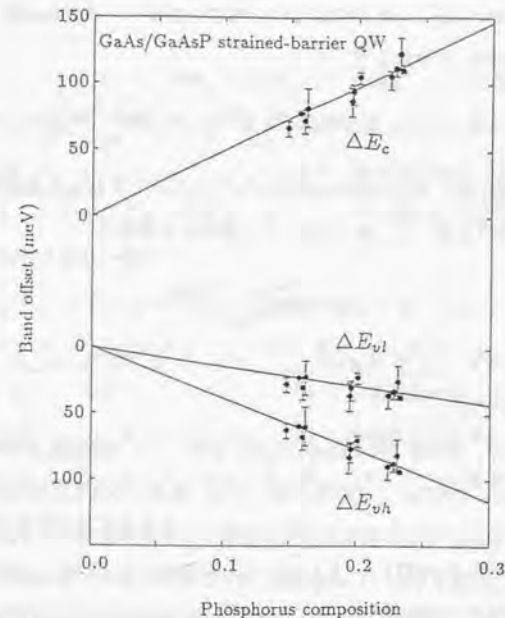
図 5.6 GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸のヘテロ界面におけるバンド不連続量.

表 5.4 GaAs/GaP ヘテロ界面における応力がゼロの場合の価電子帯のバンド不連続量を計算するために用いたパラメータ.

	GaAs	GaP
a_v (eV)	3.1 [70]	3.0 [70]
b (eV)	-1.66 [28]	-1.5 [29]

応力がゼロの場合の GaAs/GaP 界面における価電子帯のバンド不連続量 ΔE_v を見積もった。 ΔE_v は次式を用いて計算を行った。

$$\Delta E_v = \Delta E_{vh} - \left\{ 2a_v \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11}} \right) + b \left(\frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} \right) \right\} \epsilon_{zz} \quad (5.4)$$

ただし、 a_v は価電子帯に対する静水圧変形ポテンシャル、 b はせん断変形ポテンシャル、 c_{11} および c_{12} は弾性定数、 ϵ_{zz} は GaAs_{1-x}P_x 層内の 2 軸歪で

$$\epsilon_{zz} = \frac{a_{\text{GaAs}} - a_{\text{GaAsP}}}{a_{\text{GaAsP}}} \quad (5.5)$$

で与えられる。ただし、 a_{GaAs} および a_{GaAsP} は GaAs および GaAs_{1-x}P_x の歪んでいない状態での格子定数である。

$x = 0.23$ における、応力がゼロの場合の価電子帯のバンド不連続量を求めると、 $\Delta E_v(x = 0.23) = 90 \pm 20$ meV となる。この計算においては、表 5.4 に載せた値を線形補間して用いた。さらに、この応力がゼロの場合の価電子帯のバンド不連続量が P 組成に対して線形に変化する [69,71] と仮定すると、GaAs/GaP ヘテロ界面においては $\Delta E_v = 380 \pm 80$ meV という値が得られる。この値は他の研究結果に比べてかなり小さい値となっている。

他の研究と結果が一致しないことに対しては、いくつかの理由が挙げられる。第一に、光電子分光測定 [68] では Ge や Si を reference として用いてバンド不連続量の決定を行っているため、直接 GaAs と GaP のバンド不連続量を測定したわけではない。しかも、彼らは測定の対象となる試料の上に、室温で Ge や Si を蒸着しているので、エピタキシャル成長せず、界面準位が多く存在すると考えられる。また、一般的に光電子分光におけるエネルギー分解能はあまり高くないため、誤差の多い測定となる。

表 5.5 GaAs/GaAs_{1-x}P_x ($x = 0.23$) 歪障壁量子井戸のヘテロ界面におけるバンド不連続量.

	本研究	Pistol and Liu
ΔE_c (meV)	110	90
ΔE_{cl} (meV)	30	80
ΔE_{vh} (meV)	80	140
Q_c	0.57	0.39

第二に Gourley と Biefeld [69] の場合には軽い正孔の準位とスピン軌道相互作用によって分裂した準位との結合を考慮していないために結果が違ってしまったと考えられる [72]。

一方、Zhang 等 [73] の GaAs/GaAs_{1-x}P_x “歪井戸” 量子井戸構造に関する研究によって得られた結果から応力がゼロの場合の価電子帯のバンド不連続量を見積もると 390 meV となり、本研究の結果と良い一致を示す。

最近、Pistol と Liu [74] が、本研究で用いた試料とほぼ同様な試料についての PLE 測定の結果を報告している。その結果を図 5.7 に示す。図中、実線矢印で示されているのは Van de Walle の model solid 理論 [71] から得られるバンド不連続量を用いて計算された光学遷移エネルギーである。このとき彼らが用いたバンド不連続量及びそれから求まるバンドオフセット比を表 5.5 に示す。表 5.5 には本研究で得られたバンド不連続量及びバンドオフセット比も比較のために載せておく。

彼らの計算結果は、1H や 1L のように低いエネルギーに位置する遷移に対しては一致しているが、彼らも論じているように 2L 遷移に対しては計算結果の方が実験よりもかなり高エネルギー側になっている。

これは彼らの用いた伝導帯のバンドオフセット比が正しい値よりも小さいためであると考えるのが妥当である。実際、本研究で得られた結果に基づいてエネルギー準位を計算すると、彼らの得た PLE の結果について 2L 遷移も含めてすべてうまく説明することができる。その結果を図 5.7 に破線矢印で示している。このことから、今回得られたバンド不連続量が信頼性の高いものであるといえる。

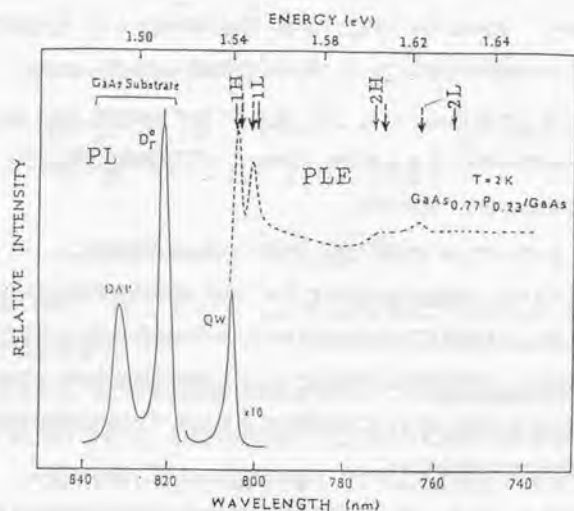


図 5.7 Pistol と Liu [74] の測定した PLE スペクトル。実線矢印は Van de Walle [71] の理論から得られたバンド不連続量を用いて計算した遷移エネルギーを、破線矢印は本研究で得られたバンド不連続量を用いて計算した遷移エネルギーを示す。

我々の報告の後で、GaAs/GaAs_{1-x}P_x ヘテロ界面におけるバンド不連続量に関して報告がされている。静水圧下におけるフォトルミネッセンス測定 [75]-[77] によって価電子帯のバンド不連続量を見積もったもので、応力がゼロの場合の GaAs/GaAs_{0.68}P_{0.32} 界面の価電子帯バンド不連続量 90 ± 20 meV としている。この結果を GaAs/GaP 界面の場合に外挿すると 280 ± 60 meV となり、我々の実験結果と近い値となっている。

また、この構造においては、井戸幅を狭くしていくと、LH と HH に対するそれぞれのポテンシャル障壁の高さの違いを反映して、LH 準位と HH 準位が入れかわることが予想される。我々は円偏光 PLE を用いて LH サブバンドと HH サブバンドを明確に区別することによって、その様子を観測した [78]。このときの入れかわりの様子及び遷移エネルギーの井戸幅依存性は図 5.8 に示すように、 $Q_c = 0.57$ という値を用いた計算結果と非常に良い一致を示す。このことも本研究で得られたバンド不連続量が正確であることを示している。

5.4 まとめ

光変調分光法が高エネルギーの準位も観測できることを利用して、GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸のヘテロ界面におけるバンド不連続量を調べた。その結果、バンド不連続量は P 組成 $x < 0.23$ の範囲ではほぼ線形に変化することがわかった。また伝導帯のバンドオフセット比は $Q_c = 0.57 \pm 0.05$ であることがわかった。この結果は Pistol と Liu のフォトルミネッセンス励起スペクトルの結果を十分に説明できる。さらに、応力のない状態の価電子帯のバンド不連続量を見積もると 380 ± 70 meV となる。この値は GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪“井戸”量子井戸構造から得られた結果とよく一致する。以上のことから、今回得られた値は、従来報告されていた値と比べて、信頼性の高いものであると考えられる。

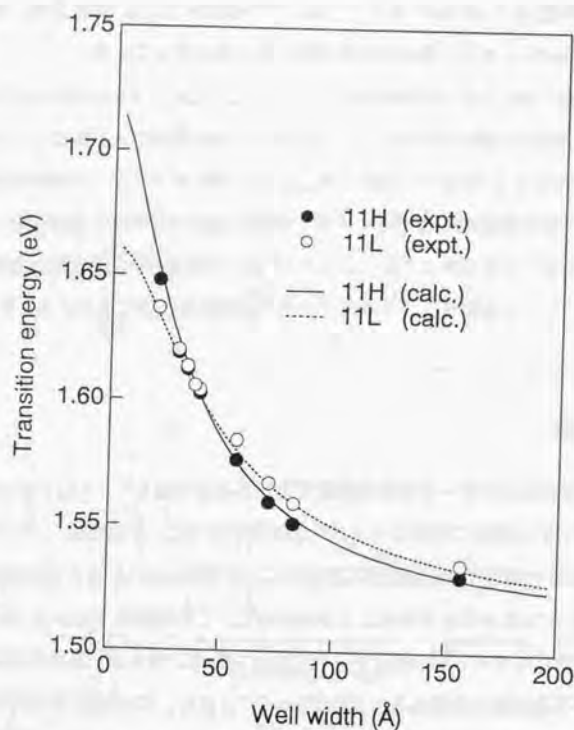


図 5.8 円偏光 PLE によって求められた光学遷移エネルギー。LH サブバンドと HH サブバンドの入れかわる様子が、本研究で得られたバンド不連続量を用いた計算結果と良い一致を示す。

第6章

GaAsP/GaP 歪量子井戸構造におけるバンド不連続量

6.1 序

この章では、GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造におけるバンド不連続量に関する研究結果について述べる。この系は GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造の場合と異なっている点はいくつかある。第一に、井戸層が歪む系である点、第二に、P 組成が大きいため、最小エネルギーギャップが間接遷移型の領域になっている点である。特に、第二の点は前章で述べた GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸構造の場合と比較した場合、重要な違いである。PR 法では間接遷移ギャップに関する量子準位ではなく、それよりも大きなエネルギーギャップを持つ直接遷移ギャップに関する量子準位を測定することになる。本研究では、PL 測定によって、間接遷移ギャップに関する情報も得られたので、PR 法によって得られた結果との整合性も検討する。

6.2 実験

図 6.1 に実験に用いた試料の構造を示す。試料は MOVPE 法を用いて作製した。X 線回折で構造を決定するのに都合が良いように、井戸層が 5 層ある多重量子井戸構造を作製した。井戸層の P 組成は $x \sim 0.82$ とした。GaP 障壁層の厚さは 600 Å 程度として、井戸間での結合が無視できる程度に十分厚くしてある。この構造では、基板に GaP(100) を用

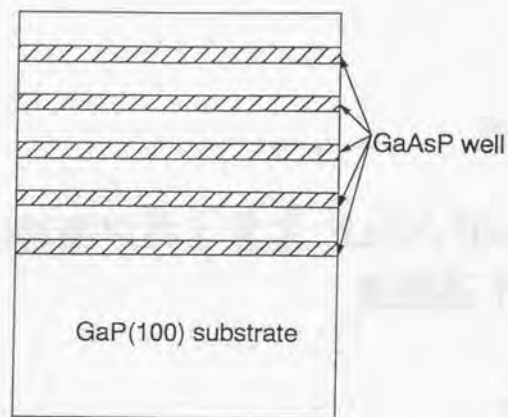
図 6.1 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸の試料構造.

表 6.1 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造におけるバンド不連続量を決定するために用いた試料の構造.

sample	well width (Å)	barrier width (Å)	P composition in well layer
A	30.4	485.2	0.807
B	63.4	624.1	0.832
C	91.1	640.5	0.818

いているために GaAs_{1-x}P_x 井戸層が歪層となる。試料の構造は X 線二結晶法によって決定した。図 6.2-6.4 に GaAs_{1-x}P_x 歪量子井戸の X 線回折ロックアップカーブを示す。図中、下が実験で得られた曲線、上が動力学的回折理論に基づく計算によって得られた曲線である。この計算には第 5 章の表 5.1 にまとめてあるパラメータを用いている。高次のサテライトピークが明瞭に見られることから周期性や組成の均一性がよいと考えられる。X 線回折の測定結果から、それぞれ、表 6.1 にまとめたような構造であることがわかった。

光変調反射分光の励起光には He-Cd レーザ (325 nm) を用いた。これは GaP の直接遷移ギャップよりもエネルギーの高い励起光を用いることによって、表面電場を十分に変調する

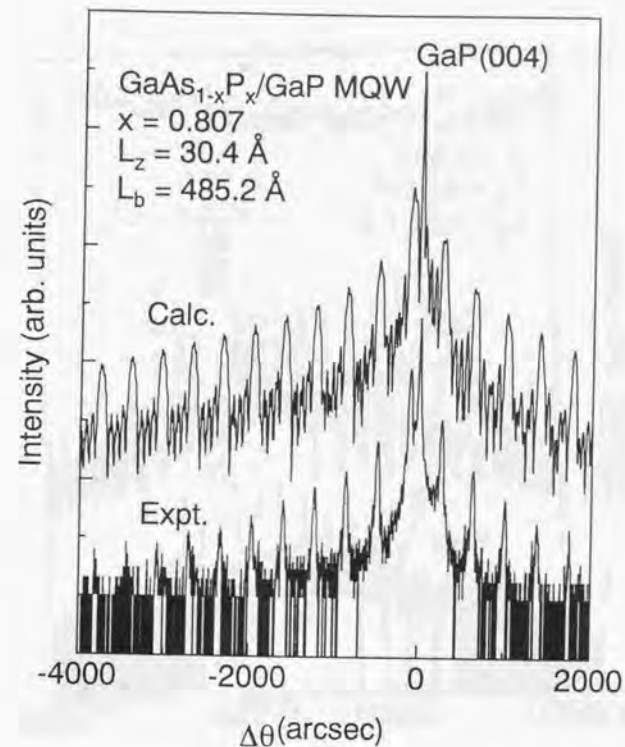


図 6.2 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造の X 線回折ロックアップカーブ。測定結果に理論曲線をフィッティングさせることによって、井戸層内の P 組成 $x = 0.807$ 、井戸層厚 30.4 Å、障壁層厚 485.2 Å と決定できる。

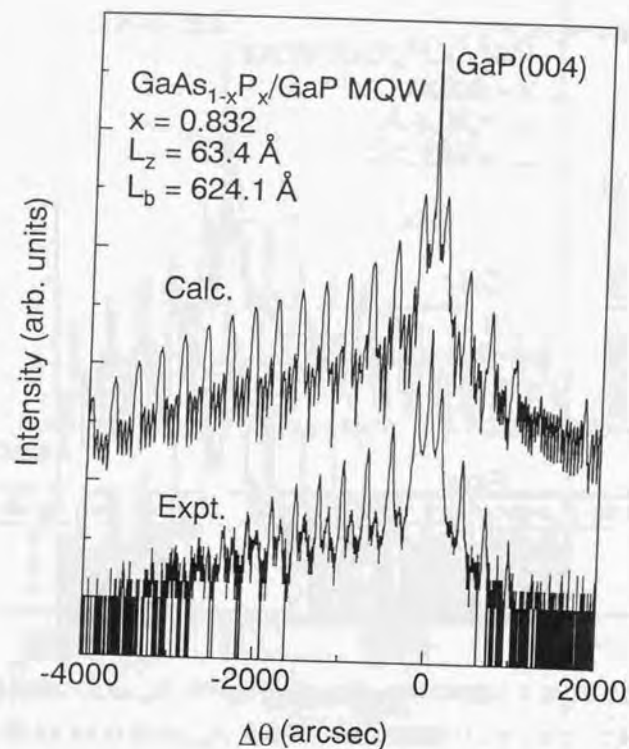


図 6.3 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造の X 線回折ロックンングカーブ。測定結果に理論曲線をフィッティングさせることによって、井戸層内の P 組成 $x = 0.832$ 、井戸層厚 63.4 \AA 、障壁層厚 624.1 \AA と決定できる。

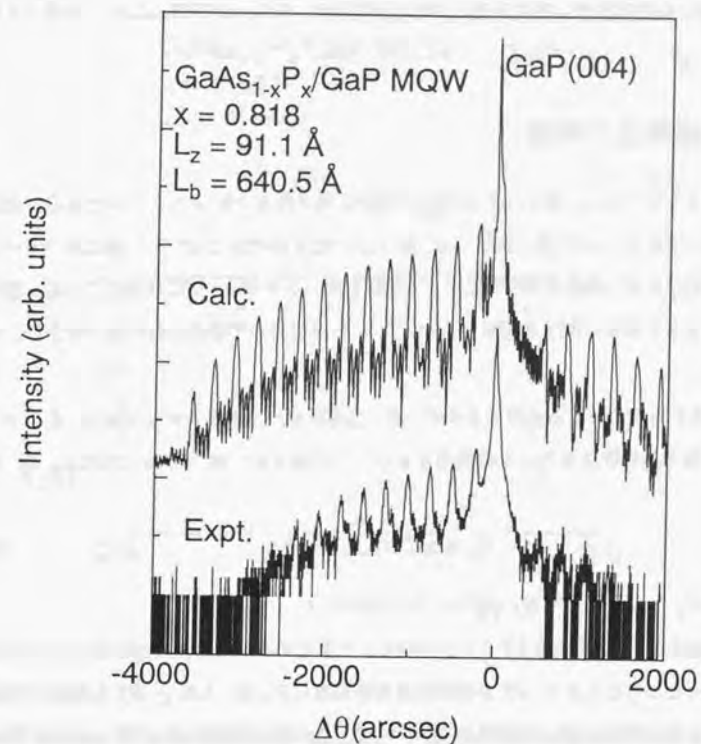


図 6.4 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造の X 線回折ロックンングカーブ。測定結果に理論曲線をフィッティングさせることによって、井戸層内の P 組成 $x = 0.818$ 、井戸層厚 91.1 \AA 、障壁層厚 640.5 \AA と決定できる。

ためである。反射光の検出には光電子増倍管(浜松ホトニクス R633)を用いた。また、PL測定においても励起光に He-Cd レーザ (325 nm) を用いた。Ar レーザ (488 or 514.5 nm) のような He-Cd レーザより波長の長いレーザを用いた場合、試料深くまで光が侵入する結果、基板の不純物準位に関する発光が観測されるが、それらが邪魔になるのを避けるためである。

6.3 結果及び考察

図 6.5-6.7 は $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸から得られる PR スペクトルである。測定温度は 80 K である。 $\text{GaP}(E_0)$ 及び $\text{GaP}(E_0 + \Delta_0)$ はそれぞれ GaP の Γ 点におけるバンドギャップ及びスピン軌道相互作用によって分裂したバンドギャップに対応している。図中に示してある量子準位に関する遷移は、いずれも Γ 点において形成された量子準位によるものである。

PR 測定から求められる遷移エネルギーと、伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとして量子準位計算を行った結果をまとめたのが図 6.8-6.10 である。ただし、 Q_c の定義は

$$Q_c = \Delta E_c / (\Delta E_c + \Delta E_{vh}) \quad (6.1)$$

としている。

量子準位の計算に用いたパラメータを表 6.2 にまとめる。なお、この計算においては第 3 章で述べたような LH と SO との間の結合を考慮している。LH と SO の結合を考慮した場合としない場合の違いを試料 B ($x = 0.832$, $L_z = 63.4 \text{ \AA}$) について示したのが図 6.11 である。LH と SO の結合を考慮した場合としない場合とでは計算結果に最大 10 meV 程度の違いが生じ、伝導帯のバンドオフセット比に対する依存性も大きく異なる。また、PR 測定から得られた遷移エネルギーとの一致も良くない。特に、他の材料からなる量子井戸構造と比較した場合、この $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造では Δ_0 が小さいという点と、井戸層が歪んでいるという点から、LH と SO の結合を考慮することが重要となってくる。

遷移エネルギーの計算には励起子の効果も含めている。励起子の束縛エネルギーについ

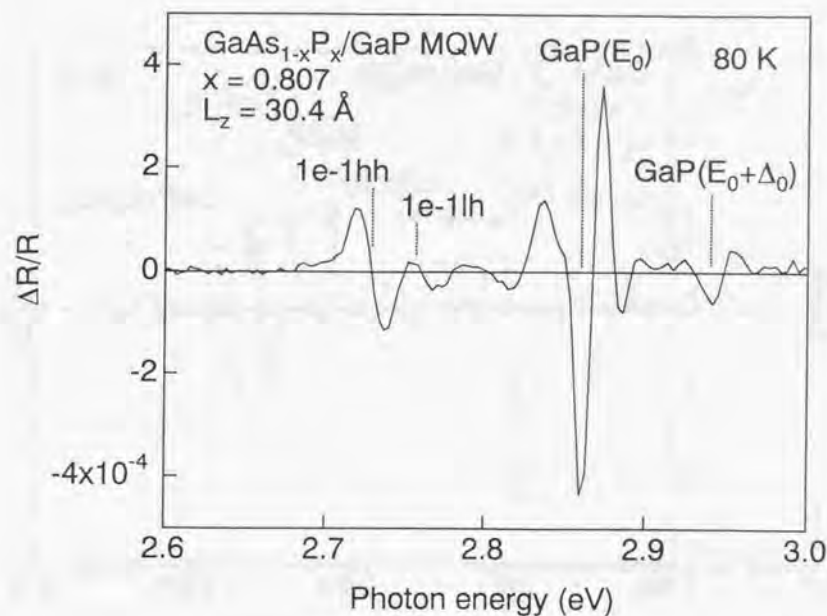


図 6.5 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造 ($x = 0.807$, $L_z = 30.4 \text{ \AA}$) の 80 K における PR スペクトル。

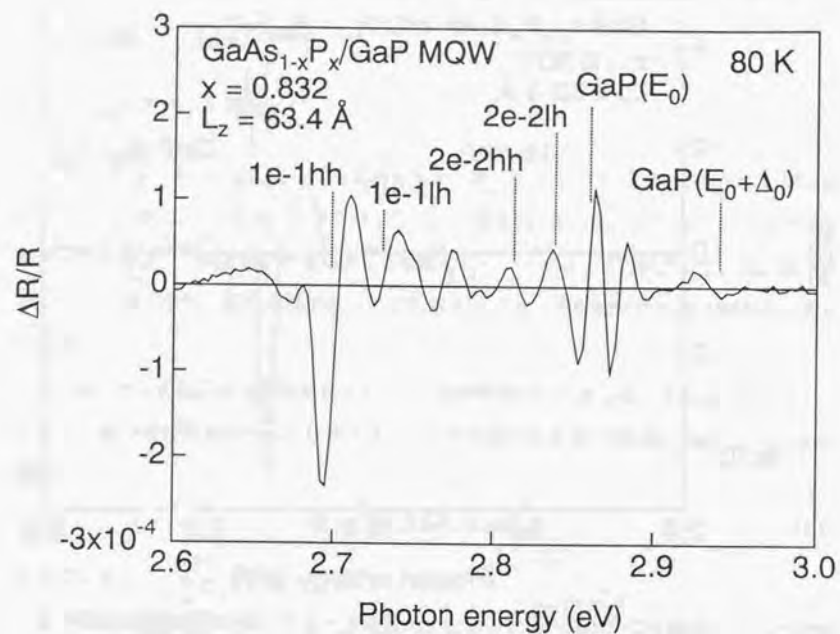


図 6.6 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.832$, $L_z = 63.4 \text{ \AA}$) の 80 K における PR スペクトル。

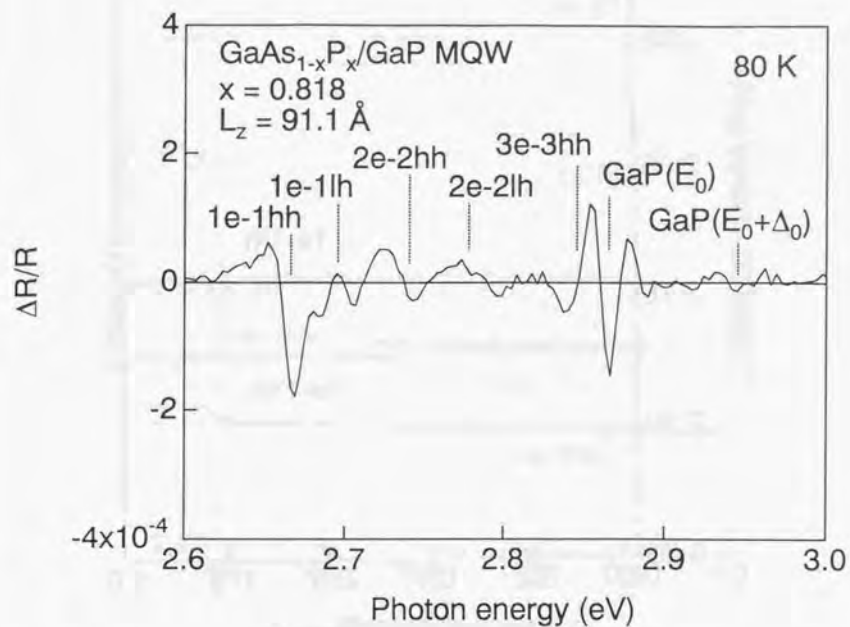


図 6.7 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造 ($x = 0.818$, $L_z = 91.1 \text{ \AA}$) の 80 K における PR スペクトル。

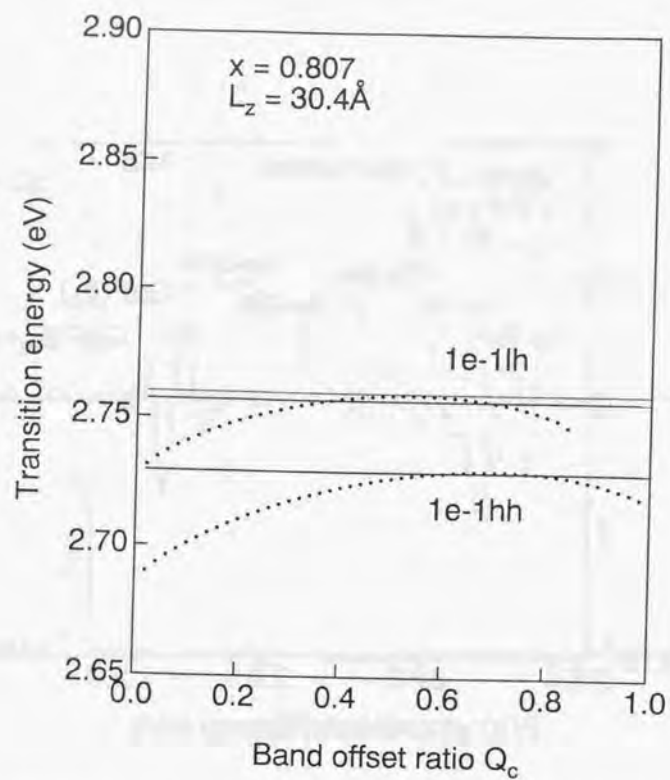


図 6.8 P 組成 $x = 0.807$, 井戸幅 30.4 \AA の $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造に対する PR 測定から得られた遷移エネルギーと、伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとした量子準位計算による遷移エネルギーとの比較。水平な線が実験値を、曲線が計算値を示す。

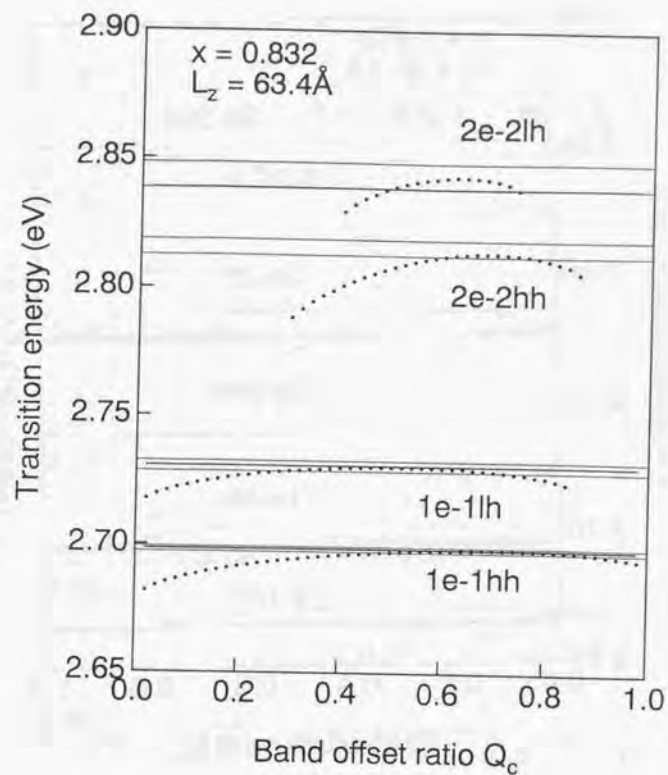


図 6.9 P 組成 $x = 0.832$, 井戸幅 63.4 \AA の $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造に対する PR 測定から得られた遷移エネルギーと、伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとした量子準位計算による遷移エネルギーとの比較。水平な線が実験値を、曲線が計算値を示す。

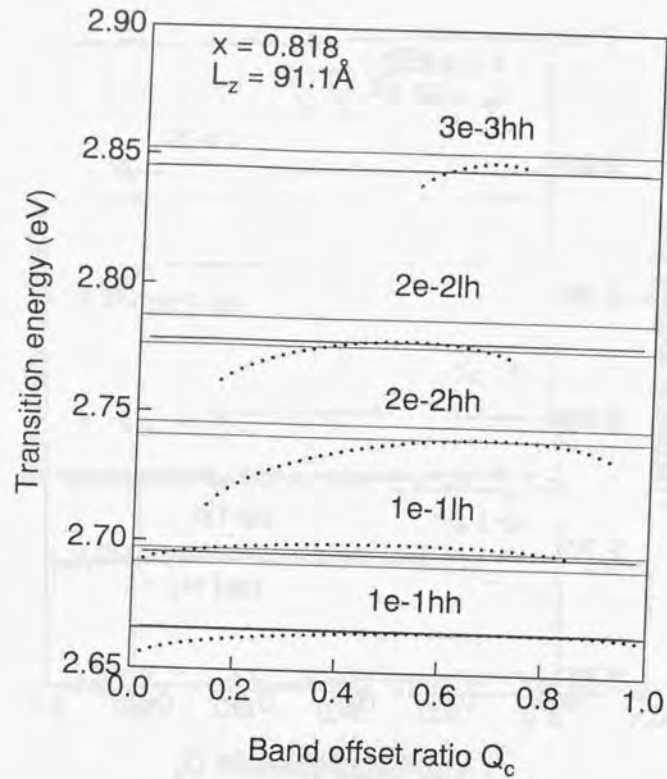


図 6.10 P 組成 $x=0.818$, 井戸幅 91.1 \AA の $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaP}$ 歪量子井戸構造に対する PR 測定から得られた遷移エネルギーと、伝導帯のバンドオフセット比 Q_c をパラメータとした量子準位計算による遷移エネルギーとの比較。水平な線が実験値を、曲線が計算値を示す。

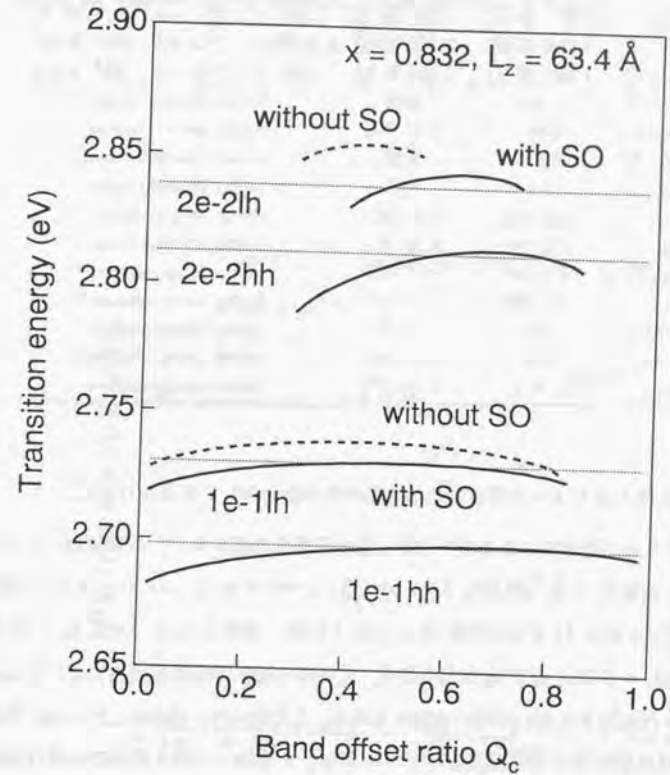


図 6.11 LH と SO の結合を考慮した場合としない場合の量子準位計算に基づく遷移エネルギーの違い。実線は結合を考慮した場合に、破線は考慮しない場合に対応する。

表 6.2 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸における量子準位の計算に用いたパラメータ

	GaAs	GaP	GaAs _{1-x} P _x
E_g^{dir} (eV)	1.507 (80 K)	2.878 (80 K)	$1.507 + 1.182x + 0.190x^2$ (80 K)
	1.519 (6 K)	2.888 (6 K)	$1.519 + 1.179x + 0.190x^2$ (6 K)
E_g^{ind} (eV)	1.981 (6 K)	2.350 (6 K)	$1.981 + 0.159x + 0.210x^2$ (6 K)
Δ_0 (eV)	0.341	0.08	linear interpolation
$m^*/m_0(\Gamma)$	0.067	0.17 [65]	linear interpolation
$m_1^*/m_0(X)$	0.257	0.25	linear interpolation
$m_2^*/m_0(X)$	1.8	0.91	linear interpolation
γ_1	6.85 [66]	4.04 [67]	linear interpolation
γ_2	2.10 [66]	0.53 [67]	linear interpolation
a (eV)	-8.4 [28]	-9.9 [29]	linear interpolation
b (eV)	-1.7 [28]	-1.5 [29]	linear interpolation
E_1 (eV)	1.06	2.3 [29]	linear interpolation
E_2 (eV)	8.6	6.3 [29]	linear interpolation
ϵ_0	12.74 [79]	10.86 [79]	linear interpolation

ては Mathieu 等 [80] によって導き出された解析的手法を用いて計算を行った。

PR スペクトルより遷移エネルギーを導く際の誤差を考慮すると、伝導帯のバンドオフセット比 Q_c は試料 A ($x = 0.807$, $L_z = 30.4 \text{ \AA}$) については $Q_c = 0.61 \pm 0.13$ 、試料 B ($x = 0.832$, $L_z = 63.4 \text{ \AA}$) については $Q_c = 0.59 \pm 0.05$ 、試料 C ($x = 0.818$, $L_z = 91.1 \text{ \AA}$) については $Q_c = 0.63 \pm 0.07$ と求められる。これらの試料の組成範囲内においてはバンドオフセット比に大きな違いはないと考えられる。したがって、GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸のヘテロ界面における伝導帯のバンドオフセット比は、これらの値の共通な部分の $Q_c = 0.60 \pm 0.04$ であると考えられる。

次に、この系について PL 測定によって得られた結果を示す。ここで、PL 測定によって得られた結果は、間接ギャップである X 点に関する情報であることを注意しておく。なお、GaP のような X 点が伝導帯の最小となる III-V 半導体では伝導帯の X_1^c と X_3^c の間の相互作用によって、“camel's back” 構造をもち、実際には X 点から少し離れた点が伝導帯の最小点になることが知られている [81]–[84]。しかしながら、“camel's back” の深さ

は 3 meV 程度と浅いことと、本研究で用いた量子井戸構造においては量子化軸は有効質量 m_t^* の方向に対応することから、その影響については考えていない。また、以下での記述においても、伝導帯の最小点を便宜的に X 点と呼ぶことにする。

図 6.12–6.14 は GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸の 6 K で測定した PL スペクトルである。いずれのスペクトルにおいてもフォノンを介さない遷移 (NP^X) と LA フォノンが関与

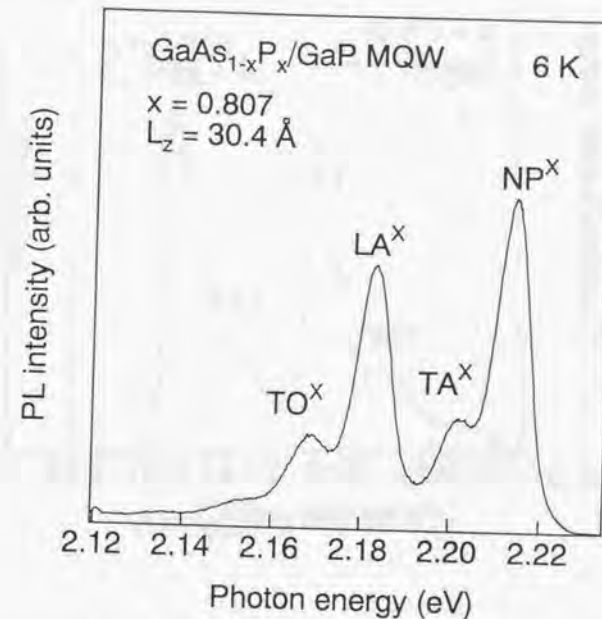


図 6.12 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸 (P 組成 $x = 0.807$ 、井戸幅 $L_z = 30.4 \text{ \AA}$) の 6 K におけるフォトルミネッセンススペクトル。

した遷移 (LA^X) とが明瞭に観測されている。また、TA フォノン、TO フォノンが関与

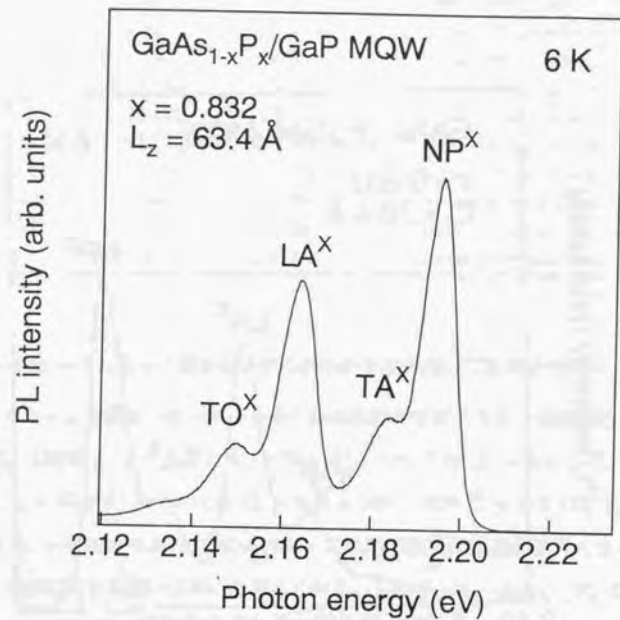


図 6.13 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸 (P 組成 $x = 0.832$, 井戸幅 $L_z = 63.4 \text{ \AA}$) の 6 K におけるフォトルミネッセンススペクトル。

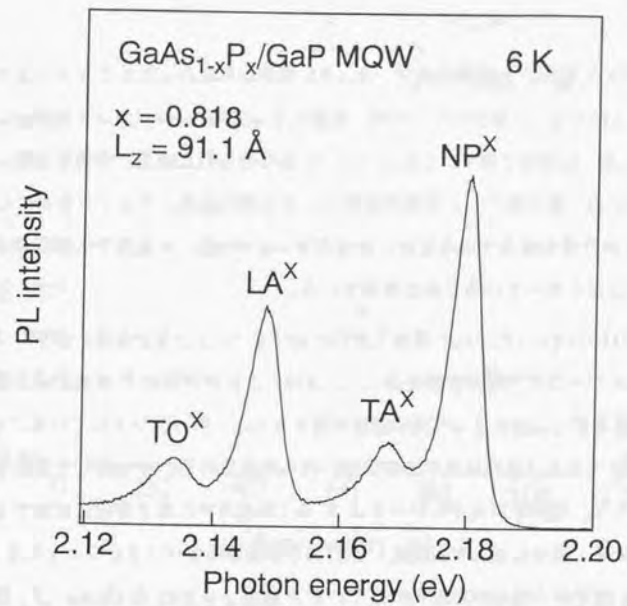


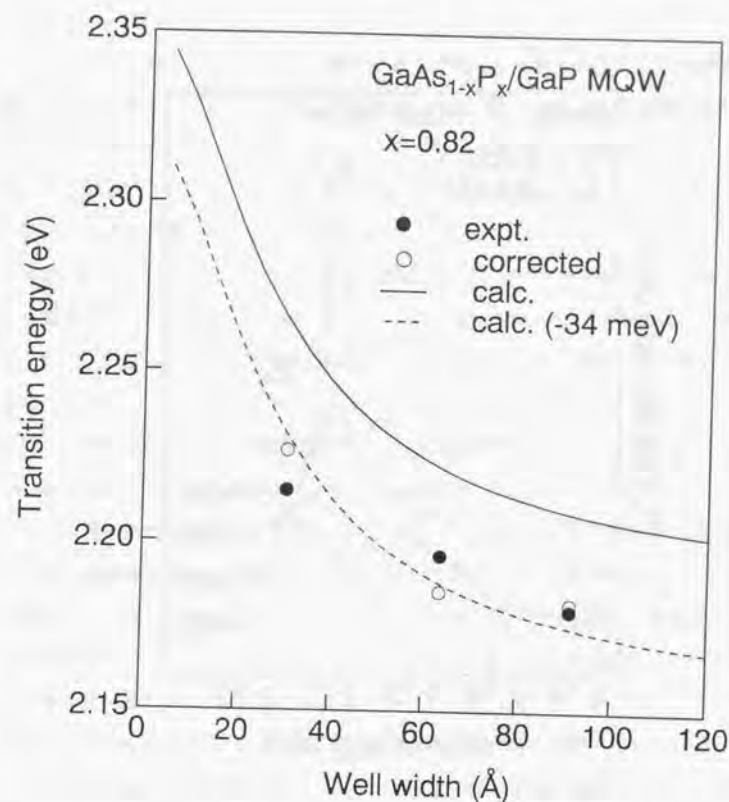
図 6.14 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸 (P 組成 $x = 0.818$, 井戸幅 $L_z = 91.1 \text{ \AA}$) の 6 K におけるフォトルミネッセンススペクトル。

表 6.3 PL 測定より求められたフォノンエネルギー。

	TA ^X	LA ^X	TO ^X
$L_z = 30.4 \text{ \AA}, x = 0.807$	12	30	44
$L_z = 63.4 \text{ \AA}, x = 0.832$	11	30	44
$L_z = 91.1 \text{ \AA}, x = 0.818$	11	30	44
GaP [85]	13.2	30.9	43.8

した遷移 (TA^X, TO^X) も観測されている。PL 測定から求められたフォノンエネルギーを表 6.3 にまとめておく。あわせて、中性子散乱によって求められた GaP のフォノンエネルギーの結果 [85] も載せておく。このように PL から得られた結果と中性子散乱によって得られた結果との一致は良く、この同定が正しいことがわかる。フォノンを介さない遷移は GaAs_{1-x}P_x 井戸層が混晶であるために組成のゆらぎが生じ、*k* 空間での運動量保存則が厳密に成り立たなくなっているために観測される。

図 6.15 には GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸におけるフォノンを介さない遷移による PL のピークエネルギーの井戸幅依存性を示した。試料ごとに井戸層の P 組成が多少異なっているものの、量子閉じ込めによって光学遷移が高エネルギー側へシフトしていることが、この図から明らかである。黒丸は元々の実験値、白丸は組成の違いを考慮して補正した値である。したがって、観測された PL ピークは *X* 点に形成された量子準位に対応する遷移であることがわかる。図中に示した実線は Γ 点における伝導帯のバンドオフセット比 $Q_c = 0.60$ という、PR 測定から得られた結果に基づいて P 組成 $x = 0.82$ の GaAs_{1-x}P_x 歪量子井戸に対して計算されたものである。実験値の方が計算値よりも低エネルギー側にある。これは励起子の束縛エネルギーを考慮していないためである。PL によって観測されている発光ピークは不純物に束縛された励起子によるものであることが、PL スペクトルの温度依存性からわかっている。図 6.16 に GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸 ($x = 0.832, L_z = 63.4 \text{ \AA}$) の PL スペクトルの温度依存性を示す。温度を上げるにつれて、低エネルギー側のピーク (D_0^X) が消失し、高エネルギー側に新たなピーク (E_g^X) が現れる。この高エネルギー側のピーク (E_g^X) は自由励起子による発光ないしは束縛励起子の励起状態による発光であると

図 6.15 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸のフォトルミネッセンスピークの井戸幅依存性。

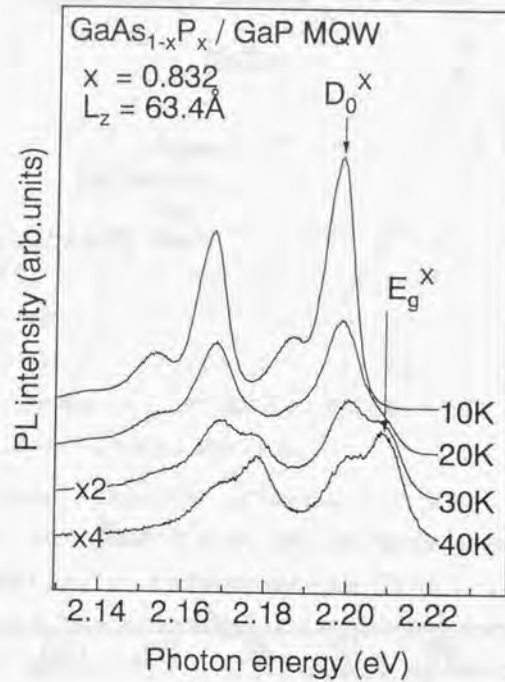


図 6.16 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸のフォトルミネッセンススペクトルの温度依存性。

考えられる。

このように、発光ピークはバンド端から自由励起子の束縛エネルギーと束縛励起子の束縛エネルギーの分だけ低エネルギーに位置している。図 6.15 に示した破線は励起子の束縛エネルギーを仮に 34 meV としてプロットしたものであるが、実験結果とよく一致している。したがって、PR によって得られた Γ 点に関する結果と PL によって得られた X 点に関する結果は矛盾しないことがわかった。

実は、PR から得られた Γ 点における伝導帯のバンドオフセット比 $Q_c = 0.60$ という結果から間接ギャップとなる X 点におけるバンドラインアップは type I であることが導き出される。その計算過程を示したのが図 6.17 である。まず、GaP と、GaP に格子整合するように歪んだ GaAs_{1-x}P_x の Γ 点におけるバンドラインアップを考えると、 $\Delta E_c(\Gamma) = 133$ meV、 $\Delta E_{vh} = 89$ meV となる。価電子帯のバンド不連続量 ΔE_{vh} の内、静水圧による寄与が -22 meV、対称性低下による寄与が +19 meV である。したがって、応力がゼロの状態でのバンド不連続量は $\Delta E_v = 92$ meV となる。次に、この値を基準に伝導帯の X 点におけるバンド不連続量を考える。歪んでいない GaAs_{1-x}P_x からスタートすると、まず、静水圧の効果によって -38 meV シフトする。さらに対称性の低下によって、3 重縮退していた X 点が分裂し、-28 meV シフトする。その結果 X 点においては $\Delta E_c(X) = 71$ meV のバンド不連続量を生じる。

なお、Osborn のグループの研究では、GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪超格子におけるバンドラインアップは type II であるとしている。このように結果が異なる理由の一つは本研究の場合と、歪の加わり方が違うためであると考えられる。彼らの用いた構造では GaP が引っ張り応力を GaAsP が圧縮応力を受けている。もう一つの理由は X 点に対する静水圧の効果についての取扱いの違いにある。彼らは体積が小さくなると X 点のバンドギャップは広がるとしている (例えば、Reference [5] p.470, Fig. 6 を参照のこと)。これは Mathieu 等の実験結果 [29] と逆になっていて明らかに間違いである。以上のようなことから、この系は type II であると誤って解釈されてきたのではないかと考えられる。

これに対して、本研究の結果からは、間接ギャップにおけるバンドオフセット比は $Q_c = 0.44$ と求められ、伝導帯のバンド不連続量は比較的大きいことがわかる。この相対関係

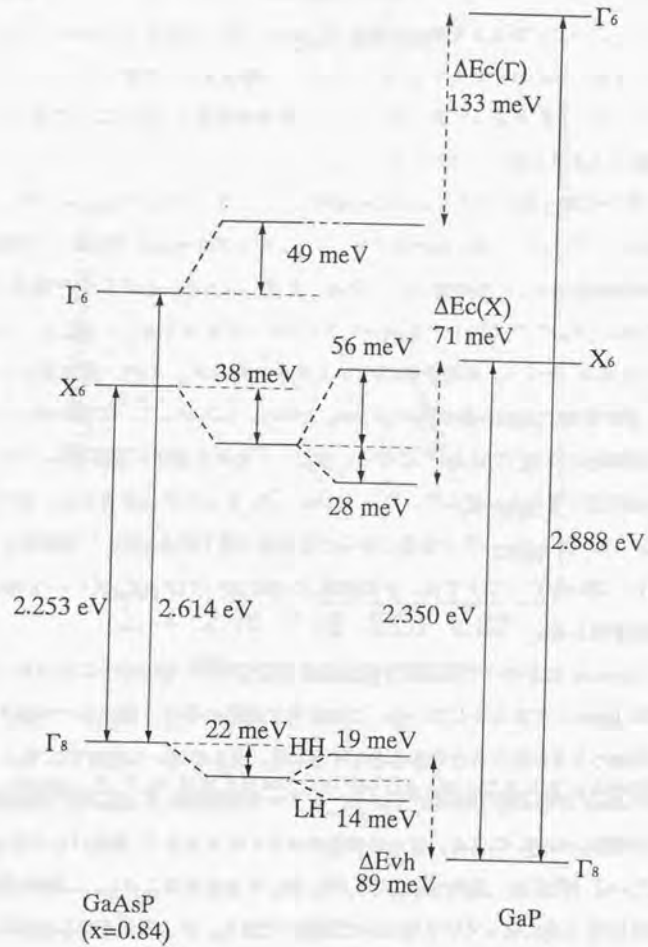


図 6.17 GaAs_{1-x}P_x/GaP ヘテロ界面における Γ 点, X 点の相対関係.

をもとにして量子井戸におけるバンドラインアップを模式的に示したのが図 6.18 である。図 6.15 からわかるように、フォノンを介さない光学遷移のエネルギーは、常に GaAs_{1-x}P_x 井戸層のバンドギャップよりも大きい。このことも X 点におけるバンドラインアップが type I であることを示している。

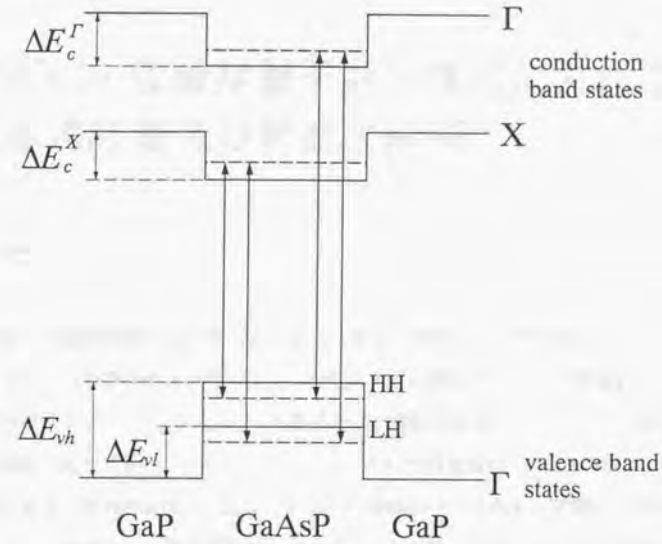


図 6.18 GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸構造のバンドラインアップ.

6.4 まとめ

光変調反射分光法によって、GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸における Γ 点に形成された量子準位に関する遷移を観測し、その結果から、伝導帯のバンドオフセット比が $Q_c = 0.60 \pm 0.04$ であることがわかった。さらに、フォトルミネッセンス測定によって、X 点に形成された量子準位に関する遷移を観測した。光変調反射分光の測定結果から、X 点におけるバンドラインアップは type I であることが明らかになり、この結果はフォトルミネッセンスから

得られた結果と一致することがわかった。さらに、従来、この系に関しては伝導帯のバンド不連続量はほとんどゼロに近いか極めて小さいと考えられていたが [86]、本研究ではそれが正しくないことがわかった。

第7章

Ge/SiGe 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量及び界面の評価

7.1 序

Si は現在、大規模集積回路に使われる最も主要な半導体材料であるが、この Si が太刀打ちできずに、化合物半導体の使われているのは、主に発光デバイスと高速トランジスタの2つの分野である。これは、Si が間接遷移型の半導体であるということと、有効質量が化合物半導体に比べて重いことによる。しかし、それだけではなく、Si に対してヘテロ界面を形成するような材料がなかったことも大きな要因の一つである。実際に、化合物半導体の場合でも、半導体レーザや変調ドープトランジスタ等のデバイスについて考えれば明らかのように、ヘテロ構造がなければいずれも実現は不可能であった。

ところが、この Si に対するヘテロ材料として有望であると考えられ、近年盛んに研究が行われるようになってきたのが $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ である。第2章でも述べたように、 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ヘテロ構造において変調ドーピングを行うことによって移動度の増大が観測されている [22,23]。また、超格子によるバンドの折り畳み効果を利用した疑似直接遷移への転換も期待されている。

このような $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 系において、 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ヘテロ構造は変調ドープトランジスタへの応用が期待されるヘテロ構造の一つである [87,88]。その理由はこのヘテロ構造の場合、Ge 層がチャネル層となるために $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 層がチャネル層となる他のヘテロ構造の場合と

比較して有効質量が小さく、合金散乱がない点から、より高移動度の特性が期待されるからである。バンド不連続量やヘテロ界面の平坦性は変調ドープトランジスタの特性に大きく影響するので、それらについて知ることは重要である。しかし、 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 系のバンド不連続量に関しては、いくつかの研究があるものの必ずしも結果が一致していない [89]–[94]。

また Ge は間接型半導体であるために GaAs 等の III-V 族化合物半導体で良く行われているような PL 等の光学的手法に基いた界面の平坦性等に関する研究 [19,95] は皆無といっような状況である。その点、PR 法は直接遷移ギャップが最小エネルギーギャップでなくても測定を行えるから、このような系において界面の評価を行うためのほとんど唯一の光学測定法といえる。

7.2 実験

試料には Ge(100) 基板上に成長した $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸を用いた。結晶成長は固体ソース Si 分子線エピタキシー法によって行った。Ge の成長には Knudsen cell を、Si の成長には電子銃蒸発源を用いている。Ge 基板は有機洗浄した後、10% H_2O_2 水溶液で 30 秒間エッチングし、3 分間純水ですすぐ。これを 3 回繰り返す。その後、洗浄した基板を成長室まで導入し、 800°C で 10 分間加熱し、酸化膜等を取り除く。表面を平坦にする目的で、量子井戸構造を作製する前に、 900 \AA の Ge バッファ層を成長する。成長温度は 400 から 500°C で成長速度は約 1 \AA/s で行った。なお、成長中の圧力は 10^{-7} Pa 以下である。

実験に用いた試料の構造を図 7.1 に示す。Ge(001) 基板上に $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 層を障壁層とした量子井戸構造を作製している。この構造においては $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 障壁層が歪層となる歪障壁量子井戸となっている。

試料の構造を正確に決定するために X 線回折二結晶法を用いた。X 線源には $\text{Cu K}\alpha_1$ ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) を使い、Ge(400) 基板を第一結晶とした。X 線回折ロックングカーブを動力学的回折理論に基づいて計算し、実験データにフィッティングさせることによって、井戸層及び障壁層の厚さと障壁層の Ge 組成を決定した。図 7.2 に $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸構造から得られた X 線回折ロックングカーブを示す。上が実験的に得られた曲線、

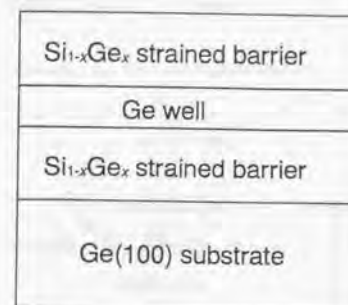


図 7.1 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸の試料構造。

下が計算から得られた曲線である。このようなフィッティングから、この試料については $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 障壁層中の Ge 組成は 0.908、井戸層の厚さ 192 \AA 、障壁層の厚さ 450 \AA であることがわかる。なお、この計算においては $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ の格子定数の Vegard 則からのずれ [96] を考慮している。また、 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 障壁層は Ge 基板の面内方向の格子定数と等しくなるように歪むのでこの影響も考慮する必要がある。Ge(100) 基板上にコヒーレントに成長した $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪層では面垂直方向の格子定数は

$$a_{\text{SiGe}}^{\perp} = a_{\text{SiGe}} \left(1 - \frac{2c_{12} a_{\text{Ge}} - a_{\text{SiGe}}}{c_{11} a_{\text{SiGe}}} \right) \quad (7.1)$$

で与えられる。ただし、 a_{Ge} 、 a_{Si} 及び a_{SiGe} はそれぞれ Ge、Si 及び $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ の歪んでいない状態での格子定数である。 c_{11} および c_{12} は $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ の弾性定数で

$$c_{11} = \frac{x a_{\text{Ge}} c_{11}^{\text{Ge}} + (1-x) a_{\text{Si}} c_{11}^{\text{Si}}}{a_{\text{SiGe}}} \quad (7.2)$$

$$c_{12} = \frac{x a_{\text{Ge}} c_{12}^{\text{Ge}} + (1-x) a_{\text{Si}} c_{12}^{\text{Si}}}{a_{\text{SiGe}}} \quad (7.3)$$

で与えられる。ただし、 c_{ij}^{Ge} および c_{ij}^{Si} はそれぞれ Ge および Si の弾性定数である。X 線の原子散乱因子には Doyle と Turner [63] が相対論的 Hartree-Fock 法による波動関数に基づいて計算を行った解析関数を用いた。さらに、原子散乱因子の分散補正項 [62] を考慮した。X 線回折ロックングカーブの計算に用いたパラメータを表 7.1 にまとめておく。なお、

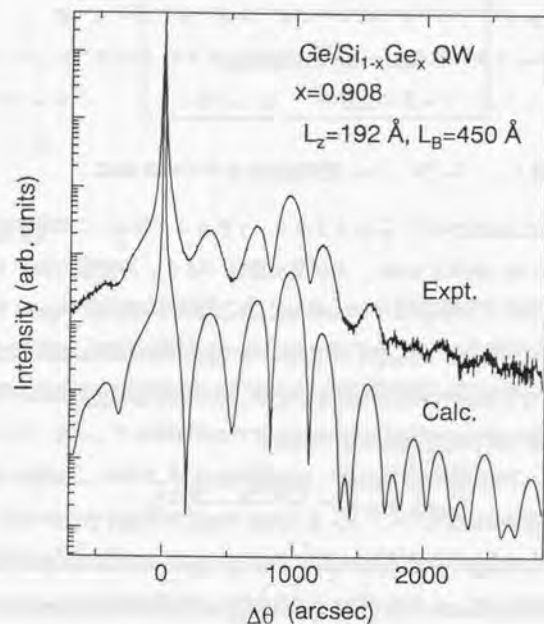


図 7.2 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造の X 線ロッキングカーブ。

表 7.1 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸の X 線回折ロッキングカーブの計算に用いたパラメータ。

Parameters	Ge	Si	Si _{1-x} Ge _x
$a(\text{\AA})$	5.6575 [96]	5.4310 [96]	$5.4310 + 0.1995x + 0.0270x^2$ [96]
$c_{11}(\times 10^{10} \text{ N/m}^2)$	12.40 [97]	16.577 [98]	see text
$c_{12}(\times 10^{10} \text{ N/m}^2)$	4.13 [97]	6.393 [98]	see text
$\Delta f'$	-1.163 [62]	0.244 [62]	linear interpolation
$\Delta f''$	0.886 [62]	0.330 [62]	linear interpolation

SiGe 混晶の格子定数の表式は Dismukes 等 [96] の結果に 2 次式をフィッティングさせることによって求めたものである。

PR 測定では分光器のスリット幅を 1 mm にした。これは 2.5 meV 以下のエネルギー分解能に相当する。反射光は InGaAs フォトダイオード (New Focus 2011) によって検出を行った。変調には Ar イオンレーザ (488 nm) を使い、チョッピング周波数は 800 Hz とした。PR 測定は 4.2 から 300 K の範囲で行った。この材料系は間接遷移型であるため、実際に PR 法で測定するのは最小バンドギャップよりもエネルギーの高い Γ 点に形成される量子井戸構造に関してである。

7.3 結果及び考察

図 7.3 は Γ 点における Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造のバンドラインアップを示したものである。このバンドラインアップは GaAs/GaAsP 歪障壁量子井戸の場合と歪の方向も同じであるためほとんど同様の形となっている。すなわち Si_{1-x}Ge_x 障壁層は 2 軸の引っ張り歪を受けているので、電子-軽い正孔間のバンドギャップの方が電子-重い正孔間のバンドギャップよりも小さくなっている。伝導帯、重い正孔の価電子帯および軽い正孔の価電子帯をそれぞれ ΔE_c , ΔE_{vh} および ΔE_{vl} と定義する。

図 7.4 に Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造の 120 K で測定した PR スペクトルを示す。図中の $me-nhh$ (あるいは $me-nlh$) という記号は m 番目の伝導帯サブバンドから n 番目

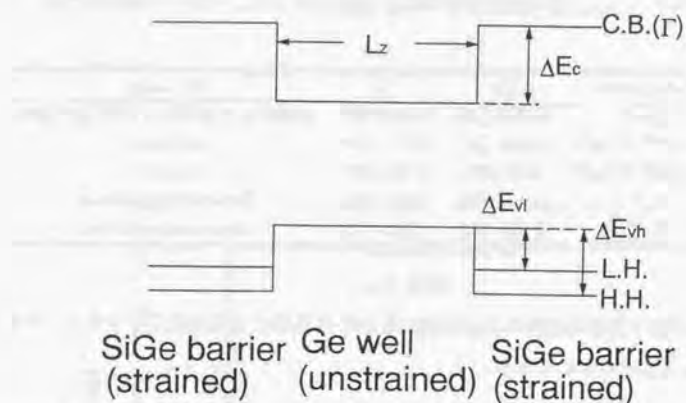


図 7.3 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造のバンドラインアップ.

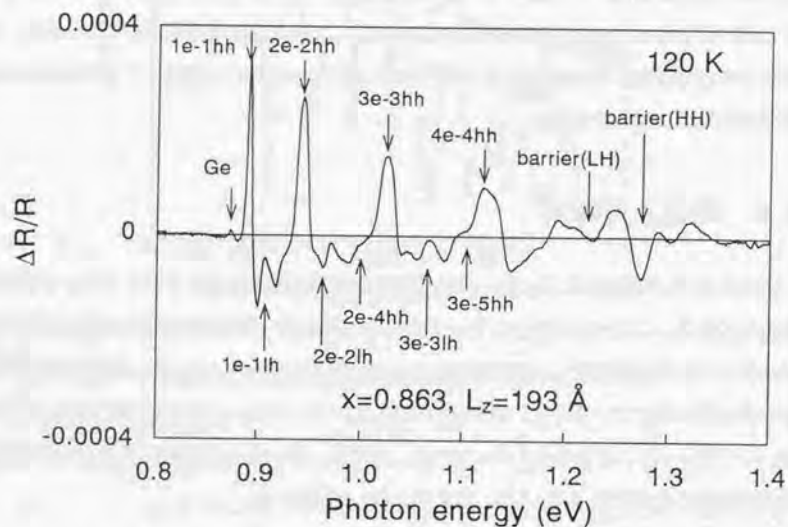


図 7.4 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造の PR スペクトル.

表 7.2 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造におけるバンド不連続量を決定するために用いた試料の構造.

sample	well width (Å)	barrier width (Å)	Ge composition in barrier layers
A	192	450	0.908
B	193	420	0.863
C	187	243	0.790

の重い正孔 (hh) (あるいは軽い正孔 (lh)) の価電子帯サブバンド間の遷移を示す。量子準位に関する光学遷移が明瞭に観測されており、さらに Si_{1-x}Ge_x 歪障壁層の分裂したバンドギャップエネルギーに対応した遷移も観測されている。このように障壁層のバンドギャップエネルギーが直接測定できるのが PR 法の大きな特長である。

PR スペクトルから光学遷移エネルギーを得るために、非線形最小二乗法 [64] を用いてローレンツ関数の一次微分 [49] を実験データにフィッティングさせた。Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸の構造に関するパラメータおよび 80 K で測定した PR スペクトルから得られた遷移エネルギーをそれぞれ、表 7.2, 7.3 に示す。Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面でのバンド不連続量を決定するために実験によって得られた遷移エネルギーと計算との比較を行った。ただし、バンド不連続量の決定にはおもに重い正孔に関する遷移エネルギーを用いた。これは、軽い正孔に関する遷移は重い正孔に関する遷移ほど明瞭に観測できていないからである。また軽い正孔の準位はスピン軌道相互作用分裂準位と結合するために、量子準位の計算が複雑になるためでもある。表 7.3 には有効質量近似に基づいた量子準位の計算結果による遷移エネルギーも載せてある。この計算で用いたパラメータを表 7.4 にまとめておく。

通常の量子準位計算を行うと、実験的に得られる遷移エネルギーが計算結果よりも必ず小さくなる。この差は、特に、高エネルギー領域で顕著である。さらに、場合によっては理論的に予想される遷移の数が実験によって得られる数よりも少ない。このことに対する理由は二つほど考えられる。一つは MBE 成長中に Ge の表面偏析 [102] が起きて量子井戸構造の Ge 組成がほやけるためにポテンシャル形状が矩形でなくなるという考え方であ

表 7.3 PR 測定から得られた光学遷移エネルギー、有効質量近似に基づいた計算結果も合わせて載せる。

Sample	Transition	Experiment (eV)	Theory (eV)
A	Ge	0.887	
	1e-1hh	0.900	0.902
	2e-2hh	0.951	0.956
	3e-3hh	1.034	1.038
	barrier(lh)	1.126	
	barrier(hh)	1.168	
B	Ge	0.887	
	1e-1hh	0.903	0.902
	1e-1lh	0.915	0.907
	2e-2hh	0.952	0.957
	3e-3hh	1.035	1.043
	4e-4hh	1.142	1.147
	barrier(lh)	1.223	
	barrier(hh)	1.273	
C	Ge	0.887	
	1e-1hh	0.901	0.904
	2e-2hh	0.958	0.963
	3e-3hh	1.050	1.057
	4e-4hh	1.163	1.171
	barrier(lh)	1.398	
	barrier(hh)	1.471	

表 7.4 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸における量子準位の計算に用いたパラメータ。

		Ge	Si	Si _{1-x} Ge _x
electron effective mass	m_0^*	0.0380 [99]	0.64 [100]	linear interpolation
Luttinger parameters [101]	γ_1	13.38	4.285	linear interpolation
	γ_2	4.24	0.339	linear interpolation

る。しかし、Ge 組成の大きい量子井戸構造においては Ge 原子が自分自身の偏析を妨げるので [103]、量子準位エネルギーが大きく変わるほどポテンシャル形状が変化するとはいえにくい。もう一つの理由は伝導帯の非放物線性 [104]–[108] である。電子の有効質量はエネルギーが大きくなるにつれて重くなるので、実際のエネルギー準位は非放物線性の影響を考えずに計算した場合に比べて低くなる。このことによって、遷移の数が計算の場合に少なくなることも説明できる。そこで、原因は伝導帯の非放物線性にあると考えて、これを考慮するために次の式を用いて量子準位の計算を行った。

$$m^*(E) = m_0^*(1 + \alpha E) \quad (7.4)$$

ただし、 m_0^* は $k=0$ での電子の有効質量、 α は非放物線性パラメータである。Ge の伝導帯の α については値がわからないため、多くの試料に対して良い一致の得られる $\alpha = 1.25 \text{ eV}^{-1}$ という値を用いた。非放物線性を考慮しない場合には、高次の量子準位に関してエネルギー位置や観測される遷移数について計算と実験は全く合わなかった。その例を図 7.5 に示す。なお、GaAs の場合には $\alpha = 0.642 \text{ eV}^{-1}$ という値が報告されている [106]。したがって、Ge/Si_{1-x}Ge_x 量子井戸においては GaAs 量子井戸に比べて、伝導帯の非放物線性の効果がより顕著に現れることがわかる。Rodrigues 等 [91] は Kane [109] のモデルに基づいて $\alpha = 0.92 \text{ eV}^{-1}$ という値を用いている。本研究で用いた値と異なっているが、いずれにしても非放物線性の効果が大きいことがわかる。なお、本研究で Kane [109] のモデルを用いなかった理由は、詳しくは付録 I に述べているが、簡単に言えば、近似の程度が低いからである。

いくつかの試料に対して、PR から得られる遷移エネルギーと有効質量近似に基いた量子準位の計算とを比較することにより、バンドオフセット比は $Q_c (= \Delta E_c / (\Delta E_c + \Delta E_{vh})) = 0.68 \pm 0.08$ と求められた。その結果を図 7.6 に示す。障壁層の Ge 組成を $x=0$ まで外挿すると $\Delta E_{vl} = 0.52 \pm 0.22 \text{ eV}$ という値が得られる。この量子準位計算においては、PR 測定で得られる遷移が励起子遷移であるということから、励起子の束縛エネルギーを考慮した。Mathieu 等 [80] によって導き出された解析的手法を用いて、井戸幅 200 Å の Ge/Si_{0.2}Ge_{0.8} 量子井戸での励起子の束縛エネルギーを見積もると 4 meV であることがわかった。そこ

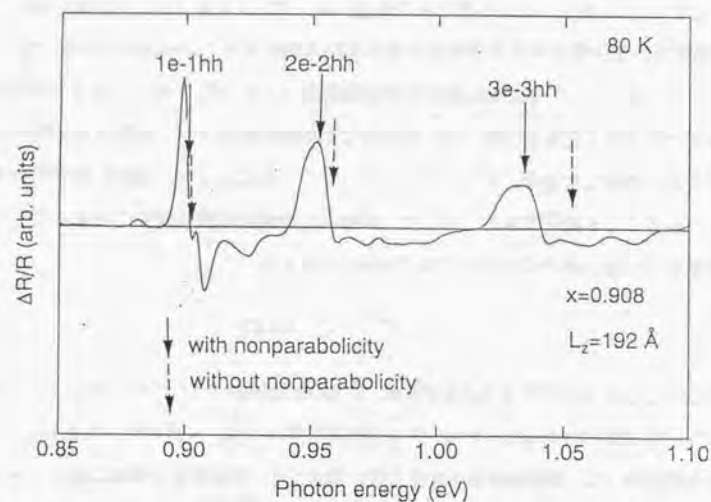


図 7.5 伝導帯の非放物線性を考慮した場合と考慮しない場合の遷移エネルギー。

で、簡単のために、Ge 組成依存性や量子数依存性を無視して準位の計算値から単に 4 meV 差し引いた値を実験値と比較した。

ここで、本研究の結果とその他の研究の結果を比較する。

Van de Walle と Martin [92] は非経験的擬ポテンシャルを用いた局所密度汎関数法による model-solid 理論に基づいて、歪んだ Si と歪んでいない Ge の間のヘテロ接合におけるバンド不連続量を $\Delta E_{v1} = 0.31 \pm 0.2$ eV としている。

Schwartz 等 [89] は内殻準位の X 線光電子分光によって $\Delta E_{v1} = 0.17 \pm 0.13$ eV と報告している。試料には、GaAs(100) 基板上に ~ 2000 Å の Ge 層を成長し、その上に 6 原子層 (monolayer: ML) の Si 歪層を成長し、さらに 12 ML の Ge キャップ層を成長したものをを用いている。成長温度は $\sim 450^\circ\text{C}$ である。まず、光電子分光測定によって、Si 2p と Ge 3d の内殻準位の差 $\Delta E_{\text{Si,Ge}}$ を測定する。内殻準位はスピン軌道相互作用によって分裂しているため、実際に測定しているのは重みつき平均値である。Si について、この重み付き平均された内殻準位と HH, LH, SO の 3 つの価電子帯端の平均値とのエネルギー差 E_{Si}^0 を歪

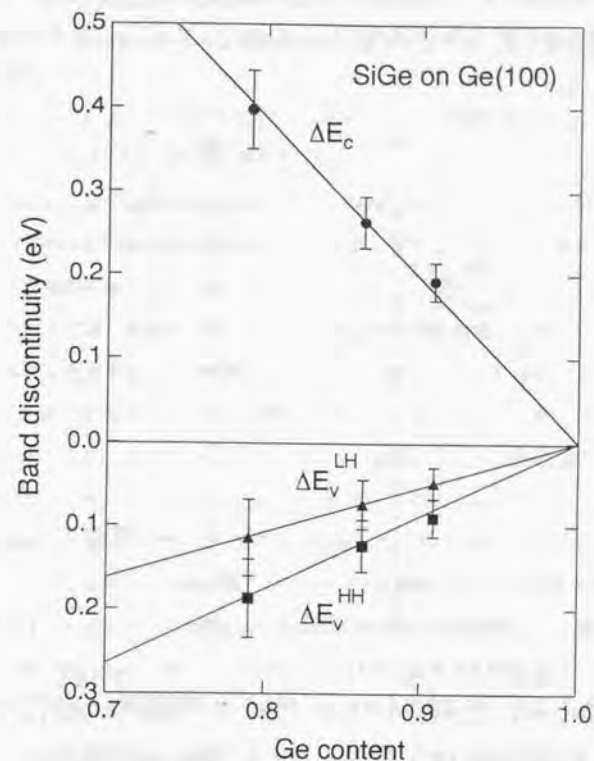


図 7.6 Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面におけるバンド不連続量。

の影響を考慮に入れて、LMTO (linear muffin-tin-orbital) 法を用いて計算する。Ge の場合は内殻準位と価電子帯端とのエネルギー差 E_{Ge} については文献値を用いる。さらに、Si については、変形ポテンシャルを用いて、価電子帯端の平均位置からのバンド端のエネルギー差 E_{Si}^h を計算する。以上述べてきたそれぞれのエネルギー差は図 7.7 に示すような関係になっている。

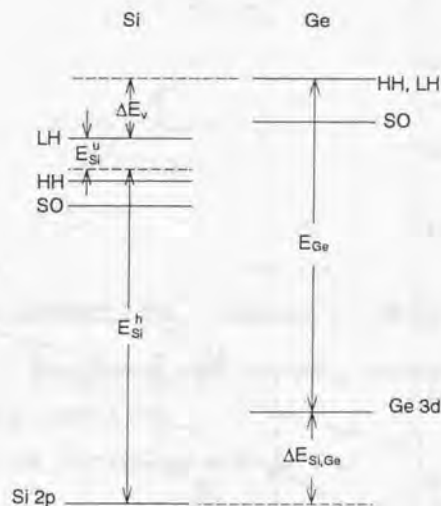


図 7.7 Ge と、Ge に格子整合するように歪んだ Si の模式的なエネルギーバンド図。

したがって、価電子帯のバンド不連続量 ΔE_v は

$$\Delta E_v = \Delta E_{Si,Ge} + E_{Ge} - E_{Si}^h - E_{Si}^u \quad (7.5)$$

より求められる。

Yu 等 [90] も X 線光電子分光測定から $\Delta E_{v1} = 0.22 \pm 0.13$ eV としている。ただし、彼らの手法は Schwartz [89] 等の手法と異なっている。まず、完全に緩和した $Si_{1-x}Ge_x$ 層の上に Si 層、Ge 層ないしは Si/Ge 超格子の 3 種類の試料を作製する。Si 層を成長した試料

に対しては Si 2p 内殻準位と価電子帯端とのエネルギー差を、Ge 層を成長した試料に対しては Ge 3d 内殻準位と価電子帯端とのエネルギー差を、Si/Ge 超格子を成長した試料からは Si 2p 内殻準位と Ge 3d 内殻準位のエネルギー差を測定し、基板として用いる $Si_{1-x}Ge_x$ 層の混晶組成を変化させることによって、それぞれの歪依存性を調べる。この結果からバンド不連続量を求めている。

一方、Rodrigues 等 [91] は本研究と同じく PR 法によって実験を行い、 $Q_c = 0.73 \pm 0.03$ 、 $\Delta E_{v1} = 0.32 \pm 0.08$ eV という結果を報告している。

本研究で得られた結果は他の結果に比べて、 ΔE_{v1} が大きくなっている。特に、光電子分光測定によって得られた値との差が著しい。まず考えられる原因は、X 線光電子分光測定のエネルギー分解能が低いという点である。エネルギー分解能が低いために、実際に測定できるスペクトルでは、複数個の準位からのスペクトルが重なった状態になる。このようなスペクトルから内殻準位やバンド端のエネルギー位置を決定する場合には、モデル関数をフィッティングして行うが、モデル関数をどのように選ぶかという点であいまいさが残ると考えられる。また、もう一つの理由としては、おそらく Ge の表面偏析によって界面の急峻性がぼけてしまったためであると考えられる。このことは Si(100) 上の Ge について得られた実験値が理論値 [92] と一致するのに対して、Ge(100) 上の Si に対してはあまり一致しないという結果とも符合する。すなわち、Ge 基板上に Si を成長させた場合、Ge 原子は偏析するのに対して、Si 基板上に Ge を成長させた場合には Si は偏析しないからだと考えられる。Rodrigues 等 [91] の結果は、本研究の結果と比較的近い。しかし、彼らは Ge/Ge_{0.7}Si_{0.3} 歪超格子を用いているので、井戸間の結合によって生じる準位の広がりや、ミニバンドの形成のために遷移エネルギーを決定する際に誤差を生じやすい。これに対して、本研究では単一量子井戸を用いているので、このようなあいまいさはない。したがって、彼らの結果との違いは、用いた試料の構造の違いか、計算で用いた非放物線性を表すパラメータの違いによるものであろう。

次に Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面の平坦性に関して検討を行った。以下その手順について述べる。まず図 7.8 に示すように PR スペクトルの温度依存性を測定する。図から明らかのように、温度が低くなるにつれてスペクトルの形状が鋭くなっている。また、エネルギー

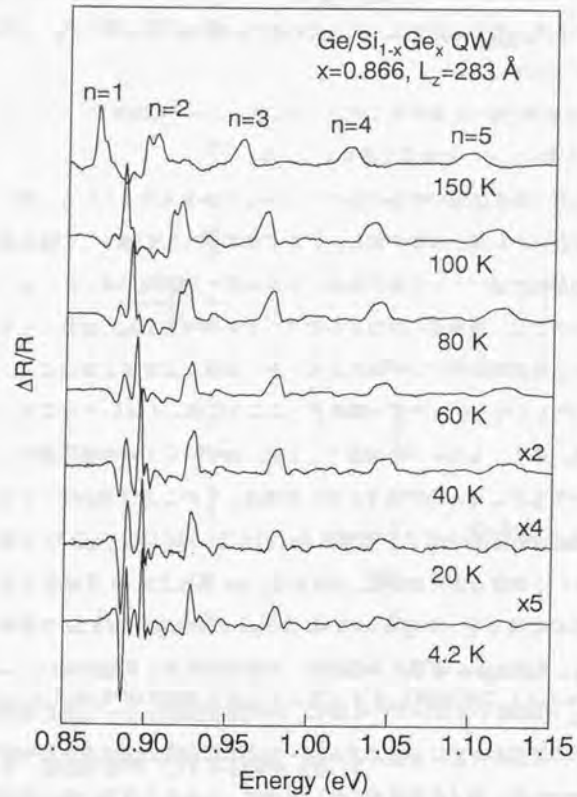


図 7.8 Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸の PR スペクトルの温度依存性.

の高い準位ほどスペクトルの形状が広がっている。これらのスペクトルに対してフィッティングを行って求めた線幅の温度依存性を示したのが図 7.9 である。図に示したのはいずれも重い正孔の量子準位に関するものである。

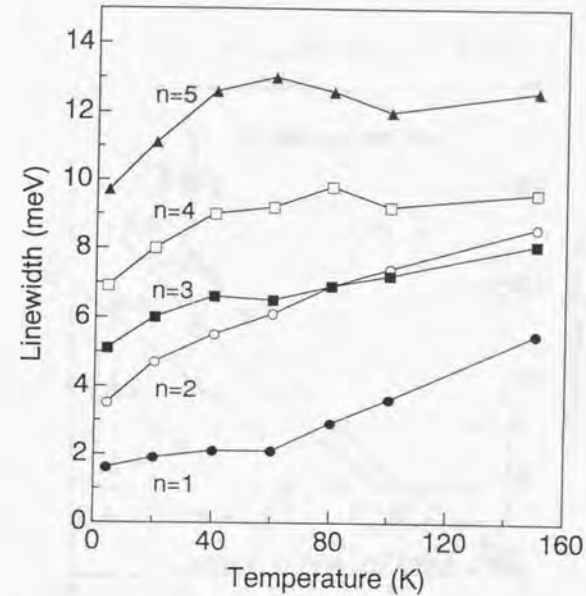
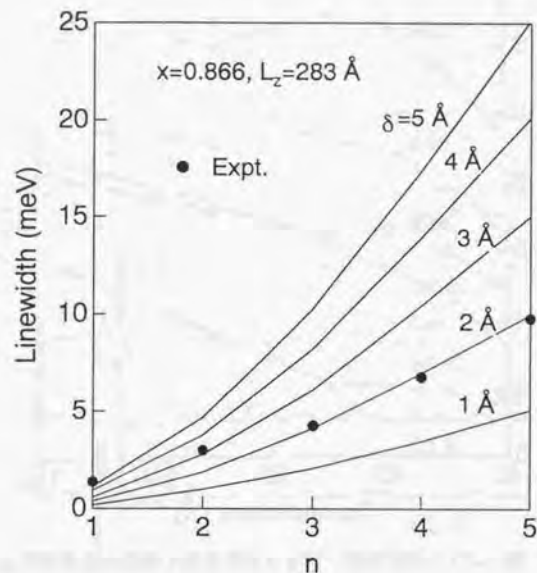


図 7.9 重い正孔の量子準位に関する光学遷移の線幅の温度依存性.

図 7.9 に示した線幅の温度依存性からそれぞれの準位について最小の線幅をプロットしたのが図 7.10 である。ここではこの値を温度にはよらず、構造等に起因する線幅として採用した。図中に示した折線は、温度によらず、構造等に起因する線幅が井戸幅のゆらぎ及び障壁層が混晶である事に由来すると考え、

$$\Gamma_0 = \left(\frac{\partial E}{\partial L_z} \right)_x \Delta L_z + \left(\frac{\partial E}{\partial x} \right)_{L_z} \Delta x \quad (7.6)$$

より求めたものである。実験値はほぼ $\Delta L_z = 2 \text{ \AA}$ の線に近いことがわかる。他の試料についても同様の値が得られている。したがって、Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面においては± 1 ML

図 7.10 Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面の平坦性の評価.

程度の凹凸があることがわかる。

最後に Ge/Si_{1-x}Ge_x 系の成長においては成長条件によってはかなり大きな段差が生じていることを示す PR スペクトルを図 7.11 に示す。これは成長温度 450°C で作製した

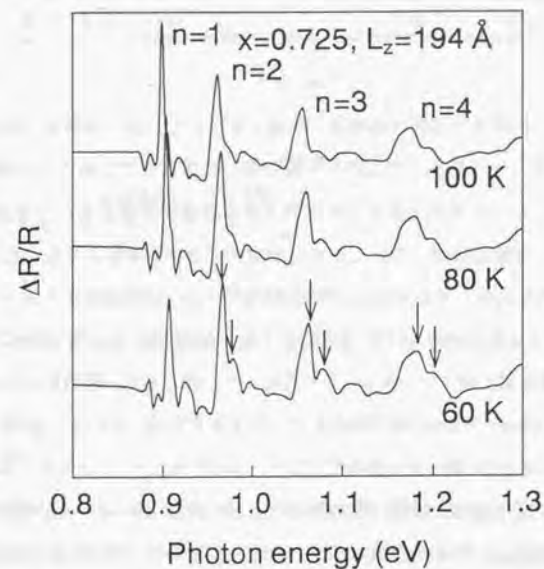


図 7.11 10 ML 程度の大きな段差が生じていることを示す PR スペクトル.

Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸から得られた PR スペクトルの温度依存性を示したもので、測定温度を低温にするにしたがってピークが2つに分裂していくのがわかる。測定温度 60 K でのスペクトルで示した矢印が遷移エネルギーの位置に対応している。分裂した2つのピークがそれぞれ異なる井戸幅に起因する遷移であると仮定して計算を行うと $n=2\sim 4$ の分裂したエネルギー差をすべてうまく説明でき、 $\Delta L_z = 15 \text{ \AA}$ 程度の井戸幅の違いに対応することがわかる。Klipstein 等 [?] は ER 法によって同様の現象を GaAs/AlGaAs 量子井戸について観測している。彼らの用いた試料は多重量子井戸構造なので、井戸毎の井戸幅

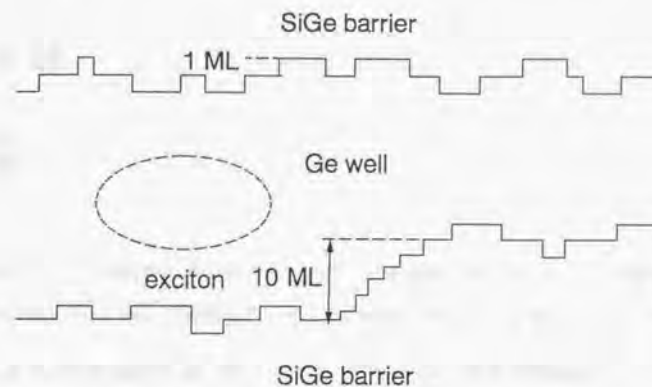
表 7.5 異なる井戸幅による遷移エネルギー差.

	実験値 (meV)	計算値 (meV)		
		ΔL_z (Å)		
		10	15	20
2e-2hh	12.7	6.2	9.6	13.3
3e-3hh	22.0	14.1	21.9	30.2
4e-4hh	39.5	24.0	37.2	51.3

の違いか、一つの井戸内での井戸幅の違いかはっきりしないが、本研究で用いた試料は単一量子井戸なので、一つの井戸内での井戸幅の違いに対応していることは明らかである。15 Å はおよそ 10 ML に相当するからかなり大きな段差が存在することを意味している。ただし、ピークが明瞭に分裂している事から励起子の Bohr 半径よりもかなり大きい範囲で生じている凹凸であると考えられる。Kawabata 等 [111] は低速電子エネルギー損失分光 (LEELS) やオージェ電子分光 (AES) を用いて Ge(100) 基板上への Si 成長に関する研究を行った結果、成長温度 500°C で Si を 12 Å 成長させた後でも Ge 基板からの信号が観測されることから、Volmer-Weber 様式の成長で小さな島が形成していると結論している。本研究の場合には Ge と Si のヘテロ界面ではなく、Ge と $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ のヘテロ界面なのでまったく同様の議論が成り立つとは言い難いがこれと似た状況になっている可能性がある。ただし、必ずしも Volmer-Weber 様式の成長が起こっているのではなく、むしろ歪ヘテロエピタキシャル成長に特有な現象 [112,113] ではないかと考えている。すなわち、歪ヘテロ成長においては、歪エネルギーはミスフィット転位の発生によってのみ緩和されるわけではなく、三次元成長することによっても緩和される。例えば、Tanaka と Ohkouchi [114] の STM 観察によって、InP 基板上に GaAs を MBE 成長した場合、2 ML を越えると成長モードが二次元から三次元に変化することがわかっている。

以上界面の平坦性に関する検討から Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子井戸においてはヘテロ界面は図 7.12 の様な状況になっているものと考えている。つまり、励起子の Bohr 半径と同程度の大きさにおいては ± 1 ML の凹凸が存在し、それよりも大きい範囲では 10 ML 程度の高さの島が存在している。ここでは Kawabata 等の実験結果に基づいて、Ge 基板上に $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 層

を成長させたときに大きな島が成長すると考えて片方の界面にのみ、この大きな凹凸が存在するとした。

図 7.12 Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸構造における界面の平坦性を示す模式図.

7.4 まとめ

光変調反射分光法を用いて Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 歪障壁量子井戸における Γ 点に関する量子準位間の光学遷移を観測した。その測定結果から、 Γ 点でのバンド不連続量を見積もることができ、伝導帯のバンドオフセット比 $Q_c = 0.68 \pm 0.08$ という値が得られた。また、光学遷移の線幅の量子数依存性から、Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ヘテロ界面における平坦性を検討した。その結果、横方向が励起子の Bohr 半径程度の広がりをもつ、高さ 1 ML 程度の凹凸が存在することがわかった。さらに、成長条件によっては高さが 10 ML 程度の段差が生じていることを示す PR スペクトルの分裂が観測された。

第8章

結論

本研究では、従来検討が不十分であった歪ヘテロ構造におけるバンド不連続量に関して光変調反射分光法を用いて研究を行った。その結果、次のことが明らかになった。

- (1) 光変調反射分光法が、量子数 n の大きい量子準位間の遷移や障壁層のエネルギーギャップ等の高エネルギー遷移も観測できることを利用して、GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪障壁量子井戸のヘテロ界面におけるバンド不連続量の P 組成依存性を調べた。その結果、バンド不連続量は P 組成 $x < 0.23$ の範囲では、ほぼ線形に変化することがわかった。また伝導帯のバンドオフセット比は $Q_c = 0.57 \pm 0.05$ であることがわかった。この結果は Pistol と Liu のフォトルミネッセンス励起スペクトルの結果を十分に説明できる。さらに、応力のない状態での価電子帯のバンド不連続量を見積もると 380 ± 70 meV となる。この値は GaAs/GaAs_{1-x}P_x 歪“井戸”量子井戸構造から得られた結果とよく一致する。以上のことから、本研究で得られた値は、従来報告されていた値と比べて、信頼性の高いものであると考えられる。
- (2) 光変調反射分光法によって、GaAs_{1-x}P_x/GaP 歪量子井戸における Γ 点に形成された量子準位に関する遷移を観測し、その結果から、伝導帯のバンドオフセット比が $Q_c = 0.60 \pm 0.04$ であることがわかった。さらに、フォトルミネッセンス測定によって、X 点に形成された量子準位に関する遷移を観測した。光変調反射分光の測定結果から、X 点におけるバンドラインアップは type I であることが明らかになり、この結果はフォトルミネッセンスによって得られた結果と一致することがわかった。さ

らに、従来、この系に関しては伝導帯のバンド不連続量はほとんどゼロに近い極めて小さいと考えられていたが、本研究ではそのような描像は正しくないことがわかった。

- (3) 光変調反射分光法を用いて Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造のヘテロ界面の Γ 点におけるバンド不連続量の Ge 組成依存性を明らかにした。その結果、バンド不連続量は Ge 組成に対してほぼ線形に変化し、伝導帯のバンドオフセット比 $Q_0 = 0.68 \pm 0.08$ という値が得られた。
- (4) Ge/Si_{1-x}Ge_x 歪障壁量子井戸構造の光変調反射スペクトルにおいて観測される光学遷移の線幅の量子数依存性から Ge/Si_{1-x}Ge_x ヘテロ界面の平坦性について検討を行い、横方向が励起子の Bohr 半径程度の範囲で ± 1 ML 程度の凹凸が存在することがわかった。また、成長条件によっては高さが 10 ML 程度の段差が生じていることを示す PR スペクトルの分裂が観測された。

付録 A

スピン軌道相互作用による分裂エネルギーへの歪の影響

変形ポテンシャル理論では、厳密にはスピン軌道相互作用による分裂エネルギー Δ_0 への歪の影響を考えなければならない。そのような表式は例えば、Suzuki と Hensel [115] によって与えられている。第 2 章の (2.1) 式に対応するように書き表すと、軌道歪ハミルトニアン H_1 及び、歪に依存するスピン軌道ハミルトニアン H_2 はそれぞれ

$$H_1 = -a_1(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - 3b_1[(L_x^2 - \frac{1}{3}L^2)\varepsilon_{xx} + \text{c.p.}] - \sqrt{3}d_1[(L_x L_y + L_y L_x)\varepsilon_{xy} + \text{c.p.}] \quad (\text{A.1})$$

$$H_2 = -a_2(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})(\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - 3b_2[(L_x \sigma_x - \frac{1}{3}\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma})\varepsilon_{xx} + \text{c.p.}] - \sqrt{3}d_2[(L_x \sigma_y + L_y \sigma_x)\varepsilon_{xy} + \text{c.p.}] \quad (\text{A.2})$$

で与えられる。ただし、 L は角運動量演算子、 $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリ行列である。 a_1, b_1, d_1 は軌道変形ポテンシャル、 a_2, b_2, d_2 はスピンに依存した変形ポテンシャルである。第 2 章の (2.2) 式で示した行列に対応するように、書き表すと

$$H_{\text{strain}} = H_{\text{SO}} + H_1 + H_2$$

$$= - \begin{bmatrix} P_1 + Q_1 & -S_1 & R_1 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}S_1 & -\sqrt{2}R_1 \\ -S_1^\dagger & P_1 - Q_1 & 0 & R_1 & \sqrt{2}Q_1 & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_1 \\ R_1^\dagger & 0 & P_1 - Q_1 & S_1 & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_1^\dagger & -\sqrt{2}Q_1 \\ 0 & R_1^\dagger & S_1^\dagger & P_1 + Q_1 & \sqrt{2}R_1^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}S_1^\dagger \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S_1^\dagger & \sqrt{2}Q_1 & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_1 & \sqrt{2}R_1 & P_1 + \Delta_0 & 0 \\ -\sqrt{2}R_1^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}S_1^\dagger & -\sqrt{2}Q_1 & \frac{1}{\sqrt{2}}S_1 & 0 & P_1 + \Delta_0 \\ P_2 + 2Q_2 & -2S_2 & 2R_2 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_2 & \sqrt{2}R_2 \\ -2S_2^\dagger & P_2 - 2Q_2 & 0 & 2R_2 & -\sqrt{2}Q_2 & \sqrt{\frac{3}{2}}S_2 \\ 2R_2^\dagger & 0 & P_2 - 2Q_2 & 2S_2 & \sqrt{\frac{3}{2}}S_2^\dagger & \sqrt{2}Q_2 \\ 0 & 2R_2^\dagger & 2S_2^\dagger & P_2 + 2Q_2 & -\sqrt{2}R_2^\dagger & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_2^\dagger \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S_2^\dagger & -\sqrt{2}Q_2 & \sqrt{\frac{3}{2}}S_2 & -\sqrt{2}R_2 & -2P_2 & 0 \\ \sqrt{2}R_2^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S_2^\dagger & \sqrt{2}Q_2 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_2 & 0 & -2P_2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

ただし,

$$P_j = a_j(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (\text{A.4})$$

$$Q_j = -\frac{b_j}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (\text{A.5})$$

$$R_j = \frac{\sqrt{3}}{2}b_j(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id_j\varepsilon_{xy} \quad (\text{A.6})$$

$$S_j = -d_j(\varepsilon_{xx} - i\varepsilon_{yz}) \quad (\text{A.7})$$

である。また基底は

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = |1, 1\rangle\alpha \quad (\text{A.8})$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 1\rangle\beta \quad (\text{A.9})$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0\rangle\beta + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, -1\rangle\alpha \quad (\text{A.10})$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = |1, -1\rangle\beta \quad (\text{A.11})$$

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0\rangle\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1\rangle\beta \quad (\text{A.12})$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0\rangle\beta - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1\rangle\alpha \quad (\text{A.13})$$

である。

表 A.1 変形ポテンシャル a_2 および b_2

	a_2 (eV)	b_2 (eV)
GaAs [28]	-0.04	0.27 ± 0.1
GaP [29]	-0.4 ± 0.3	0.2 ± 0.2
Ge [28]	0.1	-0.14 ± 0.08
Si [116]	0	-0.1 ± 0.15

実験によって求められている a_2 および b_2 の値を表 A.1 にまとめておく。いずれの値も 0 に近いことがわかる。 a_2 および b_2 の影響を考慮した場合としない場合の違いを図 A.1 に示す。図からわかるように考慮した場合としない場合でそれほど大きな差はなく、むしろ変形ポテンシャルの値の誤差による影響の方が大きい。

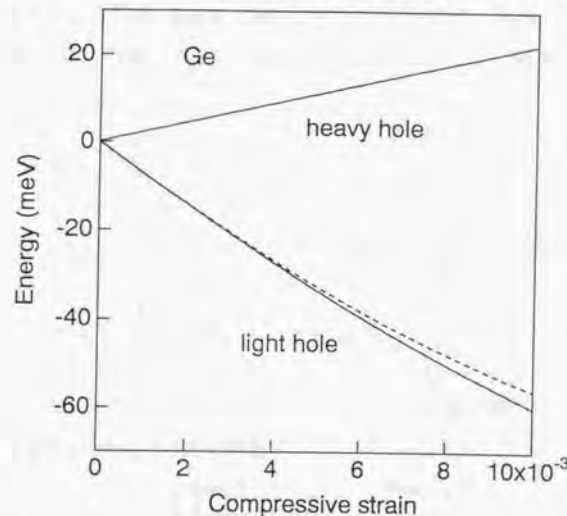


図 A.1 変形ポテンシャル a_2 および b_2 の影響を考慮した場合としない場合の Ge の価電子帯に対する歪の効果の違い。実線は考慮した場合に、破線はしない場合に対応する。

る変形ポテンシャルの値の誤差による影響の方が大きい。

付録 B

ヘテロ界面における包絡関数の境界条件

(2.38), (2.39) 式に示した境界条件は形式的なもので、実際に計算を行う場合には役に立たない。そこで、ここでは、具体的な表式を与えることにする。なお、ここで示す表式は Chuang の論文 [117] に準じている。j 領域にある包絡関数 $\psi^j(\mathbf{r})$ は平面波の線形結合によって

$$\begin{aligned} \psi^j = & A_{\text{HH}j} \begin{bmatrix} F_{1\text{HH}}^j \\ F_{2\text{HH}}^j \\ F_{3\text{HH}}^j \end{bmatrix} e^{ik_{\parallel}\rho + ik_{jz}^{(\text{HH})}(z-d_j)} + B_{\text{HH}j} \begin{bmatrix} F_{1\text{HH}}^{j-} \\ F_{2\text{HH}}^{j-} \\ F_{3\text{HH}}^{j-} \end{bmatrix} e^{ik_{\parallel}\rho - ik_{jz}^{(\text{HH})}(z-d_j)} \\ & + A_{\text{LH}j} \begin{bmatrix} F_{1\text{LH}}^j \\ F_{2\text{LH}}^j \\ F_{3\text{LH}}^j \end{bmatrix} e^{ik_{\parallel}\rho + ik_{jz}^{(\text{LH})}(z-d_j)} + B_{\text{LH}j} \begin{bmatrix} F_{1\text{LH}}^{j-} \\ F_{2\text{LH}}^{j-} \\ F_{3\text{LH}}^{j-} \end{bmatrix} e^{ik_{\parallel}\rho - ik_{jz}^{(\text{LH})}(z-d_j)} \\ & + A_{\text{SO}j} \begin{bmatrix} F_{1\text{SO}}^j \\ F_{2\text{SO}}^j \\ F_{3\text{SO}}^j \end{bmatrix} e^{ik_{\parallel}\rho + ik_{jz}^{(\text{SO})}(z-d_j)} + B_{\text{SO}j} \begin{bmatrix} F_{1\text{SO}}^{j-} \\ F_{2\text{SO}}^{j-} \\ F_{3\text{SO}}^{j-} \end{bmatrix} e^{ik_{\parallel}\rho - ik_{jz}^{(\text{SO})}(z-d_j)} \quad (\text{B.1}) \end{aligned}$$

と表される。したがって、(2.38), (2.39) 式を $z = d_j$ における $\psi^j(\mathbf{r})$ と $\psi^{j+1}(\mathbf{r})$ の境界条件として適用すると、次のような行列形式

$$M_j \begin{bmatrix} A_{\text{HH}j} \\ A_{\text{LH}j} \\ A_{\text{SO}j} \\ B_{\text{HH}j} \\ B_{\text{LH}j} \\ B_{\text{SO}j} \end{bmatrix} = M_{j+1} P_{j+1} \begin{bmatrix} A_{\text{HH}(j+1)} \\ A_{\text{LH}(j+1)} \\ A_{\text{SO}(j+1)} \\ B_{\text{HH}(j+1)} \\ B_{\text{LH}(j+1)} \\ B_{\text{SO}(j+1)} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

で表される。ただし、 M_j および P_j は 6×6 の行列で M_j の成分は

$$(M_j)_{11} = F_{1\text{HH}}^j$$

$$(M_j)_{12} = F_{1LH}^j$$

$$(M_j)_{13} = F_{1SO}^j$$

$$(M_j)_{14} = F_{1HH}^{j-}$$

$$(M_j)_{15} = F_{1LH}^{j-}$$

$$(M_j)_{16} = F_{1SO}^{j-}$$

$$(M_j)_{21} = F_{2HH}^j$$

$$(M_j)_{22} = F_{2LH}^j$$

$$(M_j)_{23} = F_{2SO}^j$$

$$(M_j)_{24} = F_{2HH}^{j-}$$

$$(M_j)_{25} = F_{2LH}^{j-}$$

$$(M_j)_{26} = F_{2SO}^{j-}$$

$$(M_j)_{31} = F_{3HH}^j$$

$$(M_j)_{32} = F_{3LH}^j$$

$$(M_j)_{33} = F_{3SO}^j$$

$$(M_j)_{34} = F_{3HH}^{j-}$$

$$(M_j)_{35} = F_{3LH}^{j-}$$

$$(M_j)_{36} = F_{3SO}^{j-}$$

$$(M_j)_{41} = iu_j k_{jz}^{(HH)} F_{1HH}^j + v_j k_{\parallel} F_{2HH}^j - \frac{v_j}{\sqrt{2}} k_{\parallel} F_{3HH}^j$$

$$(M_j)_{42} = iu_j k_{jz}^{(LH)} F_{1LH}^j + v_j k_{\parallel} F_{2LH}^j - \frac{v_j}{\sqrt{2}} k_{\parallel} F_{3LH}^j$$

$$(M_j)_{43} = iu_j k_{jz}^{(SO)} F_{1HH}^j + v_j k_{\parallel} F_{2SO}^j - \frac{v_j}{\sqrt{2}} k_{\parallel} F_{3SO}^j$$

$$(M_j)_{44} = -iu_j k_{jz}^{(HH)} F_{1HH}^{j-} + v_j k_{\parallel} F_{2HH}^{j-} - \frac{v_j}{\sqrt{2}} k_{\parallel} F_{3HH}^{j-}$$

$$(M_j)_{45} = -iu_j k_{jz}^{(LH)} F_{1LH}^{j-} + v_j k_{\parallel} F_{2LH}^{j-} - \frac{v_j}{\sqrt{2}} k_{\parallel} F_{3LH}^{j-}$$

$$(M_j)_{46} = -iu_j k_{jz}^{(SO)} F_{1HH}^{j-} + v_j k_{\parallel} F_{2SO}^{j-} - \frac{v_j}{\sqrt{2}} k_{\parallel} F_{3SO}^{j-}$$

$$(M_j)_{51} = -v_j k_{\parallel} F_{1HH}^j + iw_j k_{jz}^{(HH)} F_{2HH}^j - it_j k_{jz}^{(HH)} F_{3HH}^j - \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{3HH}^j$$

$$(M_j)_{52} = -v_j k_{\parallel} F_{1LH}^j + iw_j k_{jz}^{(LH)} F_{2LH}^j - it_j k_{jz}^{(LH)} F_{3LH}^j - \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{3LH}^j$$

$$(M_j)_{53} = -v_j k_{\parallel} F_{1SO}^j + iw_j k_{jz}^{(SO)} F_{2SO}^j - it_j k_{jz}^{(SO)} F_{3SO}^j - \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{3SO}^j$$

$$(M_j)_{54} = -v_j k_{\parallel} F_{1HH}^{j-} - iw_j k_{jz}^{(HH)} F_{2HH}^{j-} + it_j k_{jz}^{(HH)} F_{3HH}^{j-} - \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{3HH}^{j-}$$

$$(M_j)_{55} = -v_j k_{\parallel} F_{1LH}^{j-} - iw_j k_{jz}^{(LH)} F_{2LH}^{j-} + it_j k_{jz}^{(LH)} F_{3LH}^{j-} - \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{3LH}^{j-}$$

$$(M_j)_{56} = -v_j k_{\parallel} F_{1SO}^{j-} - iw_j k_{jz}^{(SO)} F_{2SO}^{j-} + it_j k_{jz}^{(SO)} F_{3SO}^{j-} - \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{3SO}^{j-}$$

$$(M_j)_{61} = \frac{1}{\sqrt{2}} v_j k_{\parallel} F_{1HH}^j - it_j k_{jz}^{(HH)} F_{2HH}^j + \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{2HH}^j + is_j k_{jz}^{(HH)} F_{3HH}^j$$

$$(M_j)_{62} = \frac{1}{\sqrt{2}} v_j k_{\parallel} F_{1LH}^j - it_j k_{jz}^{(LH)} F_{2LH}^j + \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{2LH}^j + is_j k_{jz}^{(LH)} F_{3LH}^j$$

$$(M_j)_{63} = \frac{1}{\sqrt{2}} v_j k_{\parallel} F_{1SO}^j - it_j k_{jz}^{(SO)} F_{2SO}^j + \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{2SO}^j + is_j k_{jz}^{(SO)} F_{3SO}^j$$

$$(M_j)_{64} = \frac{1}{\sqrt{2}} v_j k_{\parallel} F_{1HH}^{j-} + it_j k_{jz}^{(HH)} F_{2HH}^{j-} + \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{2HH}^{j-} - is_j k_{jz}^{(HH)} F_{3HH}^{j-}$$

$$(M_j)_{65} = \frac{1}{\sqrt{2}} v_j k_{\parallel} F_{1LH}^{j-} + it_j k_{jz}^{(LH)} F_{2LH}^{j-} + \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{2LH}^{j-} - is_j k_{jz}^{(LH)} F_{3LH}^{j-}$$

$$(M_j)_{66} = \frac{1}{\sqrt{2}} v_j k_{\parallel} F_{1SO}^{j-} + it_j k_{jz}^{(SO)} F_{2SO}^{j-} + \sqrt{\frac{3}{2}} v_j k_{\parallel} F_{2SO}^{j-} - is_j k_{jz}^{(SO)} F_{3SO}^{j-} \quad (B.3)$$

である。ここで、

$$u_j = \gamma_{1j} - 2\gamma_{2j} \quad (B.4)$$

$$v_j = \sqrt{3}\gamma_{3j} \quad (B.5)$$

$$w_j = \gamma_{1j} + 2\gamma_{2j} \quad (B.6)$$

$$t_j = 2\sqrt{2}\gamma_{2j} \quad (B.7)$$

$$s_j = \gamma_{1j} \quad (B.8)$$

である。 $l_j = d_j - d_{j+1}$ は層の厚さである。また,

$$P_j = \begin{bmatrix} e^{-ik_{jz}^{(HH)}l_j} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_{jz}^{(LH)}l_j} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-ik_{jz}^{(SO)}l_j} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_{jz}^{(HH)}l_j} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{ik_{jz}^{(LH)}l_j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{ik_{jz}^{(SO)}l_j} \end{bmatrix} \quad (\text{B.9})$$

である。単一量子井戸の場合は

$$A_{HH1} = A_{LH1} = A_{SO1} = 0 \quad (\text{B.10})$$

$$B_{HH3} = B_{LH3} = B_{SO3} = 0 \quad (\text{B.11})$$

であるから、境界条件は

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ B_{HH1} \\ B_{LH1} \\ B_{SO1} \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} A_{HH3} \\ A_{LH3} \\ A_{SO3} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.12})$$

となる。ただし,

$$U = (M_1^{-1}M_2P_2)(M_2^{-1}M_2P_3) \\ = \begin{bmatrix} U_a & U_b \\ U_c & U_d \end{bmatrix} \quad (\text{B.13})$$

である。 U_a, U_b, U_c, U_d は 3×3 行列である。(B.12) 式よりわかるように,

$$\det|U_a| = 0 \quad (\text{B.14})$$

を解けばよいことになる。

付録 C

電場変調による誘電関数の変化

波動関数 $\psi_{nk}(\mathbf{r}, t)$ は (3.2), (3.3) 式によって表される摂動項によって次のように級数展開できる。

$$\begin{aligned} \psi_{nk}(\mathbf{r}, t) &= \varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t} \\ &+ [G^1H_1 + G^+H_+ + G^-H_-] \varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t} \\ &+ [G^{11}H_1G^1H_1 + G^{1+}H_1G^+H_+ + G^{1-}H_1G^-H_- \\ &+ G^{1+}H_+G^1H_1 + G^{++}H_+G^+H_+ + G^{+-}H_+G^-H_- \\ &+ G^{1-}H_-G^1H_1 + G^{+-}H_-G^+H_+ + G^{--}H_-G^-H_-] \varphi_{nk}(\mathbf{r})e^{-i\omega_{nk}t} \\ &+ [G^{111}H_1G^{11}H_1G^1H_1 + G^{11+}H_1G^{1+}H_+G^+H_+ \\ &+ G^{11-}H_1G^{1-}H_-G^-H_- + G^{11+}H_1G^{1+}H_+G^1H_1 \\ &+ G^{1++}H_1G^{++}H_+G^+H_+ + G^{1+-}H_1G^{+-}H_+G^-H_- \\ &+ G^{11-}H_1G^{1-}H_-G^1H_1 + G^{1+-}H_1G^{+-}H_-G^+H_+ \\ &+ G^{1--}H_1G^{--}H_-G^-H_- + G^{11+}H_+G^{11}H_1G^1H_1 \\ &+ G^{1++}H_+G^{1+}H_+G^+H_+ + G^{1+-}H_+G^{1-}H_-G^-H_- \\ &+ G^{1++}H_+G^{1+}H_+G^1H_1 + G^{+++}H_+G^{++}H_+G^+H_+ \\ &+ G^{++-}H_+G^{+-}H_+G^-H_- + G^{1+-}H_+G^{1-}H_-G^1H_1 \\ &+ G^{++-}H_+G^{+-}H_-G^+H_+ + G^{+--}H_+G^{--}H_-G^-H_- \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + G^{11-} H_- G^{11} H_1 G^1 H_1 + G^{1+-} H_- G^{1+} H_1 G^+ H_+ \\
& + G^{1--} H_- G^{1-} H_1 G^- H_- + G^{1+-} H_- G^{1+} H_+ G^1 H_1 \\
& + G^{++-} H_- G^{++} H_+ G^+ H_+ + G^{+--} H_- G^{+-} H_+ G^- H_- \\
& + G^{1--} H_- G^{1-} H_- G^1 H_1 + G^{1+-} H_1 G^{+-} H_- G^+ H_+ \\
& + G^{---} H_- G^{--} H_- G^- H_- \Big] \varphi_{nk}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_{nk}t} + \dots
\end{aligned} \tag{C.1}$$

で与えられる。ここで、Green 関数 $G^{ij\dots}$ は

$$G^{ij\dots} = \frac{1}{E_{nk} + S_i + S_j + \dots - H_0} \tag{C.2}$$

ただし、

$$i = \begin{Bmatrix} 1 \\ + \\ - \end{Bmatrix} \tag{C.3}$$

$$S_i = \begin{Bmatrix} i\hbar\eta \\ E_+ \\ -E_- \end{Bmatrix} \tag{C.4}$$

である。結晶の誘電テンソル ϵ_{ij} は分極 $P = \{P_i\}$ によって求められる。

$$D_i = \epsilon_{ij} E_j = \delta_{ij} E_j + 4\pi P_i \tag{C.5}$$

ただし、

$$P = -\frac{e}{V} \sum_{vk} \langle \psi_{vk}(t) | \mathbf{x} | \psi_{vk}(t) \rangle \tag{C.6}$$

で $\psi_{vk}(\mathbf{r}, t)$ は (C.1) 式によって与えられる。 v という添字は充滿した価電子帯を意味する。(C.1) 式を用いて (C.6) 式を評価するのは難しい。6 個の一次項、27 個の二次項、108 個の三次項があるからである。しかし、次の事を考えると簡単になる。

誘起された分極は光子の場の時間依存性をもたなければならない。というのは、反射光の周波数は入射光と等しいからである。ここでは $H_+ \sim e^{-i\omega_+ t}$ と等しい時間依存性をもつ

ものを選ぶことにする。こうすると、一次、二次、三次の項がそれぞれ 2, 6, 24 個に減る。

一次	$\langle vk G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk G^- H_- vk \rangle$
二次	$\langle vk G^{1+} H_1 G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk G^{1+} H_+ G^1 H_1 vk \rangle$
	$\langle vk (G^{1-} H_1 G^- H_-)^* vk \rangle$	$\langle vk (G^{1-} H_- G^1 H_1)^* vk \rangle$
	$\langle vk (G^1 H_1)^* G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk (G^- H_-)^* G^1 H_1 vk \rangle$
三次	$\langle vk G^{11+} H_1 G^{1+} H_1 G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk G^{11+} H_1 G^{1+} H_+ G^1 H_1 vk \rangle$
	$\langle vk G^{11+} H_+ G^{11} H_1 G^1 H_1 vk \rangle$	$\langle vk G^{++-} H_+ G^{+-} H_+ G^- H_- vk \rangle$
	$\langle vk G^{++-} H_+ G^{+-} H_- G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk G^{++-} H_- G^{+-} H_+ G^+ H_+ vk \rangle$
	$\langle vk (G^1 H_1)^* G^{1+} H_1 G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk (G^1 H_1)^* G^{1+} H_+ G^1 H_1 vk \rangle$
	$\langle vk (G^+ H_+)^* G^{++} H_+ G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk (G^- H_-)^* G^{11} H_1 G^1 H_1 vk \rangle$
	$\langle vk (G^- H_-)^* G^{+-} H_+ G^- H_- vk \rangle$	$\langle vk (G^- H_-)^* G^{+-} H_- G^+ H_+ vk \rangle$
	$\langle vk (G^{11-} H_1 G^{1-} H_1 G^- H_-)^* vk \rangle$	$\langle vk (G^{11-} H_1 G^{1-} H_- G^1 H_1)^* vk \rangle$
	$\langle vk (G^{11-} H_- G^{11} H_1 G^1 H_1)^* vk \rangle$	$\langle vk (G^{+-} H_- G^{+-} H_- G^+ H_+)^* vk \rangle$
	$\langle vk (G^{+-} H_- G^{+-} H_+ G^- H_-)^* vk \rangle$	$\langle vk (G^{+-} H_+ G^{--} H_- G^- H_-)^* vk \rangle$
	$\langle vk (G^{1-} H_1 G^- H_-)^* G^1 H_1 vk \rangle$	$\langle vk (G^{1-} H_- G^1 H_1)^* G^1 H_1 vk \rangle$
	$\langle vk (G^{--} H_- G^- H_-)^* G^- H_- vk \rangle$	$\langle vk (G^{11} H_1 G^1 H_1)^* G^+ H_+ vk \rangle$
	$\langle vk (G^{+-} H_- G^+ H_+)^* G^+ H_+ vk \rangle$	$\langle vk (G^{+-} H_+ G^- H_-)^* G^+ H_+ vk \rangle$

さらに、適当な周波数依存性 (すなわち $\sim e^{i\omega t}$) をもった項の中で分母に共鳴因子 (すなわち $E_{nk} + E_+ - H_0 + ix$ というもの) があるものを選ぶ。三次までで、 ΔP に寄与するものは

$$\begin{aligned}
\Delta P &= -\frac{e}{V} \sum_{vk} \langle vk | \mathbf{x} G^{1+} H_1 G^+ H_+ | vk \rangle \\
&\quad -\frac{e}{V} \sum_{vk} \langle vk | \mathbf{x} G^{11+} H_1 G^{1+} H_1 G^+ H_+ | vk \rangle
\end{aligned} \tag{C.8}$$

のみとなる。その他の項は少なくとも一つは非共鳴因子を含むから、少なくとも Γ/E_+ だけオーダーが小さくなる。しかし、この仮定は $\hbar\omega$ が基礎吸収端近くないしはその上になければ成り立たない。

$$\langle n'k' | G^{ij\dots} | nk \rangle = \delta_{nn'} \delta_{kk'} (E_{nk} - E_{n'k'} + S_i + S_j + \dots)^{-1} \tag{C.9}$$

$$\langle n'k' | \mathbf{x} | nk \rangle = \begin{cases} -\frac{i\hbar P_{n'n}(\mathbf{k})}{m E_{n'n}(\mathbf{k})} \delta_{k'k} & (n' \neq n) \\ i\delta_{k'k} \nabla_{\mathbf{k}} & (n' = n) \end{cases} \tag{C.10}$$

ここで、 $P_{n'n}(\mathbf{k}) = -i\hbar \langle n'k' | \nabla_{\mathbf{x}} | nk \rangle$ は運動量行列要素である。 \mathbf{k} についての中間和は演算子が \mathbf{k} について対角なのですべて消える。分母が同じ周波数で共鳴するためには、すべての

中間状態は同じバンドに対応しなければならない。したがって、interband 項 ($n \neq n'$) は分極を表す演算子 α と入射光の相互作用 H_+ に関係し、dc 電場の相互作用 H_1 は intraband 項 ($n = n'$) に関係する。(C.9), (C.10) 式を用いると (C.8) 式は近似的に

$$\begin{aligned} \Delta P = & -\frac{ie^3\hbar^2}{m^2} e^{i\eta t} \sum_{v,c,k} \frac{P_{vc}}{E_{cv}} \frac{1}{E_+ + i\hbar\eta - E_{cv}(k)} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left(\frac{1}{E_+ - E_{cv}(k)} \frac{\mathbf{E}_2 \cdot \mathbf{P}_{cv}}{E_{cv}} \right) \\ & + \frac{e^4\hbar^2}{m^2} e^{2i\eta t} \sum_{v,c,k} \frac{P_{vc}}{E_{cv}} \frac{1}{E_+ + i2\hbar\eta - E_{cv}(k)} \\ & \times \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left[\frac{1}{E_+ + i\hbar\eta - E_{cv}(k)} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left(\frac{1}{E_+ - E_{cv}(k)} \frac{\mathbf{E}_2 \cdot \mathbf{P}_{cv}}{E_{cv}} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

と表される。ただしこれ以後、 $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1$ は dc 電場を表すことにする。 Γ は励起状態の lifetime を示すものとする。 Γ は実際は \mathbf{k} の関数だが、共鳴付近では十分ゆっくり変化するものとする近似的に定数として良い。

$$\frac{1}{W_{cv}} = \frac{1}{E_+ - E_{cv}(k)} \quad (\text{C.12})$$

と定義し、 $\hat{\varepsilon} = \mathbf{E}_2/|\mathbf{E}_2|$ の向きの P の成分のみを残すと (C.5), (C.8), (C.12) 式より

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon_{cv}(\omega, \Gamma, \mathbf{E}) = & -\frac{4\pi e^3\hbar^2}{m^2 V} \sum_k \frac{(\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv}^*)}{E_{cv}} \frac{1}{W} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left(\frac{1}{W} \frac{(\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv})}{E_{cv}} \right) \\ & + \frac{4\pi e^4\hbar^2}{m^2 V} \sum_k \frac{(\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv}^*)}{E_{cv}} \frac{1}{W} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left[\frac{1}{W} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left(\frac{1}{W} \frac{(\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv})}{E_{cv}} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

結晶が反転対称性 ($\mathbf{P}_{cv}^* = \mathbf{P}_{cv}$) を持つか、 \mathbf{P}_{cv} が \mathbf{k} に依存しないとすると、2 次の項は次のように書かれる。

$$\Delta \epsilon \sim \sum_k F(\mathbf{k}) \mathbf{E} \cdot \nabla_k F(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{E} \cdot \nabla_k [F(\mathbf{k})^2] \quad (\text{C.14})$$

これは Brillouin zone の対称性によって、 $(F(\mathbf{k}))^2$ は \mathbf{k} の偶関数となるから) 和をとると 0 になる。したがって、 \mathbf{E} について 1 次の項が存在するかしないかは運動量行列要素の \mathbf{k} 依存性による。ところがこの \mathbf{k} 依存性は結晶の反転対称性のあるなしを考えなくてもよいくらい小さい。3 次の項については $1/W_{cv}(k)$ が $P_{cv}(k)$ や $E_{cv}(k)$ よりも \mathbf{k} に強く依存することから単純化することが出来る。すなわち、(C.8) 式の ∇_k は $1/W$ についてのみ

作用させればよい。さらに、 $\Delta \epsilon$ の共鳴部分でのエネルギー範囲は Γ のオーダーなので、非共鳴の分母 E_{cv} は $\hbar\omega$ としてよい。したがって $\Delta \epsilon_{cv}$ は次のように書き表される。

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon(\omega, \Gamma, \mathbf{E}) = & \frac{4\pi e^4 |\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2}{m^2 \omega^2 V} \\ & \times \sum_k \frac{1}{W_{cv}} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \left(\frac{1}{W_{cv}} \mathbf{E} \cdot \nabla_k \frac{1}{W_{cv}} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

$$\mathbf{E} \cdot \nabla_k (1/W_{cv}) = (1/W_{cv}^2) (\mathbf{E} \cdot \nabla_k E_{cv}) \quad (\text{C.16})$$

$$\begin{aligned} 0 = & \sum_k \mathbf{E} \cdot \nabla_k [(1/W_{cv}^4) (\mathbf{E} \cdot \nabla_k E_{cv})] \\ = & -4 \sum_k (1/W_{cv}^5) (\mathbf{E} \cdot E_{cv})^2 \\ & + \sum_k (1/W_{cv}^4) (\mathbf{E} \cdot \nabla_k)^2 E_{cv} \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

を用いると

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon(\omega, \Gamma, \mathbf{E}) = & \frac{\pi e^4 |\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2}{m^2 \omega^2 V} \sum_k \frac{1}{W_{cv}^4} (\mathbf{E} \cdot \nabla_k)^2 E_{cv}(\mathbf{k}) \\ = & \frac{2Q}{\pi \omega^2} d^3 k \frac{(\hbar\Omega)^3}{[E_+ - E_{cv}(\mathbf{k})]^4} \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} Q = & \frac{4\pi^2 e^2 |\hat{\varepsilon} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2}{m^2} \left(\frac{2}{(2\pi)^3} \right) \\ (\hbar\Omega)^3 = & \frac{1}{8} e^2 (\mathbf{E} \cdot \nabla_k)^2 E_{cv} \\ = & e^2 |\mathbf{E}|^2 \hbar^2 / 8\mu_{\parallel} \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

である。誘電関数が

$$\epsilon_{cv}(\omega, \Gamma) = -\frac{Q}{\pi \omega^2} \int d^3 k \frac{1}{E_+ - E_{cv}(\mathbf{k})} \quad (\text{C.21})$$

と表されることから、もし、 $\hbar\Omega$ があるエネルギー範囲でほとんど \mathbf{k} に依存しないとすると

$$\Delta \epsilon_{cv}(E, \Gamma, \mathbf{E}) = \frac{1}{3E^2} \left(\hbar\Omega \frac{\partial}{\partial E} \right)^3 E^2 \epsilon_{cv}(E, \Gamma) \quad (\text{C.22})$$

となる。

付録 D

Maxwell 方程式の X 線回折への適用

X 線は荷電粒子によって散乱されるが、原子核による X 線の散乱については、核の質量が大きいために考える必要はない。すなわち電子による散乱のみを考えれば良いことになる [50]。

まず、原子内における電子の運動の振動数は $\omega_0 \sim v/a$ 程度である。ここで、 v は電子の速度、 a は原子の大きさを表す。X 線の波長 λ は $\lambda \sim a$ であり、 $v \ll c$ であることから、電子の運動の振動数 ω_0 は X 線の振動数 $\omega \sim c/\lambda$ に比べて小さいことがわかる。このため、電磁波の電場中の電子の運動方程式は

$$m\dot{v}' = eE \quad (\text{D.1})$$

と表される。すなわち、X 線にとっては電子を自由電子とみなすことができる。(D.1) 式から電磁波の電場 $E = E_0 e^{-i\omega t}$ によって生じる電子の速度は

$$v' = \frac{ie}{m\omega} E \quad (\text{D.2})$$

となる。電子数密度を $n(\mathbf{r})$ とすると、電磁波の電場によって生じる電流密度は

$$j' = nev' = \frac{ine^2}{m\omega} E \quad (\text{D.3})$$

と書き表される。この電流密度を微視的な Maxwell 方程式に代入すると

$$\begin{aligned} \text{rot} B &= -i\omega\epsilon_0\mu_0 E + \mu_0 j' \\ &= -i\omega\mu_0\left(\epsilon_0 - \frac{ne^2}{m\omega^2}\right)E \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

となる。

ここで、電流が電場に与える影響、すなわち散乱の効果が小さいこと、言い換えれば不等式

$$\frac{ne^2}{m\omega^2\epsilon_0} \ll 1 \quad (\text{D.5})$$

が成り立つことを仮定する。実際、今の場合には、典型的な値として $n \sim 10^{22} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $\omega \sim 10^{18} \text{ s}^{-1}$ を代入すると、 $ne^2/m\omega^2\epsilon_0 \sim 10^{-4} - 10^{-5}$ 程度になることがわかる。したがって、

$$\epsilon = \epsilon_0 - \frac{ne^2}{m\omega^2} \quad (\text{D.6})$$

として、 $D = \epsilon E$ という関係を導入すれば、(D.4) 式は $\text{rot} B = -i\omega\mu_0 D$ の形になる。このことから、誘電率を表す (D.6) 式は波長が $\lambda \sim a$ の場合にも使えることがわかる。ただし、この場合は、 E, D は、物理的には無限小の体積内でまだ平均していない電場に関するものであり、通常の場合の取扱いとは異なっていることに注意する必要がある。すなわち、誘電率 ϵ は座標の関数であることを意味している。

ところで、重い原子による X 線散乱の場合には、外殻電子に対しては $\omega \gg \omega_0$ が満足されるが、内殻電子に対しては $\omega \leq \omega_0$ すなわち $\lambda \gg a$ となるような場合が起こる。このような場合には、波長が十分長いということから、通常のとおりにして、 D と E との間の比例係数として誘電率の概念を導入することができる。ただし、厳密には (D.6) 式の形で定義できるのは外殻電子からの寄与だけである。そのため、内殻電子からの寄与は、内殻の体積にわたる平均によって計算を行わなければならない。

以上の考察から、X 線に対しても座標に依存する ϵ を用いることにより、 $D = \epsilon E$ と書けばよい。

付録 E

局所逆格子ベクトルの導出

歪のない結晶中における基本ベクトルを a_i とすると、歪んだ結晶中における基本ベクトル a'_i は

$$a'_i(\mathbf{r}) = \left\{ 1 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \right\} a_i(\mathbf{r}_0) \quad (\text{E.1})$$

となる。ただし、 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ は座標 \mathbf{r} における原子の変位ベクトルを表す関数である。 \mathbf{r}_0 は歪によって \mathbf{r} へと変位した原子がもともといた位置を示すベクトルである。また、 $(\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{r})$ は

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{E.2})$$

というテンソルになっている。

逆格子ベクトルの定義から、歪んだ結晶中における逆格子ベクトル b'_j は

$$b'_j \cdot a'_i = \delta_{ij} \quad (\text{E.3})$$

すなわち、

$$\begin{aligned} b'_j &= (a'_i)^{-1} \\ &= a_j^{-1} \left\{ 1 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \right\}^{-1} \\ &= b_j \left\{ 1 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

となる。さらに

$$\left\{ 1 - \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \right\} \left\{ 1 + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \right\} \cong 1 \quad (\text{E.5})$$

を用いると

$$\begin{aligned} b'_j &= b_j \left\{ 1 - \left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \right\} \\ &= b_j - b_j \left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{r}} \right)_{\mathbf{r}_0} \\ &= b_j - \text{grad}(b_j \cdot \mathbf{u})_{\mathbf{r}_0} \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

となる。

付録 F

散乱振幅の微分方程式の導出

(4.54) 式の左辺より

$$\begin{aligned} i \frac{dX}{dA} &= \frac{i}{\pi |\psi'_H| / \lambda \sqrt{|\gamma_0 \gamma_H|}} \frac{d}{dz} (D_H(\mathbf{r}) / \sqrt{b} D_0(\mathbf{r})) \\ &= \frac{i \lambda |\gamma_H|}{\pi |\psi'_H|} \left\{ \frac{1}{D_0(\mathbf{r})} \frac{dD_H(\mathbf{r})}{dz} - \frac{D_H(\mathbf{r})}{\{D_0(\mathbf{r})\}^2} \frac{dD_0(\mathbf{r})}{dz} \right\} \\ &= \frac{i \lambda |\gamma_H|}{\pi |\psi'_H| D_0(\mathbf{r})} \left\{ \frac{dD_H(\mathbf{r})}{dz} - \sqrt{b} X \frac{dD_0(\mathbf{r})}{dz} \right\} \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

となる。(4.51), (4.52) 式を z 方向についての方程式に書き直すと

$$i \frac{\lambda}{\pi} \gamma_0 \frac{dD_0(\mathbf{r})}{dz} = \psi_0 D_0(\mathbf{r}) + P \psi_{-H} D_H(\mathbf{r}) \quad (\text{F.2})$$

$$i \frac{\lambda}{\pi} \gamma_H \frac{dD_H(\mathbf{r})}{dz} = \psi_0 D_H(\mathbf{r}) + P \psi_H D_0(\mathbf{r}) - \alpha_H D_H(\mathbf{r}) \quad (\text{F.3})$$

となる。ただし、 P は偏光因子で

$$P = \begin{cases} 1 & (\sigma \text{ 偏光}) \\ \cos 2\theta_B & (\pi \text{ 偏光}) \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

である。(F.2), (F.3) 式を (F.1) 式に代入して

$$\begin{aligned} i \frac{dX}{dA} &= \frac{1}{|\psi'_H| D_0(\mathbf{r})} \{ \psi_0 D_H(\mathbf{r}) + P \psi_H D_0(\mathbf{r}) - \alpha_H D_H(\mathbf{r}) \\ &\quad + |\gamma_H| \sqrt{|\gamma_0 \gamma_H|} \frac{1}{\gamma_0} X \{ \psi_0 D_0(\mathbf{r}) + P \psi_H D_H(\mathbf{r}) \} \} \\ &= \frac{1}{|\psi'_H| D_0(\mathbf{r})} \{ \psi_0 D_H(\mathbf{r}) + P \psi_H D_0(\mathbf{r}) - \alpha_H D_H(\mathbf{r}) \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sqrt{|\gamma_H/\gamma_0|} X (\psi_0 D_0(\tau) + P \psi_H D_H(\tau)) \} \\
& = \frac{1}{|\psi'_H|} \left\{ \sqrt{b} \psi_0 X + P \psi_H - \sqrt{b} \alpha_H X + \frac{1}{\sqrt{b}} X (\psi_0 + P \sqrt{b} \psi_H X) \right\} \\
& = P \frac{\psi_H}{|\psi'_H|} X^2 - \frac{1}{|\psi'_H|} \left(\sqrt{b} \psi_0 - \sqrt{b} \alpha_H + \frac{1}{\sqrt{b}} \psi_0 \right) X + P \frac{\psi_H}{|\psi'_H|} \quad (F.5)
\end{aligned}$$

ここで,

$$1 + ik = 1 + i \frac{\psi_H''}{\psi_H'} = \frac{\psi_H' + i \psi_H''}{\psi_H'} = \frac{\psi_H}{\psi_H'} \quad (F.6)$$

$$\begin{aligned}
y + ig &= \frac{[(1+b)\psi_0' - b\alpha_H]}{2|\psi_H'|\sqrt{b}} + i \frac{(1+b)\psi_0''}{2|\psi_H'|\sqrt{b}} \\
&= \frac{1}{2|\psi_H'|} \left(\sqrt{b} \psi_0 + \frac{1}{\sqrt{b}} \psi_0 - \sqrt{b} \alpha_H \right) \quad (F.7)
\end{aligned}$$

であるから

$$i \frac{dX}{dA} = P(1+ik)X^2 - 2(y+ig)X + P(1+ik) \quad (F.8)$$

が得られる。

付録 G

積分型の導出

まず, (4.54) 式を変形していく。

$$\begin{aligned}
i \frac{dX}{dA} &= P(1+ik)X^2 - 2(y+ig)X + P(1+ik) \\
&= -BX^2 - 2CX - B \quad (G.1)
\end{aligned}$$

より,

$$\begin{aligned}
\frac{dX}{BX^2 + 2CX + B} &= idA \\
\frac{dX}{B \{ (X + C/B)^2 + 1 - C^2/B^2 \}} &= idA \quad (G.2)
\end{aligned}$$

上式を積分すると

$$\int_{X_0}^X \frac{dX}{B \{ (X + C/B)^2 + 1 - C^2/B^2 \}} = \int_{A_0}^A idA \quad (G.3)$$

$$\frac{1}{B} \frac{1}{\sqrt{1 - C^2/B^2}} \left\{ \tan^{-1} \left(\frac{X + C/B}{\sqrt{1 - C^2/B^2}} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{X_0 + C/B}{\sqrt{1 - C^2/B^2}} \right) \right\} = i(A - A_0) \quad (G.4)$$

$$\tan^{-1} \left(\frac{BX + C}{\sqrt{B^2 - C^2}} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{BX_0 + C}{\sqrt{B^2 - C^2}} \right) = i\sqrt{B^2 - C^2}(A - A_0) \quad (G.5)$$

ここで,

$$\tan^{-1} x - \tan^{-1} y = \tan^{-1} \left(\frac{x - y}{1 + xy} \right) \quad (G.6)$$

という関係を用いると,

$$\frac{B(X - X_0)/\sqrt{B^2 - C^2}}{1 + (BX + C)(BX_0 + C)/(B^2 - C^2)} = \tan[s(A - A_0)] \quad (G.7)$$

と変形できる。ただし、 $s = i\sqrt{B^2 - C^2}$ である。さらに変形を行っていくと

$$\frac{B(X - X_0)}{\sqrt{B^2 - C^2}} = \tan[s(A - A_0)] + \frac{(BX + C)(BX_0 + C)}{B^2 - C^2} \tan[s(A - A_0)] \quad (\text{G.8})$$

$$i \frac{B(X - X_0)}{s} = \tan[s(A - A_0)] - \frac{(BX + C)(BX_0 + C)}{s^2} \tan[s(A - A_0)] \quad (\text{G.9})$$

$$i \frac{BX}{s} + \frac{(BX_0 + C)BX}{s^2} \tan[s(A - A_0)] = i \frac{BX_0}{s} + \tan[s(A - A_0)] - \frac{(BX_0 + C)C}{s^2} \tan[s(A - A_0)] \quad (\text{G.10})$$

$$X = \frac{i \frac{BX_0}{s} + \tan[s(A - A_0)] - \frac{(BX_0 + C)C}{s^2} \tan[s(A - A_0)]}{i \frac{B}{s} + \frac{(BX_0 + C)}{s^2} B \tan[s(A - A_0)]}$$

$$= \frac{sX_0 - i \frac{s^2}{B} \tan[s(A - A_0)] + i \left(\frac{C}{B} + X_0 \right) C \tan[s(A - A_0)]}{s - i(C + BX_0) \tan[s(A - A_0)]}$$

$$X = \frac{sX_0 + i(B + CX_0) \tan[s(A - A_0)]}{s - i(C + BX_0) \tan[s(A - A_0)]} \quad (\text{G.11})$$

これで、(4.62) 式が得られた。

付録 H

X_j の複素数表示

$$X_j = \frac{s_j X_{j-1} + i(B_j + C_j X_{j-1}) \tan[s_j(A_j - A_{j-1})]}{s_j - i(C_j + B_j X_{j-1}) \tan[s_j(A_j - A_{j-1})]} \quad (\text{H.1})$$

においては s_j, X_j, B_j, C_j が複素数であるために実際に取り扱うには困難である。そこで

$$s_j = s'_j + i s''_j \quad (\text{H.2})$$

$$X_j = X'_j + i X''_j \quad (\text{H.3})$$

$$B_j = B'_j + i B''_j \quad (\text{H.4})$$

$$C_j = C'_j + i C''_j \quad (\text{H.5})$$

として実数部と虚数部に分けることを考える。実際に計算を行うと

$$X_j = \frac{\alpha_j + i\beta_j}{\gamma_j + i\delta_j}$$

$$= \frac{\alpha_j \gamma_j + \beta_j \delta_j}{\gamma_j^2 + \delta_j^2} + i \frac{\beta_j \gamma_j - \alpha_j \delta_j}{\gamma_j^2 + \delta_j^2} \quad (\text{H.6})$$

で、

$$\alpha_j = (s'_j X'_{j-1} - s''_j X''_{j-1}) \cos\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} + (s'_j X'_{j-1} - s''_j X''_{j-1}) \cosh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\}$$

$$- (B'_j + C'_j X'_{j-1} - C''_j X''_{j-1}) \sinh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\}$$

$$- (B''_j + C''_j X'_{j-1} - C'_j X''_{j-1}) \sin\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} \quad (\text{H.7})$$

$$\beta_j = (s''_j X'_{j-1} - s'_j X''_{j-1}) \cos\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} + (s''_j X'_{j-1} - s'_j X''_{j-1}) \cosh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\}$$

$$\begin{aligned} &+(B'_j + C'_j X'_{j-1} - C''_j X''_{j-1}) \sin\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} \\ &-(B''_j + C''_j X''_{j-1} - C'_j X'_{j-1}) \sinh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\} \end{aligned} \quad (\text{H.8})$$

$$\begin{aligned} \gamma_j = &s'_j \cos\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} + s'_j \cosh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\} \\ &+(C'_j + B'_j X'_{j-1} - B''_j X''_{j-1}) \sinh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\} \\ &+(C''_j + B''_j X''_{j-1} - B'_j X'_{j-1}) \sin\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} \end{aligned} \quad (\text{H.9})$$

$$\begin{aligned} \delta_j = &s''_j \cos\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} + s''_j \cosh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\} \\ &-(C'_j + B'_j X'_{j-1} - B''_j X''_{j-1}) \sin\{2s'_j(A_j - A_{j-1})\} \\ &+(C''_j + B''_j X''_{j-1} - B'_j X'_{j-1}) \sinh\{2s''_j(A_j - A_{j-1})\} \end{aligned} \quad (\text{H.10})$$

となる。

付録 I

伝導帯の非放物線性

ダイヤモンド構造の伝導帯 (Γ_6^-) や閃亜鉛鉱構造の伝導帯 (Γ_6) の底の形状は他のバンドとの結合の影響によって、実際には、等方的にも放物線形にもなっていない。このことは、特に、井戸幅の狭い量子井戸におけるサブバンドエネルギーや、井戸幅の広い量子井戸における高い次数を持つサブバンドエネルギーに大きく影響すると考えられる。

Kane [109] は $k \cdot p$ 摂動によって、伝導帯の非放物線性の検討を行った。伝導帯および、価電子帯として $|iS \downarrow\rangle, |(X-iY) \uparrow/\sqrt{2}\rangle, |Z \downarrow\rangle, |(X+iY) \uparrow/\sqrt{2}\rangle, |iS \uparrow\rangle, |-(X+iY) \downarrow/\sqrt{2}\rangle, |Z \uparrow\rangle, |(X-iY) \downarrow/\sqrt{2}\rangle$ の 8 つのバンドを基底にとると、バンド間の相互作用を表す 8×8 行列は

$$\begin{bmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{bmatrix} \quad (\text{I.1})$$

$$H = \begin{bmatrix} E_S & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_P - \Delta/3 & \sqrt{2}\Delta/3 & 0 \\ kP & \sqrt{2}\Delta/3 & E_P & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_P + \Delta/3 \end{bmatrix} \quad (\text{I.2})$$

と書き表される。ただし、 Δ はスピン軌道相互作用による分裂エネルギーであり、

$$\Delta = \frac{3\hbar i}{4m^2 c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right| Y \right\rangle \quad (\text{I.3})$$

と表される。 P は次のように s 軌道と p 軌道の結合を表す量である。

$$P = -i \frac{\hbar}{m} \langle S | p_z | Z \rangle \quad (\text{I.4})$$

(I.2) 式より,

$$E' \{ E'(E' - E_G)(E' + \Delta) - k^2 P^2 (E' + 2\Delta/3) \} = 0 \quad (I.5)$$

が得られる。ただし, E' は

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (I.6)$$

である。また, ここでは

$$E_S = E_G \quad (I.7)$$

$$E_P = -\Delta/3 \quad (I.8)$$

とした。ただし, E_G は $k=0$ におけるバンドギャップである。

(I.5) 式に対して, k^2 が小さい場合の近似解を伝導帯の底に対して求めると

$$E_c = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + k^2 P^2 \frac{(E_G + 2\Delta/3)}{E_G(E_G + \Delta)} \quad (I.9)$$

となり, これより $k=0$ における電子の有効質量を

$$\frac{1}{m_0^*} = \frac{1}{m} + \frac{2P^2 (E_G + 2\Delta/3)}{\hbar^2 E_G(E_G + \Delta)} \quad (I.10)$$

と求めることが出来る。

Bastard と Brum [118] や, Rodrigues 等 [91], あるいは Sugawara 等 [119] は基本的にはこの式に基づいて, 伝導帯の非放物線性に関する議論をしている。自由電子の項や, 二次摂動の補正項を加える等の違いはあるにせよ, E_G のかわりに, E_G に閉じ込めエネルギーを加えた値を代入することによって非放物線性を導き出している。すなわち, 伝導帯の底からのエネルギー位置を E とするとき電子の有効質量は

$$\frac{1}{m^*(E)} = \frac{1}{m} + \frac{2P^2 (E + E_G + 2\Delta/3)}{\hbar^2 (E + E_G)(E + E_G + \Delta)} \quad (I.11)$$

で表される。ここで, 自由電子の項を無視すると

$$m^*(E) = \frac{\hbar^2 (E + E_G)(E + E_G + \Delta)}{2P^2 (E + E_G + 2\Delta/3)} \cong m_0^* \left\{ 1 + \frac{3E_G^2 + 4\Delta E_G + 2\Delta^2}{3E_G(E_G + \Delta)(E_G + 2\Delta/3)} E \right\} \quad (I.12)$$

と近似できる。

一方, (I.5) 式に戻って,

$$E = E_G + P^2 \frac{(E_G + 2\Delta/3)}{E_G(E_G + \Delta)} k^2 + \alpha_0 k^4 \quad (I.13)$$

というように, k についての4次の項を導入し, その係数を求めると,

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= -\frac{P^4 (E_G + 2\Delta/3)(3E_G^2 + 4\Delta E_G + 2\Delta^2)}{3E_G^3 (E_G + \Delta)^3} \\ &= -\left(\frac{\hbar^2}{2m_0^*}\right)^2 \frac{3E_G^2 + 4\Delta E_G + 2\Delta^2}{3E_G(E_G + \Delta)(E_G + 2\Delta/3)} \end{aligned} \quad (I.14)$$

となり, 後述する (I.17) 式より, (I.12) 式の結果と一致することがわかる。

(I.12) 式より, 容易にわかるように, バンドギャップ E_G が小さい半導体では非放物線性が顕著になることがわかる。

ただし, ここで注意しておきたいのはこの議論では Γ_{8c} (2個), Γ_{8v} (4個), Γ_{7v} (2個) の合計8つのバンド間の結合をもとにしているという点である。(図 I.1 参照)

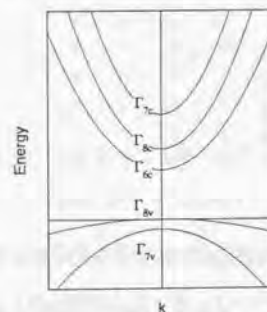


図 I.1 伝導帯の非放物線性を導くために考慮すべきバンド。

ところが, Rössler [104] は, 伝導帯の非放物線性を記述するためには, より高エネルギーに位置する伝導帯も含めた計算を行わなければならないと指摘している。そして, Γ_{7c} , Γ_{8c} を含めた 14×14 行列の計算を GaAs について実行し, 伝導帯の底から 50 meV 以上では, 8×8 行列に基づいた Kane のモデルとの差があることを示している。ここで, 伝導帯の

効質量を求めるために使われる通常の $k \cdot p$ 摂動によるモデル [120] と、 8×8 の Kane のモデル及び 14×14 のモデルについて、それぞれのモデルの違いがわかるように行列の形を示す。行列中、 \times 印がある部分のバンド間の結合を考慮している。

	Γ_{7c}	Γ_{8c}	Γ_{6c}	Γ_{8v}	Γ_{7v}
Γ_{7c}	\times		\times		
Γ_{8c}		\times	\times		
Γ_{6c}	\times	\times	\times	\times	\times
Γ_{8v}			\times	\times	
Γ_{7v}			\times		\times

通常の $k \cdot p$ 摂動によるモデル [120]

	Γ_{7c}	Γ_{8c}	Γ_{6c}	Γ_{8v}	Γ_{7v}
Γ_{7c}					
Γ_{8c}					
Γ_{6c}			\times	\times	\times
Γ_{8v}			\times	\times	\times
Γ_{7v}			\times	\times	\times

Kane の 8×8 モデル [109]

	Γ_{7c}	Γ_{8c}	Γ_{6c}	Γ_{8v}	Γ_{7v}
Γ_{7c}	\times	\times	\times	\times	\times
Γ_{8c}	\times	\times	\times	\times	\times
Γ_{6c}	\times	\times	\times	\times	\times
Γ_{8v}	\times	\times	\times	\times	\times
Γ_{7v}	\times	\times	\times	\times	\times

 14×14 モデル [104]

2次摂動によって高エネルギーに位置する伝導帯まで考慮した場合、伝導帯の分散は

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} + \alpha_0 k^4 + \beta_0 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \pm \gamma_0 [k^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) - 9k_x^2 k_y^2 k_z^2]^{1/2} \quad (I.15)$$

で与えられる [109]。今は、量子井戸におけるサブバンドエネルギーを問題にしているので、 $k_x = k_y = 0$ となることから、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0^*} k_z^2 + \alpha_0 k_z^4 \quad (I.16)$$

で与えられる。ここで、 α_0 は非放物線性を示すパラメータであり、 m_0^* は $k=0$ における電子の有効質量である。

実は、有効質量の定義は研究者によって異なっている。それらを以下に示す。

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2E}{\hbar^2 k^2} \quad \text{Ekenberg [106]} \quad (I.17)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2 k} \frac{dE}{dk} \quad \text{Ruf and Cardona [107]} \quad (I.18)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad \text{Rössler [104]} \quad (I.19)$$

これらの定義を (I.16) 式に適用すると

(I.17) 式より

$$m^*(E) \cong m_0^* \{1 - (2m_0^*/\hbar^2) \alpha_0 E\} \quad (I.20)$$

(I.18) 式より

$$m^*(E) \cong m_0^* \{1 - 2(2m_0^*/\hbar^2) \alpha_0 E\} \quad (I.21)$$

(I.19) 式より

$$m^*(E) \cong m_0^* \{1 - 6(2m_0^*/\hbar^2) \alpha_0 E\} \quad (I.22)$$

となる。まず、結論から言うと、量子井戸のサブバンドを考える場合には (I.17) 式を用いるのが正しい。(I.18) 式は質量は運動量を群速度で割ることによって得られるという半古典的な考え方に基づいて、

$$m = \frac{p}{v} = \frac{\hbar k}{(1/\hbar)(dE/dk)} \quad (I.23)$$

としている。したがって、この式は電気伝導に用いるのに適切であると考えられる。(I.19) 式は、一般的な固体物理の教科書にでてくる定義である。

一方、(I.17) 式は以下のような考え方に基づいている [106]。無限に深い井戸幅 a の量子井戸を考える。(I.16) 式が成り立つ場合のハミルトニアンは $k_x = -id/dz$ という置き換えによって、

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d^2}{dz^2} + \alpha_0 \frac{d^4}{dz^4} + V(z) \quad (I.24)$$

となる。ただし、

$$V(z) = \begin{cases} 0 & (|z| < \frac{1}{2}a) \\ \infty & (|z| \geq \frac{1}{2}a) \end{cases} \quad (I.25)$$

である。この場合の基底状態の解は

$$\psi = \cos Kz \quad (I.26)$$

であり、境界条件より、

$$K = \frac{\pi}{a} \quad (I.27)$$

である。また、固有エネルギーは

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2m_0^*} K^2 + \alpha_0 K^4 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_0^*} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \alpha_0 \left(\frac{\pi}{a}\right)^4 \end{aligned} \quad (I.28)$$

伝導帯の非放物線性を考慮して、 $K = \pi/a$ における場合を考えると

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*(K = \pi/a)} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \quad (I.29)$$

となる。(I.28) 式と (I.29) 式は等しくなければならないから、

$$\frac{\hbar^2}{2m^*(K = \pi/a)} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m_0^*} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \alpha_0 \left(\frac{\pi}{a}\right)^4 \quad (I.30)$$

となる。この関係は a がどのような値をとっても成り立たなければならないから、

$$\frac{1}{m^*(K)} = \frac{1}{m_0^*} + \frac{2\alpha_0}{\hbar^2} K^2 \quad (I.31)$$

が得られ、(I.17) 式の関係と一致する。

伝導帯の非放物線性を考慮する際に起こるもう一つの問題は深さが有限の量子井戸の場合のヘテロ界面における境界条件である。この境界条件も研究者によって異なっている。大別すると次の 3 つになる。

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d\psi}{dz} \right]_A = \left[\frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d\psi}{dz} \right]_B \quad \text{Hiroshima and Lang [121]} \quad (I.32)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d\psi}{dz} - \alpha_0 \frac{d^3\psi}{dz^3} \right]_A = \left[\frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d\psi}{dz} - \alpha_0 \frac{d^3\psi}{dz^3} \right]_B \quad \text{Nelson et al. [122]} \quad (I.33)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d\psi}{dz} - 2\alpha_0 \frac{d^3\psi}{dz^3} \right]_A = \left[\frac{\hbar^2}{2m_0^*} \frac{d\psi}{dz} - 2\alpha_0 \frac{d^3\psi}{dz^3} \right]_B \quad \text{Ekenberg [106]} \quad (I.34)$$

(I.33) 式は

$$\left[\frac{1}{m^*(E)} \frac{d\psi}{dz} \right]_A = \left[\frac{1}{m^*(E)} \frac{d\psi}{dz} \right]_B \quad (I.35)$$

という関係に基づいている。(I.34) 式は波動関数 (正確には包絡関数) の流れ密度が保存されるという条件より導かれる (詳細は [106] の APPENDIX) を参照のこと。

なお、本研究では有効質量の定義として

$$m^*(E) = m_0^*(1 + \alpha E) \quad (I.36)$$

を用いた。(I.16) 式を採用しなかったのは、この式より有効質量を導き出す定義がいくつかあり、誤解と混乱をまねく可能性があるからである。もうひとつ (I.16) 式を採用しなかった理由は、 $k = \sqrt{-\hbar^2/4\alpha_0 m_0^*}$ でエネルギーが極大になってしまうという問題があるからである。その極大値は $E = -\hbar^4/16\alpha_0^2 m_0^{*2}$ と表され、GaAs の場合 ($m_0^* = 0.067m$, $\alpha_0 = -2107 \text{ eV \AA}^4$ [106]) には $E = 0.39 \text{ eV}$ で極大となり、AlAs を障壁とするような深い量子井戸 (電子に対する障壁の高さは $\sim 0.8 \text{ eV}$) においてさえも、 0.39 eV より高いエネルギー準位は存在しないことになる。これは (I.16) 式が $k \ll \sqrt{-\hbar^2/4\alpha_0 m_0^*}$ でなければ成り立たないことを示している。そこで、このような問題を避けるためにも、本研究では (I.36) 式を用いている。

また、ヘテロ界面における境界条件については (I.35) 式を用いた。

謝辞

本研究を行うにあたり、終始変わらず暖かく、また時には厳しく御指導賜りました白木靖寛教授に心より感謝いたします。

本論文作成に際して、有益な御議論をしていただき、また適切な御助言をいただきました伊藤良一教授に深く感謝いたします。

実験を進めていく上で、常に相談にのっていただき、また励ましていただきました尾鍋研太郎助教授に深く感謝いたします。

深津晋助手には的確な御助言と常に励ましの言葉をいただき、心より感謝しております。

大竹省自技官には実験装置の作成や修理等でたいへんお世話になりました。深く感謝いたします。

本研究をまとめる上で、第 5 章に関しては太田和伸君、長原正樹君に、第 6 章に関しては原雄二郎君、杉田卓史君、橋本茂樹君に、第 7 章に関しては田井香織さん、武政敬三君に、実験で多大なる御協力をいただきました。ここに改めて心より感謝いたします。

MOVPE 成長による試料作製において、張雄さん、三浦喜直君、新田芳基君、三吉靖郎君に御協力をいただきましたことを感謝いたします。

Si MBE 成長に関して、装置の修理や基板の準備等で、藤田研君、五十嵐孝行君、吉田博信君、宇佐美徳隆君、太田岳児君に御協力していただきました。心より感謝いたします。

藤原聡君、村木康二君、張保平さんには実験結果の解析等でいろいろと議論していただき感謝しております。

また、お名前をあげませんが、フォトニクス材料分野、尾鍋研究室、伊藤研究室のみなさんの御協力なしには本論文も完成しえなかったと思います。ここに心よりの感謝の意を

表したいと思います。

参考文献

- [1] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
- [2] G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.* **53**, 1586 (1982).
- [3] G. C. Osbourn, R. M. Biefeld and P. L. Gourley, *Appl. Phys. Lett.* **41**, 172 (1982).
- [4] G. C. Osbourn, *J. Vac. Sci. Technol.* **B1**, 379 (1983).
- [5] G. C. Osbourn, P. L. Gourley, I. J. Fritz, R. M. Biefeld, L. R. Dawson and T. E. Zipperian, *Semiconductors and Semimetals* Vol. 24 (Academic Press, San Diego, 1987) edited by R. Dingle, p.459.
- [6] R. M. Biefeld, P. L. Gourley, I. J. Fritz and G. C. Osbourn, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 759 (1983)
- [7] E. Yablonovitch and E. O. Kane, *IEEE J. Lightwave Technol.* **LT-4**, 504 (1986).
- [8] I. Suemune, L. A. Coldren, M. Yamanishi and Y. Kan, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 1378 (1988).
- [9] T. Ohtoshi and N. Chinone, *IEEE Photon. Technol. Lett.* **1**, 117 (1989).
- [10] L. F. Tiemejier, P. J. A. Thijs, P. J. de Waard, J. J. Binsma and T. van Dongen, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2738 (1991).
- [11] R. Dingle, W. Wiegmann and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827 (1974).

- [12] R. Dingle, A. C. Gossard and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **34**, 1327 (1975).
- [13] R. C. Miller, D. A. Kleinman and A. C. Gossard, Phys. Rev. **B29**, 7085 (1984).
- [14] R. L. Anderson, Solid State Electron. **5**, 341 (1962).
- [15] W. A. Harrison, J. Vac. Sci. Technol. **14**, 1016 (1977).
- [16] W. R. Frensley and H. K. Kroemer, Phys. Rev. **B15**, 2642 (1977).
- [17] J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **52**, 465 (1984).
- [18] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, J. Vac. Sci. Technol. **B4**, 1035 (1986).
- [19] C. Weisbuch, R. Dingle, A. C. Gossard and W. Weigman, J. Vac. Sci. Technol. **17**, 1128 (1980).
- [20] J. C. Bean, L. C. Feldman, A. T. Fiory, S. Nakahara and I. K. Robinson, J. Vac. Sci. Technol. **A2**, 436 (1984).
- [21] H. Yaguchi, K. Fujita, S. Fukatsu, Y. Shiraki and R. Ito, Jpn. J. Appl. Phys. **30**, L1450 (1991).
- [22] R. People, J. C. Bean, D. V. Lang, A. M. Sergent, H. L. Störmer, K. W. Wecht, R. T. Lynch and K. Baldwin, Appl. Phys. Lett. **45**, 1231 (1984).
- [23] G. Abstreiter, H. Brugger and T. Wolf, Phys. Rev. Lett. **54**, 2441 (1985).
- [24] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).
- [25] G. E. Pikus and G. L. Bir, Fiz. Tverd. Tela **1**, 1642 (1959) [Sov. Phys. Solid State **1**, 1502 (1959)].
- [26] W. H. Kleiner and L. H. Roth, Phys. Rev. Lett. **2**, 334 (1959).

- [27] U. Schmid, N. E. Christensen and M. Cardona, Solid State Commun. **75**, 39 (1990).
- [28] M. Chandrasekhar and F. H. Pollak, Phys. Rev. **B15**, 2127 (1977).
- [29] H. Mathieu, P. Merle, E. L. Ameziane, B. Archilla, J. Camassel and G. Poiblaud, Phys. Rev. **B19**, 2209 (1979).
- [30] C. Herring and E. Vogt, Phys. Rev. **101**, 944 (1956).
- [31] C. Y. Chao and S. L. Chuang, Phys. Rev. **B46**, 4110 (1992).
- [32] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [33] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [34] J. S. Kline, F. H. Pollak and M. Cardona, Helv. Phys. Acta. **41**, 968 (1968).
- [35] A. G. Thompson, M. Cardona and K. L. Shaklee, Phys. Rev. **146**, 601 (1966).
- [36] G. Arnaud, P. Boring, B. Gil, J. C. Garcia, J. P. Landesman and M. Leroux, Phys. Rev. **B46**, 1886 (1992).
- [37] O. J. Glembocki, B. V. Shanabrook and W. T. Beard, Surface Sci. **174**, 206 (1986).
- [38] A. Ksendzov, H. Shen, F. H. Pollak, Surface Sci. **228**, 326 (1990).
- [39] N. G. Nilsson, Solid State Commun. **7**, 479 (1969).
- [40] J. G. Gay and L. T. Klauder, Jr., Phys. Rev. **172**, 811 (1968).
- [41] R. E. Nahory and J. L. Shay, Phys. Rev. Lett. **21**, 1569 (1968).
- [42] W. A. Albers, Jr., Phys. Rev. Lett. **23**, 410 (1969).
- [43] D. E. Aspnes, Solid State Commun. **8**, 267 (1970).
- [44] D. E. Aspnes, Surface Sci. **37**, 418 (1973).

- [45] D. E. Aspnes and J. E. Rowe, *Phys. Rev.* B5, 4022 (1972).
- [46] B. O. Seraphin and N. Bottka, *Phys. Rev.* 145, 628 (1966).
- [47] J. E. Rowe and D. E. Aspnes, *Phys. Rev. Lett.* 25, 162 (1970).
- [48] D. E. Aspnes and A. Frova, *Solid State Commun.* 7, 155 (1969).
- [49] B. V. Shanabrook, O. J. Glembocki and W. T. Beard, *Phys. Rev.* B35, 2540 (1987).
- [50] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, 2nd edition (Pergamon press, Oxford, 1984) p.439.
- [51] S. Takagi, *Acta Cryst.* 15, 1311 (1962).
- [52] S. Takagi, *J. Phys. Soc. Japan* 26, 1239 (1969).
- [53] D. Taupin, *Bull. Soc. Franc. Miner. Crystallogr.* 87, 469 (1964).
- [54] P. J. Burgeat and D. Taupin, *Acta Cryst.* A24, 99 (1968).
- [55] C. R. Wie, T. A. Tombrello and T. Vreeland, Jr., *J. Appl. Phys.* 59, 3743 (1986).
- [56] Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals* (Wiley, New York, 1945) p.118.
- [57] M. A. G. Halliwell, M. H. Lyons and M. J. Hill, *J. Cryst. Growth* 68, 523 (1984).
- [58] Y. Miura, K. Onabe, Y. Nitta, S. Fukatsu, Y. Shiraki and R. Ito, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30, L664 (1991).
- [59] M. Straumanis and J. P. Krumme and M. Rubenstein, *J. Electrochem. Soc.* 114, 640 (1967).
- [60] T. B. Bateman, H. J. McSkimin and J. H. Whelan, *J. Appl. Phys.* 30, 544 (1957).
- [61] R. Weil and W. O. Groves, *J. Appl. Phys.* 39, 4049 (1968).

- [62] *International Tables for X-Ray Crystallography*, Vol. 4 (Kyonocho, Birmingham, 1974).
- [63] P. A. Doyle and P. S. Turner, *Acta Cryst.* A24, 390 (1968).
- [64] 中川 徹, 小柳義夫, 最小二乗法による実験データ解析 (東京大学出版会, 1982).
- [65] P. Lawaetz, *Phys. Rev.* B4, 3460 (1971).
- [66] K. Hess, D. Bimberg, N. O. Lipari, J. K. Fischbach and M. Altarelli, *Proc. 13th Int. Conf. Phys. Semicond.* edited by F. G. Fumi, Rome (1976) p. 142.
- [67] R. A. Street and W. Sensle, *Phys. Rev. Lett.* 37, 1292 (1976).
- [68] A. D. Katnani and G. Margaritondo, *Phys. Rev.* B28, 1944 (1983).
- [69] P. L. Gourley and R. M. Biefeld, *Appl. Phys. Lett.* 45, 749 (1984).
- [70] J. D. Wiley, *Solid State Commun.* 8, 1865 (1970).
- [71] C. G. Van de Walle, *Phys. Rev.* B39, 1871 (1989).
- [72] T. P. Pearsall, F. H. Pollak, J. C. Bean and R. Hull, *Phys. Rev.* B33, 6821 (1986).
- [73] X. Zhang, K. Onabe, Y. Nitta, B. Zhang, S. Fukatsu, Y. Shiraki and R. Ito, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30, L1631 (1991).
- [74] M. E. Pistol and X. Liu, *Phys. Rev.* B45, 4312 (1992).
- [75] W. Shan, S. J. Hwang, J. J. Song, H. Q. Hou and C. W. Tu, *Phys. Rev.* B47, 3765 (1993).
- [76] W. Shan, S. J. Hwang, J. J. Song, H. Q. Hou and C. W. Tu, *Appl. Phys. Lett.* 62, 2078 (1993).

- [77] H. Q. Hou, C. W. Tu, W. Shan, S. J. Hwang, J. J. Song and S. N. G. Chu, *J. Vac. Sci. Technol.* **B11**, 854 (1993).
- [78] K. Ota, H. Yaguchi, K. Onabe, R. Ito, Y. Takahashi, K. Muraki, Y. Shiraki, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 943 (1993).
- [79] G. A. Samara, *Phys. Rev.* **B27**, 3494 (1983).
- [80] H. Mathieu, P. Lefebvre and P. Christol, *Phys. Rev.* **B46**, 4092 (1992).
- [81] P. J. Dean and D. C. Herbert, *J. Lumin.* **14**, 55 (1976).
- [82] R. G. Humphreys, U. Rössler and M. Cardona, *Phys. Rev.* **B18**, 5590 (1978).
- [83] G. F. Glinskii, A. A. Kopylov and A. N. Pikhtin, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **12**, 1327 (1978) [*Sov. Phys. Semicond.* **12**, 785 (1978)].
- [84] N. Miura, G. Kido, M. Suekane and S. Chikazumi, *Physica* **117B & 118B**, 66 (1983).
- [85] J. L. Yarnell, J. L. Warrern, R. G. Wenzel and P. J. Dean, in *U. S. Atomic Energy Commission Report NO. LA-DC-9228*, 1968 (unpublished).
- [86] M. E. Pistol, M. R. Leys and L. Samuelson, *Phys. Rev.* **B37**, 4664 (1988).
- [87] G. R. Wagner and M. A. Janocko, *Appl. Phys. Lett.* **54**, 66 (1988).
- [88] H. Etoh, E. Murakami, A. Nishida, K. Nakagawa and M. Miyao, *Jpn. J. Appl. Phys.* **30**, L163 (1991).
- [89] G. P. Schwartz, M. S. Hybertsen, J. Bevk, R. G. Nuzzo, J. P. Mannaerts and G. J. Gualtieri, *Phys. Rev.* **B39**, 1235 (1989).
- [90] E. T. Yu, E. T. Croke and T. C. McGill, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 569 (1990).
- [91] P. A. M. Rodrigues, F. Cerdeira and J. C. Bean, *Phys. Rev.* **B46**, 15263 (1992).

- [92] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, *Phys. Rev.* **B34**, 5621 (1986).
- [93] L. Colombo, R. Resta and S. Baroni, *Phys. Rev.* **B44**, 5572 (1991).
- [94] J. F. Morar, P. E. Batson and J. Tersoff, *Phys. Rev.* **B47**, 4107 (1993).
- [95] J. Singh, K. K. Bajaj and S. Chaudhuri, *Appl. Phys. Lett.* **44**, 805 (1984).
- [96] J. P. Dismukes, L. Ekstrom and R. J. Paff, *J. Phys. Chem.* **68**, 3021 (1964).
- [97] Y. A. Burenkov, S. P. Nikanorov and A. V. Stepanov, *Fiz. Tverd. Tela* **12**, 2428 (1970) [*Sov. Phys. Solid State* **12**, 1940 (1971)].
- [98] H. J. McSkimin and P. Andreatch jr., *J. Appl. Phys.* **35**, 2161 (1964).
- [99] R. L. Aggarwal, *Phys. Rev. B* **2**, 446 (1970).
- [100] R. People and S. A. Jackson, *Phys. Rev. B* **36**, 1310 (1987).
- [101] *Intrinsic Properties of Group IV Elements and III-V, II-VI and I-VII Compounds*, Vol. 22a of *Landolt-Börnstein* edited by O. Madelung (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- [102] K. Fujita, S. Fukatsu, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 2240 (1991).
- [103] S. Fukatsu, K. Fujita, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 2103 (1991).
- [104] U. Rössler, *Solid State Commun.* **49**, 943 (1984).
- [105] M. Braun and U. Rössler, *J. Phys.* **C18**, 3365 (1985).
- [106] U. Ekenberg, *Phys. Rev.* **B40**, 7714 (1989).
- [107] T. Ruf and M. Cardona, *Phys. Rev.* **B41**, 10747 (1990).

- [108] R. People and S. K. Sputz, Phys. Rev. B41, 8431 (1990).
- [109] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids 1, 249 (1957).
- [110] P. C. Klipstein, P. R. Tapster, N. Apsley, D. A. Anderson, M. S. Skolnick, T. M. Kerr and K. Woodbridge, J. Phys. C19, 857 (1986).
- [111] H. Kawabata, H. Ueba and C. Tatsuyama, J. Appl. Phys. 66, 634 (1989).
- [112] C. E. Aumann, Y. W. Mo and M. G. Lagally, Appl. Phys. Lett. 59, 1061 (1991).
- [113] G. L. Zhou, K. M. Chen, W. D. Jiang, C. Sheng, X. J. Zhang and X. Wang, Appl. Phys. Lett. 53, 2179 (1988).
- [114] I. Tanaka and S. Ohkouchi, Jpn. J. Appl. Phys. 30, L1662 (1991).
- [115] K. Suzuki and J. C. Hensel, Phys. Rev. B9, 4184 (1974).
- [116] L. D. Laude, F. H. Pollak and M. Cardona, Phys. Rev. B3, 2623 (1971).
- [117] S. L. Chuang, Phys. Rev. B43, 9649 (1991).
- [118] G. Bastard and J. A. Brum, IEEE J. Quantum Electron. QE22, 1625 (1986).
- [119] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii and S. Yamazaki, Phys. Rev. B48, 8102 (1993).
- [120] E. O. Kane, *Semiconductors and Semimetals* Vol. 1, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic Press, New York 1966) p. 75.
- [121] T. Hiroshima and R. Lang, Appl. Phys. Lett. 49, 456 (1986).
- [122] D. F. Nelson, R. C. Miller and D. A. Kleinman, Phys. Rev. B35, 7770 (1987).

本論文に関する研究論文リスト

- (1) "Photoreflectance Study of GaAs/GaAsP Strained-Barrier Quantum Well Structures"
H. Yaguchi, X. Zhang, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, Extended Abstracts of the 1992 International Conference on Solid State Devices and Materials, p. 589 (1992).
- (2) "Photoreflectance Study of GaAs/GaAsP Strained-Barrier Quantum Well Structures"
H. Yaguchi, X. Zhang, K. Ota, M. Nagahara, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, Jpn. J. Appl. Phys. 32, 544 (1993).
- (3) "MOVPE Growth and Optical Study of GaAs/GaAs_{1-x}P_x Strained-Barrier Single Quantum Well Structures"
X. Zhang, K. Onabe, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, Jpn. J. Appl. Phys. 32, L375 (1993).
- (4) "Characterization of Ge/SiGe Strained-Barrier Quantum Well Structures Using Photoreflectance Spectroscopy"
H. Yaguchi, K. Tai, K. Takemasa, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, to be published in Phys. Rev. B.
- (5) "Characterization of Interface Roughness in Ge/SiGe Heterostructures Using Photoreflectance Spectroscopy"
H. Yaguchi, K. Tai, K. Takemasa, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, Extended Ab-

- stracts of the 25th International Conference on Solid State Devices and Materials, p. 910 (1993).
- (6) "Photoreflectance Study of Interface Roughness in Ge/SiGe Strained-Layer Heterostructures"
H. Yaguchi, K. Tai, K. Takemasa, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito: to be published in Jpn. J. Appl. Phys.
- (7) "Observation of the valence subband level crossing in GaAs/GaAsP strained-barrier quantum well structures using circularly polarized photoluminescence excitation spectroscopy"
K. Ota, H. Yaguchi, K. Onabe, R. Ito, Y. Takahashi, K. Muraki, Y. Shiraki, Appl. Phys. Lett. **63**, 943 (1993).
- (8) "Determination of band offsets in GaAsP/GaP strained-layer quantum well structures using photoreflectance and photoluminescence spectroscopy"
Y. Hara, H. Yaguchi, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, to be published in Gallium Arsenide and Related Compounds 1993 Proceedings of the 20th International Symposium.

それ以外の研究論文

- (1) "RHEED Study of Superstructures of Submonolayer Lead Films on Silicon(111) Surfaces"
H. Yaguchi, S. Baba and A. Kinbara, Appl. Surf. Sci. **33/34**, 75 (1988).
- (2) "RHEED による Pb/Si(111) 表面超構造の研究"
H. Yaguchi, S. Baba and A. Kinbara, 真空 **31**, 399 (1988).
- (3) "Pb/Si(111) 表面超構造の RHEED による観察"
H. Yaguchi, S. Baba and A. Kinbara, 表面科学 **9**, 368 (1988).
- (4) "Suppression of Interfacial Mixing in Si/Ge Superlattice by Sb Deposition"
K. Fujita, S. Fukatsu, H. Yaguchi, T. Igarashi, Y. Shiraki and R. Ito, Extended Abstracts of the 22nd Conference on Solid State Devices and Materials, p. 1151 (1990).
- (5) "Realization of Abrupt Interfaces in Si/Ge Superlattices by Suppressing Ge Surface Segregation with Submonolayer of Sb"
K. Fujita, S. Fukatsu, H. Yaguchi, T. Igarashi, Y. Shiraki and R. Ito, Jpn. J. Appl. Phys. **29**, L1981 (1990).
- (6) "Strain Relaxation in MBE-Grown $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(100)$ Heterostructures by Annealing"
H. Yaguchi, K. Fujita, S. Fukatsu, Y. Shiraki and R. Ito, Jpn. J. Appl. Phys. **30**, L1450 (1991).

- (7) "Self-Limitation in the Surface Segregation of Ge Atoms During Si Molecular Beam Epitaxial Growth"
S. Fukatsu, K. Fujita, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 2103 (1991).
- (8) "Involvement of the Topmost Ge Layer in the Ge Surface Segregation During Si/Ge Heterostructure Formation"
K. Fujita, S. Fukatsu, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 2240 (1991).
- (9) "Intersubband Absorption in Narrow Si/SiGe Multiple Quantum Wells without Interfacial Smearing"
K. Fujita, S. Fukatsu, Y. Shiraki, H. Yaguchi and R. Ito, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 210 (1992).
- (10) "Atomistic Picture of Interfacial Mixing in the Si/Ge Heterostructures"
S. Fukatsu, K. Fujita, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, *Surf. Sci.* **267**, 79 (1992).
- (11) "Initial Oxidation of MBE-Grown Si(100) Surfaces"
H. Yaguchi, K. Fujita, S. Fukatsu, Y. Shiraki, R. Ito, T. Igarashi and T. Hattori, *Surf. Sci.* **275**, 395 (1992).
- (12) "MOVPE Growth of Cubic GaN on GaAs Using Dimethylhydrazine"
S. Miyoshi, K. Onabe, N. Ohkouchi, H. Yaguchi, R. Ito, S. Fukatsu and Y. Shiraki, *J. Cryst. Growth* **124**, 439 (1992).
- (13) "Highly Conductive p-type Cubic GaN Epitaxial Films on GaAs"
S. Miyoshi, N. Ohkouchi, H. Yaguchi, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, *Gallium Arsenide and Related Compounds 1992 Proceedings of the 19th International Symposium*, p. 79 (1993).

- (14) "GaAsP Layers Grown on (111)-Oriented GaAs Substrates by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy"
X. Zhang, K. Karaki, H. Yaguchi, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, *Jpn. J. Appl. Phys.* **32**, L755 (1993).
- (15) "Intersubband Absorption in n-type Si/Si_{1-x}Ge_x Multiple Quantum Well Structures Formed by Sb Segregant-Assisted Growth"
K. Fujita, S. Fukatsu, Y. Shiraki, H. Yaguchi and R. Ito, *J. Cryst. Growth* **127**, 416 (1993).
- (16) "Is Low Temperature Growth the Solution to Abrupt Si/Si_{1-x}Ge_x Interface Formation?"
S. Fukatsu, N. Usami, K. Fujita, H. Yaguchi, Y. Shiraki and R. Ito, *J. Cryst. Growth* **127**, 401 (1993).
- (17) "Valence-Subband Level Crossing in GaAs/GaAsP Strained-Barrier Quantum Well Structures Observed by Circularly Polarized Photoluminescence Excitation Spectroscopy"
H. Yaguchi, K. Ota, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, *Workbook of 6th International Conference on Modulated Semiconductor Structures*, p. 527 (1993).
- (18) "MOVPE Selective Growth of Cubic GaN in Small Areas on Patterned GaAs(100) Substrates"
M. Nagahara, S. Miyoshi, H. Yaguchi, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, *Extended Abstracts of the 1993 International Conference on Solid State Devices and Materials* 113 (1993).
- (19) "Self-Modulating Sb Incorporation in Si/SiGe Superlattices During Molecular Beam Epitaxial Growth"

- K. Fujita, S. Fukatsu, N. Usami, T. Shiraki, H. Yaguchi, R. Ito and K. Nakagawa, *Surface Sci.* **295**, 335 (1993).
- (20) "Metalorganic Vapor Phase Epitaxy of $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ alloys on GaP"
S. Miyoshi, H. Yaguchi, K. Onabe, R. Ito and Y. Shiraki, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3506 (1993).
- (21) "Transmission Electron Microscope Observation of Cubic GaN Grown by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy with Dimethylhydrazine on (001) GaAs"
N. Kuwano, Y. Nagatomo, K. Kobayashi, K. Oki, S. Miyoshi, H. Yaguchi, K. Onabe and Y. Shiraki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 18 (1994).
- (22) "Selective Growth of Cubic GaN in Small Areas on Patterned GaAs(100) Substrates by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy"
M. Nagahara, S. Miyoshi, H. Yaguchi, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 694 (1994).
- (23) "Valence-subband Level Crossing in GaAs/GaAsP Strained-Barrier Quantum Well Structures Observed by Circularly Polarized Photoluminescence Excitation Spectroscopy"
H. Yaguchi, K. Ota, K. Muraki, Y. Takahashi, K. Onabe, Y. Shiraki and R. Ito, to be published in *Solid State Electronics*.

