



Title	半導体ヘテロ接合における二次元電子系の電子輸送理論
Author(s)	奥山, 裕
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第3058号
Issue Date	1992-03-25
DOI	https://doi.org/10.11501/3060662
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/49794
Type	doctoral thesis
File Information	000000249608.pdf



平成3年度 博士論文

半導体ヘテロ接合における二次元電子系の電子輸送理論

北海道大学大学院
工学研究科応用物理学専攻

奥山 裕

①

目次

平成3年度博士論文

半導体ヘテロ接合における二次元電子系の電子輸送理論

北海道大学大学院

工学研究科応用物理学専攻

奥山 裕

目次

1章 序論	1
参考文献	4
2章 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における二次元電子系の電子移動度及びホットエレクトロン・エネルギー損失率	6
2.1 序論	6
2.2 電子包絡関数とスクリーニング因子	6
2.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における電子移動度の理論	11
2.4 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における電子エネルギー損失率の理論	13
2.5 結果と考察	14
参考文献	21
3章 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における二次元電子系のフォノン・ドラッグ熱電能	23
3.1 序論	23
3.2 フォノン・ドラッグ熱電能の理論	24
3.3 結果と考察	27
参考文献	32
4章 メゾスコピック系の電子輸送	33
4.1 拡散領域及びバリスティック領域における諸現象	33
4.2 多端子・多チャネル系の輸送係数に対する Landauer-Büttiker 公式	37
4.3 線形応答理論による多端子・多チャネル系の輸送係数に対する Landauer-Büttiker 公式の導出	39
4.4 コンダクタンスの量子化	49
参考文献	55
5章 バリスティック輸送領域における熱電能	58
5.1 序論	58
5.2 ポイントコンタクトにおける熱電能の理論	60
5.3 結果と考察	63
5.4 量子効果の導入による量子化熱電能の検討	66
参考文献	71
6章 まとめ	72
謝辞	74
付録 A. サブバンドエネルギー E_0 の導出	75
付録 B. 電子拡散熱電能及びフォノン・ドラッグ熱電能の表式の導出	77

1章 序論

現在、二次元電子系[1]として研究対象となっているのは主として半導体界面に形成される系であり、MOS構造とヘテロ構造がある。MOS構造とは半導体、酸化膜、金属の3層からなる構造であり、半導体と酸化膜の界面に作られるポテンシャル井戸に電子が蓄積する。主に半導体としてはSiが、酸化膜としてはSiO₂が用いられる。この系の特徴は金属層にゲート電圧をかけることで電子濃度が自由に換えられることと、界面の粗さにより電子が散乱を受けやすいという点である。一方、ヘテロ構造は異種半導体を層状に重ね合わせて作られるが、バンドギャップ及び電子親和力の差が界面で伝導帯の底のギャップを生じさせ電子に対してポテンシャル井戸を形成する。この系の特徴は電子濃度は主にドーピングする不純物濃度で換えねばならないが、結晶成長により層を作るので界面がきれいに形成され、さらに不純物をドーピングする層も選択することができるため高い移動度を得ることができる点である。表面反転層で整数量子ホール効果[2]が、ヘテロ接合で分数量子ホール効果[3]が発見されたが、これは不純物散乱の頻度と関わっている。半導体単一ヘテロ接合は最も単純なヘテロ構造であるが、半導体の材料としてはGaAsとAl_xGa_{1-x}Asを用いたものが研究の主流である。この系はバルク半導体に比べて高い移動度を示すためデバイスとしての応用価値が高いが、二次元電子系の研究の対象として物性物理学からも興味を持たれている。特にこの系の電気伝導特性に注目する場合、電子に対する様々な散乱メカニズムを解明することが課題となる。

一方、最近ではこのヘテロ接合に微細加工を施してさらに低次元の電子系を作り出すことも行われ、多くの新しい現象が発見されている。この場合、次元の低下は系の大きさの縮小に伴って起きており、従来の二次元電子系がマクロスコピックな系であったのに対し、メゾスコピックな系と呼ばれる大きさの系が研究の対象となる。サイズの縮小に伴い、電子に対する散乱メカニズムもマクロな系とは異なってくるので、ここでも散乱メカニズムの解明が電子輸送の理解には必要である。

本論文では半導体ヘテロ接合における二次元電子系の電子輸送の研究というテーマでマクロスコピックな系とメゾスコピックな系での電子に対する散乱メカニズムの解明に焦点を当てて議論を進める。マクロスコピックな系における電子輸送に対する散乱メカニズムとして特に電子・音響フォノン相互作用を議論する。この系の散乱メカニズムとしてはイオン化不純物散乱、音響フォノン散乱、光学フォノン散乱が主なものである。このうちイオン化不純物散乱は低温(≤10K)で、光学フォノンは高温(≥40K)で支配的である[4]。Al_xGa_{1-x}As/GaAsヘテロ接合における音響フォノンは変形ポテンシャル結合とピエゾエレクトリック結合で電子と相互作用するが、フォノンのモードはバルクGaAsのものと同じと考えられる。ところが変形ポテンシャル定数 D の値はヘテロ接合の研究では11~16eVを主張するものが多く[5-11]、バルクGaAsでの7~8eV[12-14]とは大きく異

なっている。実験データの解析の際にはスクリーニング効果の取り扱いも大きく影響している。また、従来は D の値を低温における電子移動度の温度依存性から決定していたが、その際イオン化不純物散乱による移動度は温度によらないという仮定に基づいて解析を行っていた。しかし電子系が特に強く縮退していない限りイオン化不純物散乱による寄与も温度依存性を持つことが指摘され、移動度の温度依存性からの D の決定は信頼性を欠くこととなった。一方、非弾性散乱のみが寄与し、イオン化不純物散乱のような弾性散乱は寄与しない電子エネルギー損失率の測定も行われている[5,11]。電子エネルギー損失率の解析からは D を精度よく決定できると期待される。さらに電気伝導と並行して熱電効果も興味を持たれ始めており、特に熱電能が広く調べられている。これまでにヘリウム温度近傍ではフォノン・ドラッグの寄与が電子拡散の寄与を上回っていることがわかっているが[15-19]、フォノン・ドラッグ熱電能の解析からも D の値を決めることができる。そこで本論文では電子移動度、電子エネルギー損失率、熱電能の解析から二次元電子系における電子・音響フォノン散乱のふるまいを調べる[20,21]。

一方、微細加工技術の進歩に伴い、電子の非弾性散乱長より小さな構造を作ることが可能になってきた。このような大きさの系はメソスコピックな系と呼ばれ、従来研究の対象であったマクロスコピックな系とミクロスコピックな系の間位置する。この系を舞台としてここ数年の間に多くの新しい現象が発見された。例えば、普遍的コンダクタンスゆらぎ[22-24]、Aharonov-Bohm 効果[25,26]、磁場反転に対するコンダクタンスの非対称性[25,27,28]、ポイントコンタクトでのコンダクタンス量子化[29,30]、十字形細線でのホール効果の消失[31,32]や負の曲がり抵抗[33,34]などである。前半3つの現象は拡散領域と呼ばれる輸送領域で起こり、後半3つの現象はバリスティック領域と呼ばれる領域で起こる。拡散領域とは電子が不純物による散乱を頻繁に受けながら運動する領域のことである。金属細線中の電子の運動は拡散領域に属するが、半導体では不純物量を多くした場合や平均自由行程よりずっと長いスケールの輸送を考えるとのみ拡散領域となる。一方、バリスティック領域とは不純物を極力減らすことにより、電子が不純物散乱を受けずに系の端から端まで運動できる領域であり半導体微細構造でのみ実現される。拡散領域における現象はすでに理論的にも詳しく調べられているが、バリスティック領域は今なお活発に研究されている分野である。本論文ではそのうちポイントコンタクトでの電子輸送を主に扱う。1988年に van Wees ら及び Wharam らによりポイントコンタクトでのコンダクタンス量子化が発見された[29,30]。コンダクタンスはポイントコンタクトにおける占有サブバンド数が1つ増えると $2e^2/h$ だけ増加する。以来この現象に関連した理論、実験が数多く報告されており、現時点では現象をほぼ理解できていると思われる。これに対しポイントコンタクトにおける熱電効果もその後しばらくして研究が開始されたが、理論・実験ともに研究が少なくいまだ完全な理解には達していないと考えられる。ポイントコンタクトにおける熱電能はまず Streda[35]により理論的に調べられ、ピーク構造を示すことが予想された。ピークはポイントコンタクトの占有サブバンド数が変化するとき起こり、そのピーク値は温度によらず

$S_n^{peak} = -(k_B/e) \ln 2 / (n - 1/2)$ で与えられる。 n は占有サブバンド数である。この予言をほぼ確認したと思われる実験がその後 Molenkamp ら[36]により行われた。彼らは細線の両側面に異なる2つのポイントコンタクトを電圧プローブとして取り付け、細線に電流を流しジュール熱を発生させることで各ポイントコンタクトの両側に温度差を作り出した。このとき、細線横方向の電圧が観測されたが、その電圧は両ポイントコンタクトの熱電能の差に比例する。彼らは実験データを Streda のモデルを使って説明したが、彼らが用いたモデルは化学ポテンシャルの変化といった詳しい情報を得ることができない。本論文では彼らのモデルを修正し、化学ポテンシャルの変化に焦点を当てて横電圧のふるまいを解析する[37]。ポイントコンタクトにおける熱電能はその後、山田と山本[38]によってさらに直接的な形で測定されたが、Molenkamp らの実験データと同様に熱電能のピーク値は Streda の理論値に比べやや小さい。我々はこの原因が Streda の理論が現実の系に対応していないためと考え、ポイントコンタクトの形状を反映したモデルを導入することによりポイントコンタクトの熱電能を調べた[39]。その結果、熱電能のピーク値がポイントコンタクトの形状や温度に依存することを見いだした。このことはポイントコンタクトにおける熱電能がコンダクタンスのように普遍的な値に量子化されることはないということを意味しており、今後の測定に際してはこの点を考慮することが現象の理解には不可欠である。

以下に各章の内容を示す。2章と3章はマクロスコピックな系での電子輸送の議論に当てられる。2章では電子移動度と電子エネルギー損失率の解析から $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における変形ポテンシャル定数 D の値及びスクリーニング効果に対する知見を得る。結論としては通常のスクリーニング因子は短距離相互作用である変形ポテンシャル結合には入れず、長距離相互作用であるピエゾエレクトリック結合にのみ考慮すればよく、このような取り扱いをすればヘテロ接合での結合定数はバルク GaAs と同じで良い。3章では熱電効果として熱電能を取り上げ、特にフォノン・ドラッグによる寄与を2章と同様の観点から考察する。実験データとの比較からは2章と同じ結論が得られた。4章と5章はメゾスコピックな系での電子輸送を扱う。このうち4章ではメゾスコピックな系での諸現象、Landauer-Büttiker 公式の導出、ポイントコンタクトでのコンダクタンス量子化の理論を簡単にレビューし、5章での議論の基礎を与える。5章ではポイントコンタクトでの熱電能に関し Molenkamp らのモデルの改良とともに Streda の理論の見直しを行い、熱電能の性質に関して新しい知見を得る。6章は全体のまとめに当てられる。

参考文献

- 1 T.Ando, A.B.Fowler, and F.Stern, *Rev.Mod.Phys.***54**,437(1982).
- 2 K.von Klitzing, G.Dorda, and M.Pepper, *Phys.Rev.Lett.***45**,449(1980).
- 3 D.C.Tsui, H.L.Stormer, and A.C.Gossard, *Phys.Rev.Lett.***48**,1559(1982).
- 4 K.Hirakawa and H.Sakaki, *Phys.Rev.B***33**,8291(1986).
- 5 S.J.Manion, M.Artaki, M.A.Emanuel, J.J.Coleman, and K.Hess, *Phys.Rev.B***35**,9203(1987).
- 6 E.E.Mendez, P.J.Price, and M.Heiblum, *Appl.Phys.Lett.***45**,294(1984).
- 7 P.Pfeffer, I.Gorczyca, and W.Zawadzki, *Solid State Commun.***51**,179(1984).
- 8 B.J.F.Lin, D.C.Tsui, and G.Weimann, *Solid State Commun.***56**,287(1985).
- 9 P.J.Price, *Phys.Rev.B***32**,2643(1985).
- 10 B.Vinter, *Phys.Rev.B***33**,5904(1986); *Surf.Sci.***170**,445(1986).
- 11 K.Hirakawa and H.Sakaki, *Appl.Phys.Lett.***49**,889(1986).
- 12 D.L.Rode, *Phys.Rev.B***2**,1012(1970).
- 13 C.M.Wolfe, G.E.Stillman, and W.T.Lindley, *J.Appl.Phys.***41**,3088(1970).
- 14 D.L.Camphausen, G.A.N.Connel, and W.Paul, *Phys.Rev.Lett.***26**,184(1971).
- 15 R.Fletcher, J.C.Maan, and G.Weimann, *Phys.Rev.B***32**,8477(1985).
- 16 R.Fletcher, J.C.Maan, K.Ploog, and G.Weimann, *Phys.Rev.B***33**,7122(1986).
- 17 R.Fletcher, M.D'Iorio, A.S.Sachrajda, R.Stoner, C.T.Foxon, and J.J.Harris, *Phys.Rev.B***37**,3137(1988).
- 18 C.Ruf, H.Obloh, B.Junge, E.Gmelin, K.Ploog, and G.Weimann, *Phys.Rev.B***37**,6377(1988).
- 19 R.Fletcher, M.D'Iorio, W.T.Moore, and R.Stoner, *J.Phys.C***21**,2681(1988).
- 20 Y.Okuyama and N.Tokuda, *Phys.Rev.B***40**,9744(1989).
- 21 Y.Okuyama and N.Tokuda, *Phys.Rev.B***42**,7078(1990).
- 22 C.P.Umbach, S.Washburn, R.B.Laibowitz, and R.A.Webb, *Phys.Rev.B***30**,4048(1984).
- 23 B.L.Al'tshuler, *JETP Lett.***41**,648(1985).
- 24 P.A.Lee and A.D.Stone, *Phys.Rev.Lett.***55**,1622(1985).
- 25 R.A.Webb, S.Washburn, C.P.Umbach, and R.B.Laibowitz, *Phys.Rev.Lett.***54**,2696(1985).
- 26 S.Washburn, C.P.Umbach, R.B.Laibowitz, and R.A.Webb, *Phys.Rev.B***32**,4789(1985).
- 27 M.Büttiker, *Phys.Rev.Lett.***57**,1761(1986).
- 28 A.D.Benoit, S.Washburn, C.P.Umbach, R.B.Laibowitz, and R.A.Webb, *Phys.Rev.Lett.***57**,1765(1986).
- 29 B.J.van Wees, H.van Houten, C.W.J.Beenakker, J.G.Williamson, L.P.Kouwenhoven, D.van der Marel,

- and C.T.Foxon, Phys.Rev.Lett.**60**,848(1988).
- 30 D.A.Wharam, T.J.Thornton, R.Newbury, M.Pepper, H.Ahmed, J.E.F.Frost, D.G.Hasko, D.C.Peacock, D.A.Ritchie, and G.A.C.Jones, J.Phys.C**21**,L209(1988).
- 31 M.L.Roukes, A.Scherer, S.J.Allen,Jr.,H.G.Craighead, R.M.Ruthen, E.D.Beebe, and J.P.Harbison, Phys.Rev.Lett.**59**,3011(1987).
- 32 C.J.B.Ford, T.J.Thornton, R.Newbury, M.Pepper, H.Ahmed, D.C.Peacock, D.A.Ritchie, J.E.F.Frost, and G.A.C.Jones, Phys.Rev.B**38**,8518(1988).
- 33 Y.Takagaki, K.Gamo, S.Namba, S.Ishida, S.Takaoka, K.Murase, K.Ishibashi, and Y.Aoyagi, Solid State Commun.**68**,1051(1988).
- 34 Y.Takagaki, K.Gamo, S.Namba, S.Takaoka, K.Murase, S.Ishida, K.Ishibashi, and Y.Aoyagi, Solid State Commun.**69**,811(1989).
- 35 P.Streda, J.Phys.Condens.Matter**1**,1025(1989).
- 36 L.W.Molenkamp, H.van Houten, C.W.J.Beenakker, R.Eppenga, and C.T.Foxon, Phys.Rev.Lett.**65**, 1052(1990).
- 37 Y.Okuyama, T.Sakuma, and N.Tokuda, Surf.Sci.(掲載予定); J.Phys.Condens.Matter (掲載予定).
- 38 S.Yamada and M.Yamamoto, Semicon.Sci.Tech.(掲載予定).
- 39 Y.Okuyama and N.Tokuda, Phys.Rev.B(投稿中).

2章 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における二次元電子系の電子移動度及びホットエレクトロン・エネルギー損失率

2.1 序論

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における低温 ($\leq 40\text{K}$) での電子移動度、電子エネルギー損失率のふるまいは電子・音響フォノン散乱、電子・イオン化不純物散乱により理解される。 GaAs 層のポテンシャル井戸に束縛されている二次元電子ガスと相互作用する音響モードのフォノンはバルク GaAs のそれと同じと考えられる。しかし、ヘテロ接合における変形ポテンシャル結合に関しては、いまだに議論されている状態である[1-5]。ヘテロ接合に関する多くの研究は変形ポテンシャル定数 D が $11 \sim 16\text{eV}$ [1,2,4-9] であると結論しており、この値は従来バルク GaAs で受け入れられてきた $7 \sim 8\text{eV}$ [10-14] という値よりかなり大きいものである。ヘテロ接合における変形ポテンシャル定数の研究のほとんどは電子・光学フォノン散乱が無視できるような低温における移動度の温度依存性の解析から D の値を得ていた。その際、移動度の温度依存性に対するイオン化不純物散乱の効果は低温で高電子濃度・高移動度の試料では無視できるほど小さいと仮定されていた。最近、低温での電子エネルギー損失率が D を決めるために用いられ始めた[5,9]。エネルギー損失率はイオン化不純物散乱のような弾性散乱によっては影響されず、また、低温 ($\leq 40\text{K}$) では光学フォノン散乱を無視できるので精度良く D の値を得ることができると期待される。実験データの解析の結果は用いた電子包絡関数、スクリーニング因子の取り扱い方、及びピエゾエレクトリック結合定数に依存しているので解析はこれらの点を考慮して行わなければならない。

本章では低温における $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合の電子移動度、エネルギー損失率の実験データを解析して変形ポテンシャル定数 D を決定する。エネルギー損失率は用いる電子包絡関数に敏感であるので[5]、厳密な数値解の良い近似になっている拡張された Fang-Howard 変分関数[15]を用いる。スクリーニング因子の取り扱いに関しては通常のスクリーニング因子が短距離型の電子・音響フォノン相互作用である変形ポテンシャル結合に対して真のスクリーニング効果を記述しているかどうか定かではない[16]ので、長距離型のピエゾエレクトリック結合に対してはスクリーニング因子を取り入れるが、短距離型の変形ポテンシャル結合に対してはスクリーニング因子を入れた理論と入れない理論の両方を考え、実験データの解析からどちらの理論が妥当かを判断するという立場をとる[17]。

2.2 電子包絡関数とスクリーニング因子

代表的な系の構造を図 2-1 に示す[8]。この系は電界効果トランジスタ (FET) 型で、試料の上部と下部にゲート電極を取り付け電子濃度を多少変えることができるようにしたものである。伝導帯の様子を図 2-2 に示す。変調ドープ構造の場合、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 層にのみドナーをドープするが、GaAs 層近傍の領域にドープしない層 (スペーサと呼ばれる) を設けることでさらに高移動度を得ることができる。 W_{sp} がスペーサ層の厚さ、 W_D がドープ層の厚さであり、 ϕ_B は Schottky バリアの高さである。ドープしたドナーから供給された電子は GaAs 層側のポテンシャル井戸にたまり、電子とドナーとのクーロン相互作用により伝導帯が曲がることになる。

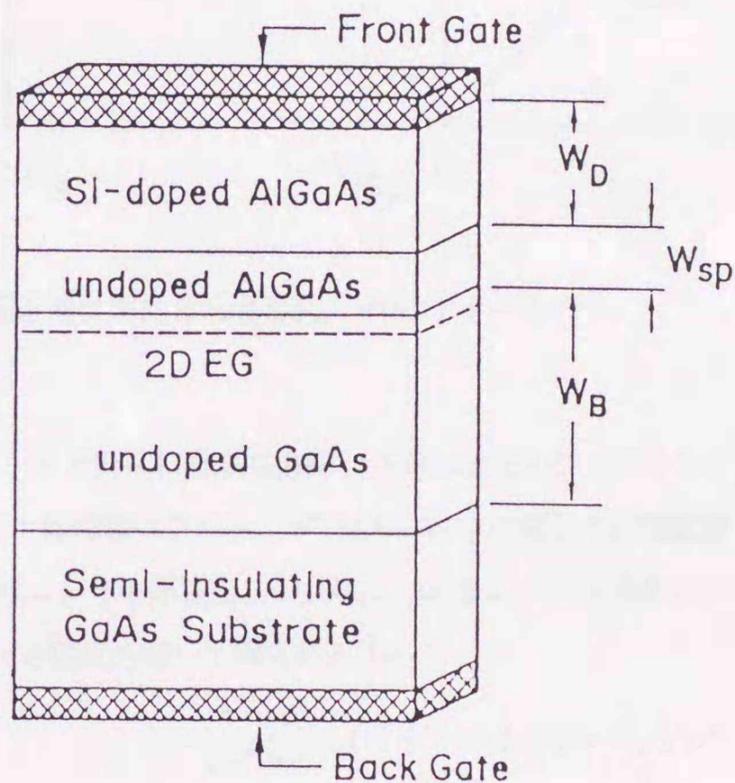


図 2-1 FET 型変調ドープ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ構造の断面図。

以下では、変調ドープ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合中の電子に有効質量近似を適用する。ポテンシャル井戸中の電子の状態はサブバンド指数 n と界面に沿っての二次元波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ で特徴づけられる。波動関数とエネルギーはそれぞれ次式で与えられる。

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = \frac{\zeta_n(z)}{L} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2.1)$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (2.2)$$

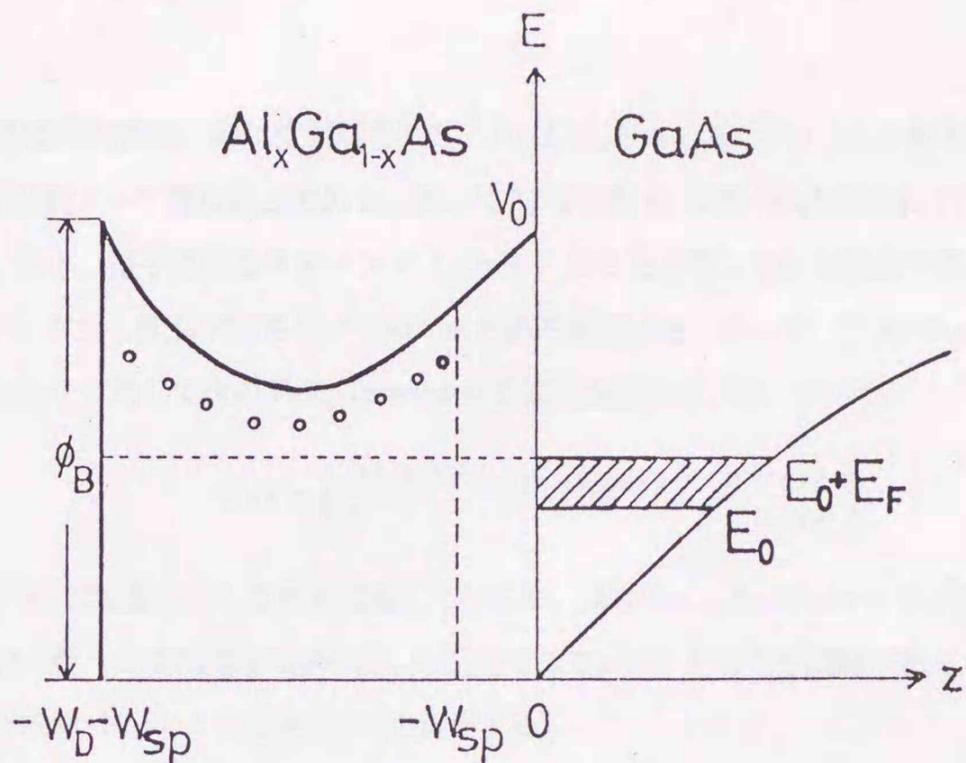


図 2-2 ヘテロ界面近傍における伝導帯図。○印はドナーを表す。

ここで、 $\zeta_n(z)$ はヘテロ界面に垂直な方向 (z 方向にとる) の n 番目のエネルギー準位に対応した包絡関数、 L^2 は二次元系の面積、 \mathbf{r} は位置ベクトル、 m^* は GaAs 中の電子の有効質量 ($m^* = 0.067m_0$)、 \hbar は Planck 定数/ 2π である。GaAs は $z > 0$ の領域を、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ は $z < 0$ の領域をそれぞれ占めているとする。 $\zeta_n(z)$ と E_n は次の Schrödinger 方程式を解いて得られる[18]。

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \zeta_n(z) + V(z)\zeta_n(z) = E_n \zeta_n(z). \quad (2.3)$$

ここで

$$V(z) = V_0 \theta(-z) - |e| \phi(z) + v_{xc}(z) \quad (2.4)$$

であり、静電ポテンシャル $\phi(z)$ は次の Poisson 方程式を満たす。

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi(z) = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} \left[\sum_{i=0}^m N_i \zeta_i(z) + N_A(z) - N_D(z) \right]. \quad (2.5)$$

従って、(2.3)~(2.5) はセルフコンシステントに解かねばならない。ここで V_0 は界面での伝導帯のギャップ値 ($\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合の場合約 300meV)、 $\theta(z)$ は Heaviside のステップ関数、 v_{xc} は多体効果による交換・相関ポテンシャル、 κ_0 は静誘電定数 ($\kappa_0 = 12.91$)、 $e (< 0)$ は電子の電荷、 N_i は i 番目のサブバンドを占有している電子濃度である。 $N_A(z)$ と $N_D(z)$ はアクセプターとドナーの濃度であり、次式で与えられる。

$$N_A(z) - N_D(z) = \begin{cases} N_{depl}/z_d & 0 < z < z_d \text{ のとき} \\ -N_I & -W_{sp} - W_D < z < -W_{sp} \text{ のとき} \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (2.6)$$

但し、 N_{depl} は空乏電荷濃度、 z_d は空乏層の厚さ、 N_I は $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中のイオン化不純物濃度、 W_{sp} 、 W_D はスペーサ及び不純物ドーピング層の厚さである。尚、(2.5)の指数 m は電子に占有されている最高のサブバンドの指数であるが、以下、電子は最低サブバンド ($i=0$) のみを占有している場合を考え、 $\zeta_0(z)$ を単に $\zeta(z)$ と書く。我々は $\zeta(z)$ に対し変分関数を用い Hartree 近似を採用する。従って、(2.4) の $v_{xc}(z)$ は無視する。以前の理論計算では $\zeta(z)$ に対して次の Fang-Howard 変分波動関数[19]を用いていた。

$$\zeta(z) = \begin{cases} (b_0^3/2)^{1/2} z \exp(-bz/2) & z \geq 0 \text{ のとき} \\ 0 & z \leq 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (2.7)$$

この関数は SiMOS 反転層に対しては大変適しているが、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合に対してはバリアである $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 層への波動関数の浸み出しを記述できていないためやや問題がある。この点を考慮し我々は次の拡張された Fang-Howard 変分関数[15]を採用する。

$$\zeta(z) = \begin{cases} Bb^{1/2}(bz + \beta) \exp(-bz/2) & z \geq 0 \text{ のとき} \\ B'b^{1/2} \exp(b'z/2) & z \leq 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (2.8)$$

ここで、 b 、 b' 、 B 、 B' 、 β は変分パラメータである。このうち B 、 B' 、 β は界面での境界条件と規格化の条件により b 、 b' を用いて表すことができる。条件式は次の三式である。

$$B'b^{1/2} = Bb^{1/2}\beta,$$

$$B'b^{3/2}/2 = Bb^{3/2}(1 - \beta/2), \quad (2.9)$$

$$B'^2 + B^2(\beta^2 + 2\beta + 2) = 1.$$

サブバンドエネルギーは b 、 b' を用いて次のように計算される (付録 A 参照)。

$$\begin{aligned} E_0(b, b') = & -\frac{\hbar^2}{8m^*} [B^2b^2(\beta^2 - 2\beta - 2) + B'^2b'^2] + V_0B'^2 \\ & + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_{depl} \left[\frac{B^2}{b}(\beta^2 + 4\beta + 6) - \frac{B'^2}{b'} \right] \\ & + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_s \left[\frac{B^4}{4b}(2\beta^4 + 12\beta^3 + 34\beta^2 + 50\beta + 33) + \frac{B'^4}{2b'} - \frac{B'^2}{b'} \right] \\ & + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_I \left(\frac{B'}{b'} \right)^2 (1 - e^{-b'W_D}) e^{-b'W_{sp}}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

パラメータ b 、 b' は全エネルギー $E(b, b')$ を最小にするように決める。 N_s は二次元電子濃度である。図 2-3 に両変分関数及びセルフ・コンシステントな数値計算による波動関数の様子を示す[15]。2つの変分関数は全体の形に関しては数値解をほぼ再現している。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 層への波動関数の浸み出しを考慮した分、(2.8)の変分

関数は界面近傍での数値解の振舞いを良く近似できている。(2.7)の変分関数のピーク値は数値解より約20Åほど界面から離れているが、このことはイオン化不純物散乱の寄与をやや過小評価することになる。

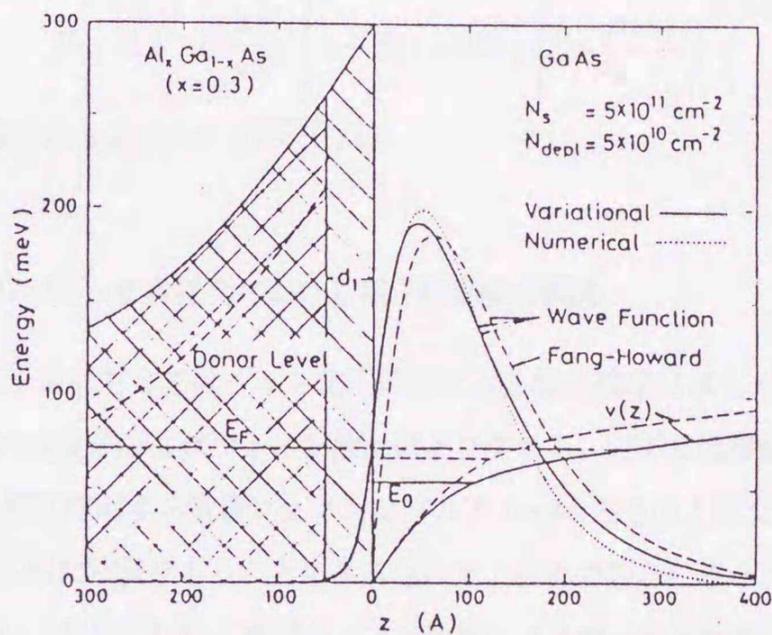


図 2-3 Fang-Howard 変分関数、拡張された Fang-Howard 変分関数及びセルフ・コンシステントな数値計算による電子の波動関数[15]。

有限温度におけるスクリーニング因子は次式で与えられる[20]。

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{2\pi e^2}{\kappa_0 q} F(q)\Pi(q). \quad (2.11)$$

ここで $F(q)$ は形状因子であり、次式で定義される。

$$F(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \zeta^2(z)\zeta^2(z') \exp(-q|z-z'|). \quad (2.12)$$

(2.12) に (2.8) を代入すると次のようになる。

$$\begin{aligned} F(q) = & \frac{B'^4 b'}{b'+q} + 2B^2 B'^2 b b' \frac{2b^2 + 2b\beta(b+q) + \beta^2(b+q)^2}{(b'+q)(b+q)^3} \\ & + \frac{B^4 b}{2(b+q)^3} [2(\beta^4 + 4\beta^3 + 8\beta^2 + 8\beta + 4)b^2 + (4\beta^4 + 12\beta^3 + 18\beta^2 + 18\beta + 9)qb \\ & + (2\beta^4 + 4\beta^3 + 6\beta^2 + 6\beta + 3)q^2]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

$\Pi(q)$ は有限温度の静分極関数であり次式で与えられる[21]。

$$\Pi(q, T, E_F) = \int_0^\infty \frac{\Pi(q, 0, \xi')}{4k_B T \cosh^2[(E_F - \xi')/2k_B T]} d\xi'. \quad (2.14)$$

ここで E_F はフェルミエネルギー、 k_B は Boltzmann 定数である。 $\Pi(q, 0, \xi')$ は $T = 0\text{K}$ での分極関数である。

$$\Pi(q, 0, \xi') = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - \theta(q - 2k_F) \left[1 - \left(\frac{2k_F}{q} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}. \quad (2.15)$$

但し、 k_F は Fermi 波数である。 $(k_F = \sqrt{2m^*\xi'/\hbar})$

2.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における電子移動度の理論

十分に縮退した電子系に対してはイオン化不純物による散乱確率はほとんど温度に依存しないので、低温における電子移動度の温度依存性はフォノン散乱により決まる。以下では移動度の温度依存の部分のみ議論する。二次元電子系と相互作用する音響フォノンはバルク GaAs のものと同じと仮定する。これは GaAs と $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ が弾性的に似た物質であることによるもので、今までのところヘテロ接合に固有の音響フォノンモードが観測されたという報告はない。音響フォノン散乱による電子の運動量緩和時間は次式で与えられる。

$$\frac{1}{\tau(E)} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (1 - \cos \alpha). \quad (2.16)$$

ここで $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は状態 \mathbf{k} から \mathbf{k}' への遷移確率であり、 α は散乱角である。以下で解析する温度領域では音響フォノン散乱を弾性散乱過程と近似できる。フォノンの分布関数 N_q を $k_B T / \hbar \omega_q$ で近似すると $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は次のようになる[22]。

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2k_B T}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|M(q)|^2}{\omega_q \epsilon^2(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)} |I(q_z)|^2 \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) dq_z. \quad (2.17)$$

ここで q_z はフォノンの波数ベクトルの z 成分、 $|M(q)|$ は三次元散乱行列要素である。重なり積分 $I(q_z)$ は次式で定義される。

$$I(q_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^2(z) \exp(iq_z z) dz. \quad (2.18)$$

(2.18) に (2.8) を代入すると次のようになる。

$$\begin{aligned} |I(q_z)|^2 = & \frac{B'^2 b'^2}{b'^2 + q_z^2} \left[B'^2 + 2B^2 b \frac{(\beta^2 + 2\beta + 2)b^2 - 2bb'\beta(\beta + 1) + \beta^2 b'^2}{(b - b')^3} \right] \\ & + \frac{B^2 b^2}{b^2 + q_z^2} \left[-2B'^2 b' \frac{\beta^2 b^2 + 2bb'(-\beta^2 + \beta + 1) + b'^2 \beta(\beta - 2)}{(b - b')^3} + B^2 \beta^4 \right] \\ & + \frac{4B^2 b^4}{(b^2 + q_z^2)^2} \left[B'^2 b' \frac{(1 - 2\beta)b + (2\beta - 3)b'}{(b - b')^2} + B^2 \beta^3 \right] \\ & + \frac{4B^2 b^6}{(b^2 + q_z^2)^3} \left[-\frac{4B'^2 b'}{b - b'} + B^2 (2\beta^2 + 2\beta + 1) \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

変形ポテンシャル結合、 piezoelectronic 結合に対する散乱行列要素はそれぞれ次のように与えられている。

$$|M(q)|^2 = \frac{D^2 \hbar \omega_q}{2c_l L^3}, \quad (2.20)$$

$$|M(q)|^2 = \frac{2\pi e^2 P^2 \hbar \omega_q}{\kappa_0 q^2 L^3}. \quad (2.21)$$

ここで、 c_l は縦弾性定数、 P は piezoelectronic 定数、 L^3 は系の体積である。従って、変形ポテンシャル結合による運動量緩和時間は

$$\frac{1}{\tau_{def}(E)} = \frac{m^* D^2 k_B T}{4\pi \hbar^3 c_l} \left[B'^4 b' + \frac{B^4 b}{2} (2\beta^4 + 4\beta^3 + 6\beta^2 + 6\beta + 3) \right] \int_0^{2\pi} \frac{1 - \cos \alpha}{e^2 (2\sqrt{2m^* E/\hbar^2} \sin(\alpha/2))} d\alpha, \quad (2.22)$$

piezoelectronic 結合に対しては

$$\frac{1}{\tau_{piez}(E)} = \frac{m^* e^2 P^2 k_B T}{\hbar^3 \kappa_0} \int_0^{2\pi} (1 - \cos \alpha) \frac{A(2\sqrt{2m^* E/\hbar^2} \sin(\alpha/2))}{e^2 (2\sqrt{2m^* E/\hbar^2} \sin(\alpha/2))} d\alpha. \quad (2.23)$$

ここで $A(q)$ は次のような関数である。

$$\begin{aligned} A(q) = & \left[\frac{B'^4 b'}{q(b' + q)} + \frac{B^4 b}{2q(b + q)^3} [(2\beta^4 + 8\beta^3 + 16\beta^2 + 16\beta + 8)b^2 \right. \\ & + (4\beta^4 + 12\beta^3 + 18\beta^2 + 18\beta + 9)qb + (2\beta^4 + 4\beta^3 + 6\beta^2 + 6\beta + 3)q^2] \\ & + \frac{2B^2 B'^2 b b'}{q} \left[\frac{(\beta^2 + 2\beta + 2)b^2 - 2bb'\beta(\beta + 1) + \beta^2 b'^2}{(b' + q)(b - b')^3} \right. \\ & - \frac{\beta^2 b^2 + 2bb'(-\beta^2 + \beta + 1) + b'^2 \beta(\beta - 2)}{(b + q)(b - b')^3} + \frac{(q + 2b)\{(1 - 2\beta)b + (2\beta - 3)b'\}}{(b + q)^2 (b - b')^2} \\ & \left. \left. - \frac{8b^2 + 9bq + 3q^2}{(b + q)^3 (b - b')} \right] \right]. \quad (2.24) \end{aligned}$$

(2.22)、(2.23) から音響フォノンによる運動量緩和時間は次式より求まる。

$$\frac{1}{\tau_{ac}(E)} = \frac{1}{\tau_{def}(E)} + \frac{1}{\tau_{piez}(E)}. \quad (2.25)$$

音響フォノン散乱による移動度への寄与は

$$\mu_{ac} = \frac{e}{m^*} \langle \tau_{ac} \rangle. \quad (2.26)$$

ここで

$$\langle \tau_{ac} \rangle = \frac{\int_0^\infty \tau_{ac}(E) E \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE}{\int_0^\infty E \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE}. \quad (2.27)$$

$f(E)$ は Fermi-Dirac 分布関数である。(2.22)、(2.23) から移動度の温度依存性は次のようになる。

$$\mu_{ac}^{-1} = \alpha T. \quad (2.28)$$

2.4 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における電子エネルギー損失率の理論

エネルギー損失率はイオン化不純物散乱などの弾性散乱過程には影響されず、40K 以下では光学フォノン散乱も効かないので、主要な散乱過程は音響フォノン散乱のみである。さらに piezoelectric 結合の寄与は変形ポテンシャル結合の寄与の 10% 程度であり、エネルギー損失率を解析することで変形ポテンシャル定数 D を精度良く決定できると期待される。

電子エネルギー損失率は次式で与えられる[5]。

$$\left\langle \frac{\partial E}{\partial t} \right\rangle = -\frac{1}{N_e} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial t}. \quad (2.29)$$

ここで N_e は全電子数、 $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$ は波数ベクトル \mathbf{q} を持つフォノンのエネルギーである。電子系へ印加された電場による加熱の効果は格子温度 T_l よりも高い電子温度 T_e を持った Fermi-Dirac 分布関数を通して取り込む。エネルギー損失率の計算においては音響フォノン散乱に対して弾性散乱近似を適用することはできない。単位時間当りの波数ベクトル \mathbf{q} のフォノン数の変化率 $\partial N_{\mathbf{q}}/\partial t$ は次式で与えられる[5]。

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{\mathbf{q}}}{\partial t} = & 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} |I(q_z)|^2 \frac{|M(q)|^2}{\epsilon^2(q_{\parallel})} \delta(E_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_{\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_{\parallel}}) \\ & \times \{(N_{\mathbf{q}} + 1)f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_{\parallel}})[1 - f(E_{\mathbf{k}})] - N_{\mathbf{q}}f(E_{\mathbf{k}})[1 - f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_{\parallel}})]\}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

因子 2 はフォノンを吸収または放出する電子のスピンの縮退度からきている。 $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m^*$ であり $\omega_{\mathbf{q}} = uq = u(q_{\parallel}^2 + q_z^2)^{1/2}$ である。ここで u は音速、 q_{\parallel} はフォノン波数ベクトルの界面に平行な成分である。

変形ポテンシャル結合に対して (2.29) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial E}{\partial t} \right\rangle_{def} = & -\frac{2D^2(2m^*)^{1/2}}{\rho E_F(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dE_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k}})}{\sqrt{4E_{\mathbf{k}}}} \int_0^{\infty} dq_{\parallel} \int_{(q_z)_{min}}^{(q_z)_{max}} dq_z \left\{ \exp \left(\left(\frac{1}{k_B T_l} - \frac{1}{k_B T_e} \right) \hbar \omega_{\mathbf{q}} \right) - 1 \right\} \\ & \times N_{\mathbf{q}} |I(q_z)|^2 \frac{q_{\parallel}^2 + q_z^2}{\epsilon^2(q_{\parallel})} \left[1 - \frac{(\hbar \omega_{\mathbf{q}} - E_{\mathbf{q}_{\parallel}})^2}{4E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{q}_{\parallel}}} \right]^{-1/2} [1 - f(E_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_{\mathbf{q}})]. \end{aligned} \quad (2.31)$$

ここで q_z 積分の下限及び上限は次式で与えられる。

$$(q_z)_{min} = \begin{cases} [(E_{\mathbf{q}_{\parallel}} - 2\sqrt{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{q}_{\parallel}}})^2/\hbar^2 u_l^2 - q_{\parallel}^2]^{1/2} & (E_{\mathbf{q}_{\parallel}} - 2\sqrt{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{q}_{\parallel}}})^2 \geq (\hbar u_l q_{\parallel})^2 \text{ のとき} \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (2.32)$$

$$(q_z)_{max} = [(E_{\mathbf{q}_{\parallel}} + 2\sqrt{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{q}_{\parallel}}})^2/\hbar^2 u_l^2 - q_{\parallel}^2]^{1/2} \quad (2.33)$$

ρ は質量密度、 u_l は縦波の速度である。

ピエゾエレクトリック結合に対しては次のようになる。

$$\left\langle \frac{\partial E}{\partial t} \right\rangle_{\text{piez}} = - \frac{2e^2 P^2 (2m^*)^{1/2} u^2}{\pi \kappa_0 E_F} \int_0^\infty dE_k \frac{f(E_k)}{\sqrt{4E_k}} \int_0^\infty dq_{\parallel} \int_{(q_z)'_{\min}}^{(q_z)'_{\max}} dq_z \left\{ \exp \left(\left(\frac{1}{k_B T_l} - \frac{1}{k_B T_e} \right) \hbar \omega_q \right) - 1 \right\} \\ \times N_q |I(q_z)|^2 \frac{1}{\epsilon^2(q_{\parallel})} \left[1 - \frac{(\hbar \omega_q - E_{q_{\parallel}})^2}{4E_k E_{q_{\parallel}}} \right]^{-1/2} [1 - f(E_k + \hbar \omega_q)]. \quad (2.34)$$

ここで $(q_z)'_{\min}$ 、 $(q_z)'_{\max}$ は (2.32)(2.33) で u_l を縦波と横波の平均速度 u で置き換えた式で与えられる。全エネルギー損失率は (2.31) と (2.34) の和で与えられる。

2.5 結果と考察

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ($x = 0.3$) ヘテロ接合でのエネルギー損失率の測定は平川・榊[9]と Manion ら[5]により行われている。両者のデータは異なっており変形ポテンシャル定数 D の決定にどちらのデータを用いるべきか明らかではない。そこでまず理論的に求めたエネルギー損失率をそれぞれのデータにフィットさせる。計算に用いたパラメータの値は次のようなものである。平川・榊の5つの試料に対しては電子濃度は $N_s = 2.1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (試料1)、 $3.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (試料2)、 $4.6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (試料3)、 $7.1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (試料4)、 $8.1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ (試料5) である。 $N_{\text{depl}} = 6.0 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ 、 $W_{sp} = 20 \text{\AA}$ と仮定した。 N_I は Fermi レベルが $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 層のドナーレベルに一致するという条件と系全体の中性条件から決められる。以下で用いる値だけ示すと、 $N_I = 3.4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ (試料1)、 $1.6 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ (試料3)、 $5.2 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ (試料4) である。Manion らの試料に対しては $N_I = 1.3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 、 $W_{sp} = 90 \text{\AA}$ である。 $N_{\text{depl}} = 6.0 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ と仮定した。また上述の二条件より $N_s = 6.0 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ となる。ピエゾエレクトリック定数は $P = 0.052$ [23]を用い、ピエゾエレクトリック結合に対してはスクリーニング因子を常に考慮する。

まず、 $T_l = 4.2 \text{K}$ におけるエネルギー損失率を計算し実験データにフィットさせる。図 2-4 は平川・榊のデータと $N_s = 4.6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 、 $D = 8 \text{eV}$ でフィットさせた理論値である。ここで変形ポテンシャル結合に対してはスクリーニング因子は含まれていない。一方、変形ポテンシャルに対してスクリーニング因子を入れた場合もほとんど同じ理論値が $D = 11 \text{eV}$ を用いて得られる。次に Manion らのデータについて考察する。図 2-5 には Manion らのデータに対し $D = 16 \text{eV}$ でフィットした理論値と、比較のために平川・榊のデータに対してフィットした $D = 11 \text{eV}$ の理論値を示した。ここでは変形ポテンシャル結合にもスクリーニング因子が含まれている。スクリーニング因子を入れない場合も Manion らのデータを $D = 11.8 \text{eV}$ とした理論値で説明できる。従って、エネルギー損失率の温度依存性だけからでは変形ポテンシャル結合に対しスクリーニング因子を入れるべきか否かは決定できない。

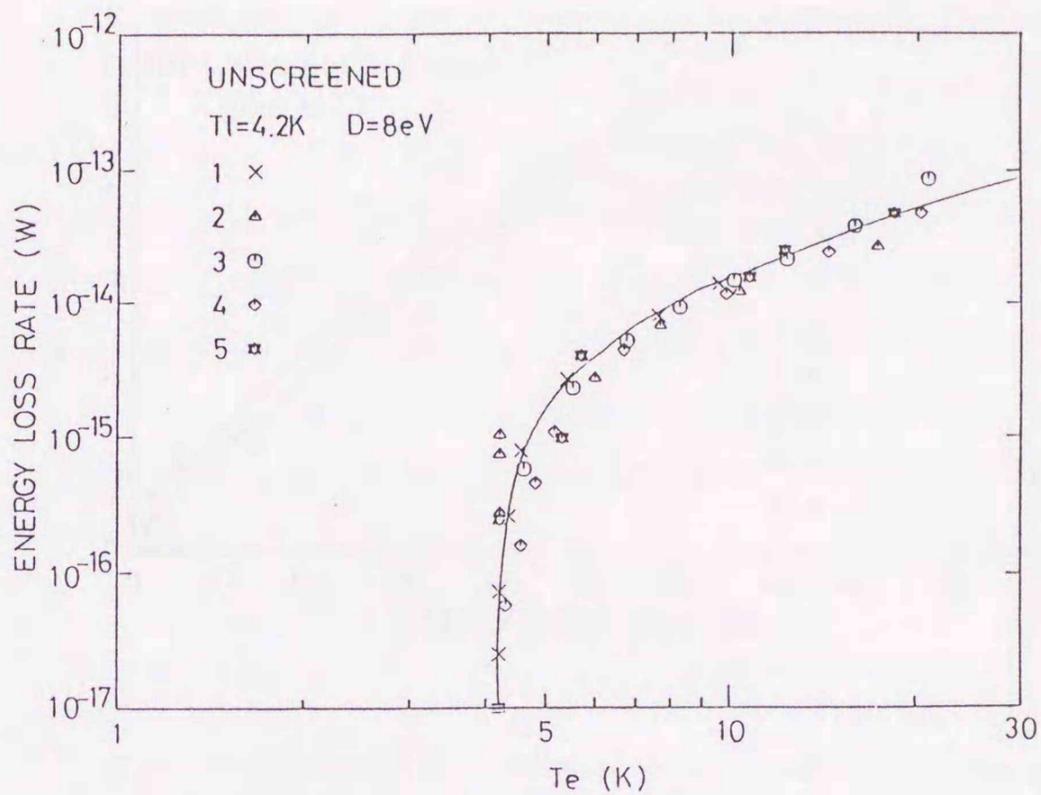


図2-4 $T_l = 4.2\text{K}$ におけるエネルギー損失率と T_e の関係。実線は試料3にフィットさせてある。変形ポテンシャル結合にはスクリーニング因子は入れていない。

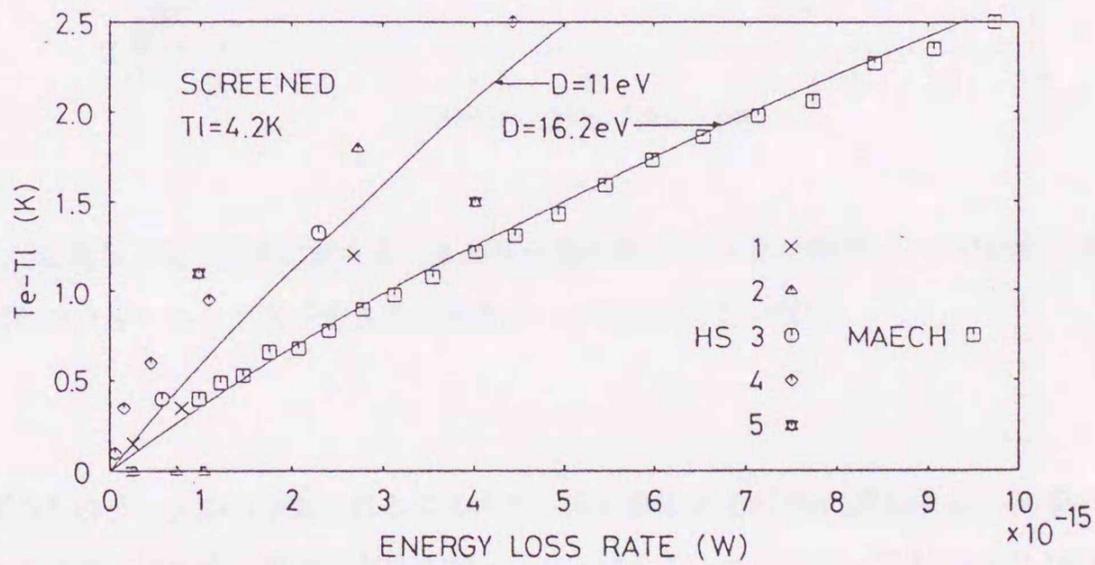


図2-5 $T_l = 4.2\text{K}$ におけるエネルギー損失率と $T_e - T_l$ の関係。実線は理論値であり、変形ポテンシャル結合にもスクリーニング因子を入れてある。

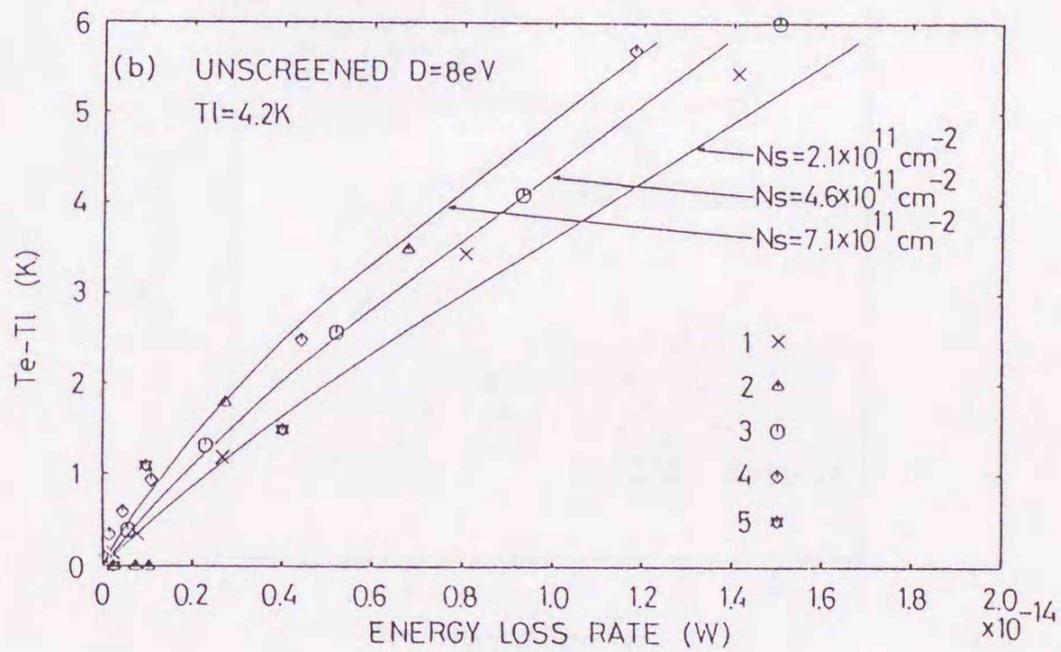
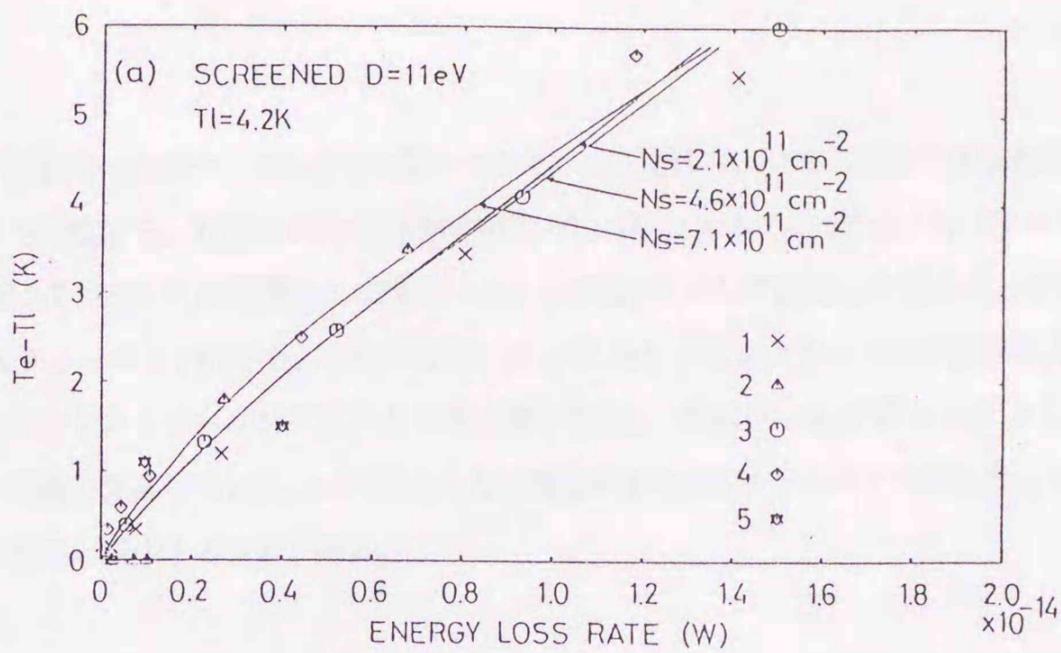


図 2-6 3つの異なる電子濃度に対するエネルギー損失率と $T_e - T_l$ の関係。(a) では変形ポテンシャル結合に対しスクリーニング因子を入れてあるが (b) では入れていない。

そこで図 2-5 のデータから示唆されるエネルギー損失率の N_s 依存性に注目する。 N_s をパラメータとして変えて電子エネルギー損失率の温度依存性を調べることにする。エネルギー損失率の N_s 依存性を明らかにするため、図 2-6(a) と 2-6(b) に N_s の異なる 3つの試料 1、3、4 に対して $D = 11\text{eV}$ を用いスクリーニング因子を入れた場合と $D = 8\text{eV}$ を用いスクリーニング因子を入れない場合の結果をそれぞれ示す。実験データとの比較は $D = 8\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れない理論を支持しているように見える。次に上で求めた D

のどの値が電子移動度の実験データと合うか調べてみる。ここでは(2.28)で与えられる移動度の逆数の温度係数 α [1,6,8,24-26]を考察する。計算において次の値を用いた。 $N_{depl} = 6.0 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ 、 $N_I = 1.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 、 $W_{sp} = 50 \text{\AA}$ 。図2-7は α を N_s の関数として異なった3つの場合について計算した値を示している。すなわち、 $D = 8\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れない場合、 $D = 11.8\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れない場合、そして $D = 16.2\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れた場合である。実験データは $D = 8\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れない理論を支持している。 α が N_s とともに増加するのはスクリーニングの結果としてピエゾエレクトリック結合の寄与が減少するためである。

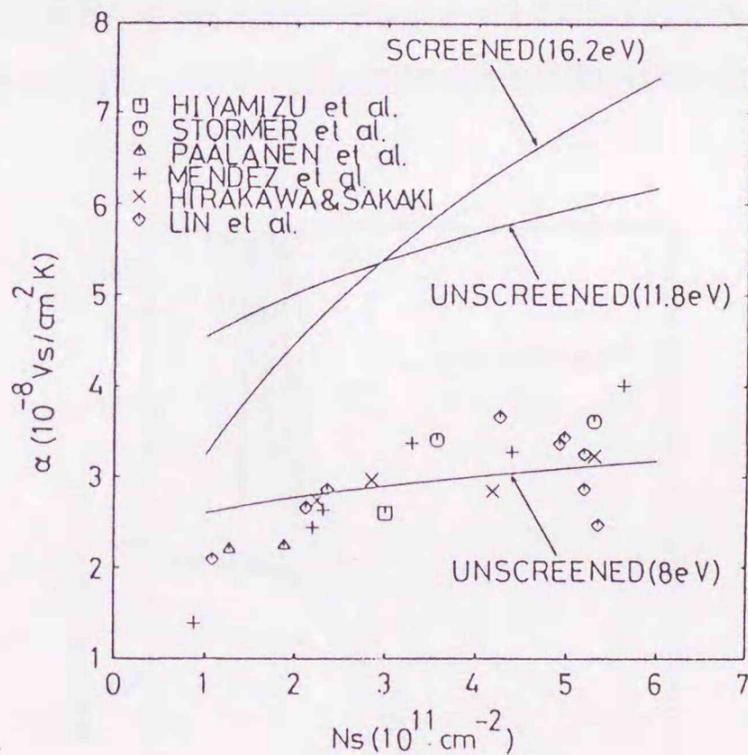


図2-7 移動度の逆数の温度係数 α と電子濃度の関係。

最後にいくつかコメントを述べておく。(i) $\zeta(z)$ としてFang-Howard変分関数を採用すると得られる D の値は1.2倍ほど大きくなるが、拡張されたFang-Howard変分関数を用いて求めた D はセルフコンシステントな数値計算による波動関数[5]を用いて得た D とほぼ等しい。これは拡張されたFang-Howard変分関数がかなり良い変分関数であることを示している。(ii)変形ポテンシャル結合は短距離相互作用であるからスクリーニング効果は小さいと期待される。本論文の結果はこの予想と一致する。従って本論文の計算で用いたRPAによるスクリーニング因子は変形ポテンシャル結合による電子・音響フォノン相互作用に対してはスクリーニン

ゲ効果を正しく記述していないと結論される。バルク GaAs に対する従来の理論解析[10-12]においては変形ポテンシャル結合にはスクリーニング因子は含まれていない。(iii) 図 2-6 のエネルギー損失率の N_s 依存性の解析において3つの試料のデータのみ採用した。他の2つの試料のデータは1つの D でフィットするにはばらつきが多すぎるためである。(iv) 本論文で得た $D = 8\text{eV}$ では Manion らのデータを説明することはできないが、これは彼らの試料が電子を非弾性的に散乱する何か別の散乱体を含んでいるためであろう。

以上、本章の結果をまとめると、拡張された Fang-Howard 変分関数を用いて電子エネルギー損失率及び電子移動度の実験データを解析することにより変形ポテンシャル定数 D の値を決定した。求めた D の値はバルク GaAs で得られている値とほぼ等しい。スクリーニング因子は長距離相互作用である piezoelectronic 結合には必要だが短距離相互作用である変形ポテンシャル結合には必要ない。従って $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合とバルク GaAs での電子・フォノン相互作用の大きさに違いはないという結論に達した。

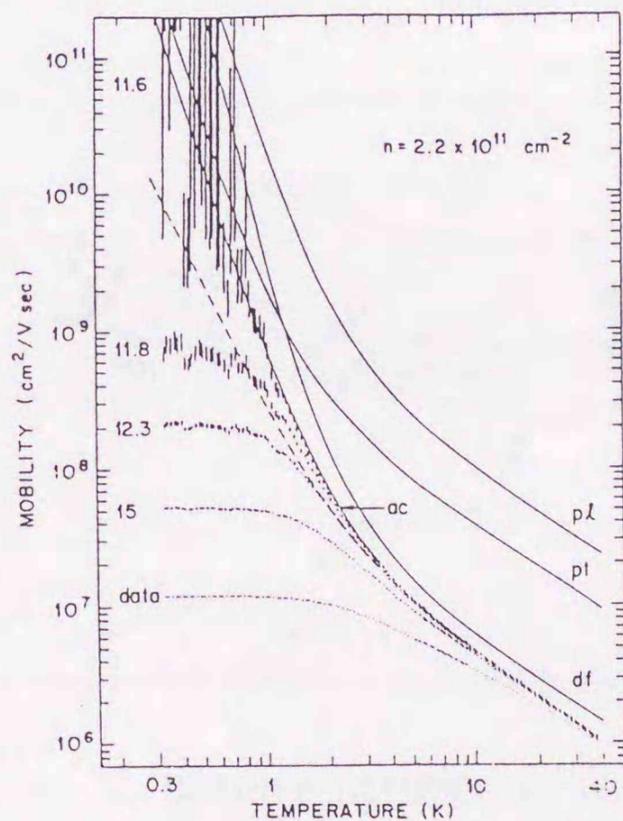


図 2-8 移動度の温度依存性[27]。df、pl、pt は変形ポテンシャル結合、縦波及び横波の piezoelectronic 結合の寄与を表し、ac はそれらの和を表す。 $D = 11.5\text{eV}$ で、スクリーニング因子を入れてある。破線は $D = 6\text{eV}$ とし、すべての結合にスクリーニング因子を入れない場合の値である。data が生データであり、数字の付いたものは温度に依存しない寄与を引いた後の値である。

パラメータと電子・フォノン散乱に対するスクリーニング因子の取り扱い方に関する以上の結論は Stormer ら[27]による最近の実験データとも矛盾はない。彼らは $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における二次元電子系の電子移動度に関して、初めて Bloch-Grüneisen 領域[28]を確認した(図 2-8)。この温度領域ではスクリーニング因子を考慮すると変形ポテンシャル結合による移動度は T^{-7} の温度依存性を示し、 piezoelectric 結合による移動度は T^{-5} の温度依存性を示すことが理論的に明らかにされている。スクリーニング因子を入れない場合の温度依存性はそれぞれ T^{-5} 、 T^{-3} となる。理論と実験の比較から Stormer らは変形ポテンシャル定数として $D = 11 \sim 13.5\text{eV}$ が必要であり、スクリーニング因子は入れるべきであるとの結論に達した。しかし別の選択も可能である。すなわち変形ポテンシャル結合に対してはスクリーニング因子を入れず $D = 6 \sim 7\text{eV}$ を用い、一方 piezoelectric 結合に対してはスクリーニング因子を入れ通常の piezoelectric 定数を用いても実験データを説明できるのである。これは実験が行われているような低温では電子移動度の大きさ及びふるまいは piezoelectric 結合に支配されているという事情のためである。

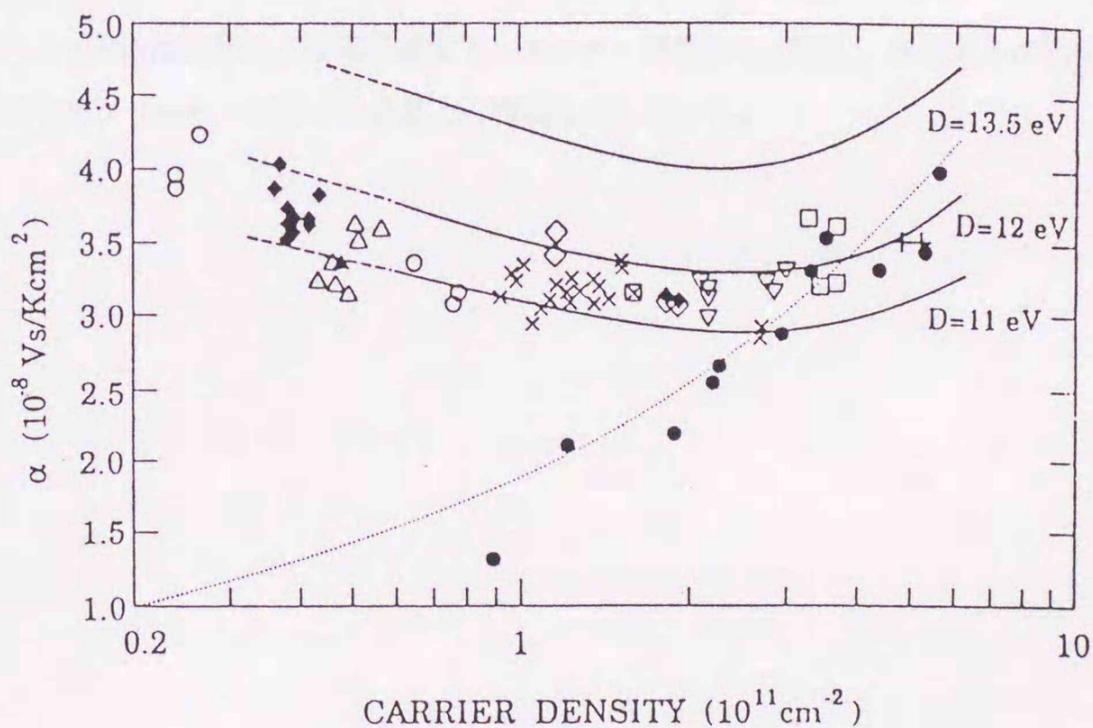


図 2-9 低電子濃度における α と電子濃度の関係[30]。計算では変形ポテンシャル結合にスクリーニング因子を入れてある。

尚、最近 Harris ら[29]は α の測定を低電子濃度まで拡張し、 α が電子濃度が減少するにつれ減少した後増

加することを見いだした。この実験データに対し Kawamura と Das Sarma[30]は $D = 12\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れた理論で説明できると主張した。図 2-9 に Harris らのデータ及び Kawamura と Das Sarma による計算結果を示す。但し、●は Mendez ら[6]のデータであり、点線は $D = 13.5\text{eV}$ 、 $N_{\text{depl}} = 0$ とした場合の理論値である。本論文の取り扱いすなわち $D = 8\text{eV}$ としスクリーニング因子をピエゾエレクトリック結合のみに取り入れる理論は残念ながら低電子濃度での α のふるまいを説明できない。しかし最近になり、低電子濃度では縮退が弱く、イオン化不純物散乱による移動度が温度依存性を示すことが実験[31-33]と理論[34]の両方から示されており、従来の音響フォノン散乱のみを考慮した低電子濃度における α の解析は見直す必要が生じてきている。イオン化不純物散乱の解析にはイオン化不純物の濃度、スペーサ層の厚さといった試料ごとのパラメータの値が必要である。イオン化不純物散乱を考慮した詳しい解析は今後の課題である。

一方、エネルギー損失率に関しては Kawamura ら[35]が Manion ら[5]の実験データを解析し準粒子励起と LO フォノンの結合を考慮することで $D = 7\text{eV}$ というバルク GaAs の値が妥当であると結論づけ、平川・榊[9]の実験データは理論と合わないとしている。しかしこの結果は彼らの電子移動度の解析から得た結論とは D の値が大きく異なっており、移動度と電子エネルギー損失率を同時には説明できていない。またごく最近 Ma ら[36]はサブバンド間散乱が起きる高電子濃度でエネルギー損失率を測定し、本論文とは異なる結論すなわち $D = 12\text{eV}$ でありスクリーニング因子は必要との結論に達している。

参考文献

- 1 B.J.F.Lin, D.C.Tsui, and G.Weimann, Solid State Commun.**56**,287(1985).
- 2 P.J.Price, Phys.Rev.B**32**,2643(1985).
- 3 W.Walukiewicz, H.E.Ruda, J.Lagowski, and H.C.Gatos, Phys.Rev.B**32**,2645(1985).
- 4 B.Vinter, Phys.Rev.B**33**,5904(1986); Surf.Sci.**170**,445(1986).
- 5 S.J.Manion, M.Artaki, M.A.Emanuel, J.J.Coleman, and K.Hess, Phys.Rev.B**35**,9203(1987).
- 6 E.E.Mendez, P.J.Price, and M.Heiblum, Appl.Phys.Lett.**45**,294(1984).
- 7 P.Pfeffer, I.Gorczyca, and W.Zawadzki, Solid State Commun.**51**,179(1984).
- 8 K.Hirakawa and H.Sakaki, Phys.Rev.B**33**,8291(1986).
- 9 K.Hirakawa and H.Sakaki, Appl.Phys.Lett.**49**,889(1986).
- 10 D.L.Rode, Phys.Rev.B**2**,1012(1970).
- 11 C.M.Wolfe, G.E.Stillman, and W.T.Lindley, J.Appl.Phys.**41**,3088 (1970).
- 12 D.L.Camphausen, G.A.N.Connel, and W.Paul, Phys.Rev.Lett.**26**,184(1971).
- 13 M.Cardona and N.E.Christensen, Phys.Rev.B**35**,6182(1987).
- 14 C.G.Van de Walle and R.M.Martin, Phys.Rev.Lett.**62**,2028(1989).
- 15 T.Ando, J.Phys.Soc.Jpn.**51**,3893(1982); **51**,3900(1982).
- 16 W.Walukiewicz, H.E.Ruda, J.Lagowski, and H.C.Gatos, Phys.Rev.B**30**,4571(1984).
- 17 Y.Okuyama and N.Tokuda, Phys.Rev.B**40**,9744(1989).
- 18 T.Ando, A.B.Fowler, and F.Stern, Rev.Mod.Phys.**54**,437(1982).
- 19 F.F.Fang and W.E.Howard, Phys.Rev.Lett.**16**,797(1966).
- 20 F.Stern, Phys.Rev.Lett.**18**,546(1967).
- 21 P.F.Maldague, Surf.Sci.**73**,296(1978).
- 22 P.J.Price, Ann.Phys.(N.Y.)**133**,217(1981); Surf.Sci.**113**,199(1982); **143**,145(1984).
- 23 D.L.Rode, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by R.K.Willardson and A.C.Beer(Academic, New York, 1975), Vol.10.
- 24 H.L.Störmer, A.Pinczuk, A.C.Gossard, and W.Wiegmann, Appl.Phys.Lett.**38**,691(1981).
- 25 S.Hiyamizu, J.Saito, K.Nanbu, and T.Ishikawa, Jpn.J.Appl.Phys.**22**,L609(1983).
- 26 M.A.Paalanen, D.C.Tsui, A.C.Gossard, and J.C.M.Hwang, Phys.Rev.B**29**,6003(1984).
- 27 H.L.Stormer, L.N.Pfeiffer, K.W.Baldwin, and K.W.West, Phys.Rev.B**41**,1278(1990).
- 28 P.J.Price, J.Appl.Phys.**53**,6863(1982); Solid State Commun.**51**,607(1984).

- 29 J.J.Harris, C.T.Foxon, D.Hilton, J.Hewett, C.Roberts, and S.Auzoux, Surf.Sci.**229**,113(1990).
- 30 T.Kawamura and S.Das Sarma, Phys.Rev.B**42**,3725(1990).
- 31 C.T.Foxon, J.J.Harris, D.Hilton, J.Hewett, and C.Roberts, Semicond.Sci.Technol.**4**,582(1989).
- 32 L.Pfeiffer, K.W.West, H.L.Stormer, and K.W.Baldwin, Appl.Phys.Lett.**55**,1888(1989).
- 33 M.Shayegan, V.J.Goldman, C.Jiang, T.Sajoto, and M.Santos, Appl.Phys.Lett.**52**,1086(1988).
- 34 A.Gold, Phys.Rev.B**38**,10798(1988); Appl.Phys.Lett.**54**,2100(1989); Phys.Rev.B**41**,8537(1990).
- 35 T.Kawamura, S.Das Sarma, R.Jalabert, and J.K.Jain, Phys.Rev.B**42**,5407(1990).
- 36 Y.Ma, R.Fletcher, E.Zaremba, M.D'Iorio, C.T.Foxon, and J.J.Harris, Phys.Rev.B**43**,9033(1991).

3章 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における二次元電子系の フォノン・ドラッグ熱電能

3.1 序論

近年 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合において電気的性質のみならず熱電効果も興味を持たれ始めている [1-4]。熱電能 S は関係式 $\mathbf{E} = S\nabla T$ により定義される。ここで T は温度であり、 \mathbf{E} は温度勾配により発生する電場である。温度勾配は電子とフォノンの流れを引き起こす。前者は電子拡散熱電能 S_d を発生させる。後者は電子・フォノン相互作用を介して電子系に運動量を与え新たな電子の流れを作り出す。これがフォノン・ドラッグ熱電能 S_g の原因となる。これまでに $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における低温での熱電能はかなり低い温度を除いてフォノン・ドラッグの寄与が支配的であることがわかっている [1,3,6-8]。 S_g は理論的にも調べられている [2,4,5,9,10]。 Cantrell と Butcher [4,5] は電子とフォノンに対する 2 本の Boltzmann 方程式から S_g に対する表式を導出した。彼らは量子井戸に対する電子波動関数を用い、変形ポテンシャル結合による電子・音響フォノン相互作用 (スクリーニング因子を含まない) のみを考慮して S_g を評価した。計算結果は実験データを定性的には説明できた。その後 Cantrell-Butcher (CB) 理論に基づいて piezoelectric 結合の寄与も考慮したより詳しい計算が Lyo [9] により行われた。彼はヘテロ接合中の電子の波動関数として Fang-Howard 変分関数 [11] を用い、電子・フォノン相互作用にスクリーニング因子を考慮した。理論値は $D = 9.3\text{eV}$ [12,13] を用いて実験データ [1,3] の大きさ、温度依存性ともにほぼ説明することができたが、その後 S_g に対して Lyo が用いた式は因子 2 だけ余分であることが明らかとなったため、 S_g の実験データが CB 理論と既知の結合定数で説明できるかどうか改めて検討する必要性が生じた。

前章で述べたように $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合での変形ポテンシャル定数に関する議論が絶えないが、Lyo は $D = 9.3\text{eV}$ という値を用いた。 S_g の解析は D の値、スクリーニング因子の取り扱い、piezoelectric 結合の寄与などに依存しているので、計算を進める上ではこれらの要素を適切に扱うことが必要となる。

本章では CB 理論に基づいて $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における低温でのフォノン・ドラッグ熱電能を解析する [14]。前章同様、piezoelectric 結合に対してはスクリーニング因子を考慮するが、変形ポテンシャル結合に対してはスクリーニング因子の妥当性を理論値と実験値の比較から判定するという立場をとる。さらに Lyo の計算が正しくない式を用いて評価したにもかかわらず実験値とほぼ一致したかを示す。尚、本論文では扱わないが磁場中での熱電能の研究も実験、理論両方面から活発に行われている [15-22]。

3.2 フォノン・ドラッグ熱電能の理論

電子拡散熱電能は次式で与えられる[2] (付録 B 参照)。

$$S_d = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 |e| E_F} p + 1. \quad (3.1)$$

ここで p は電子移動度のエネルギー依存性から決められる因子である。以下の計算では実験[23]から決められた値に近い $p = 1$ を仮定する。フォノン・ドラッグ熱電能に関心があるので以下では生の実験データから (3.1) により評価した電子拡散の寄与を引いた量をフォノン・ドラッグ熱電能の実験データと呼ぶ。以下で考察する温度領域 ($1\text{K} \leq T \leq 5\text{K}$) では電子移動度はイオン化不純物散乱によってほぼ決まる。

フォノン・ドラッグ熱電能は次式で与えられる[4,5] (付録 B 参照)。

$$S_g = \frac{|e|}{\sigma L^2 k_B T^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, s} \hbar \omega_{\mathbf{q}, s} \tau_{\mathbf{q}, s} f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] P_{\mathbf{q}, s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (\tau_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \tau_{\mathbf{k}'} \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}) \cdot \nabla_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}, s}. \quad (3.2)$$

ここで σ は電気伝導度、 L^2 は二次元電子系の面積、 $\hbar \omega_{\mathbf{q}, s}$ は波数ベクトル \mathbf{q} でモード s のフォノンのエネルギー、 $\tau_{\mathbf{q}, s}$ はフォノンの運動量緩和時間、 $f(\mathbf{k})$ は Fermi 分布関数、 $\tau_{\mathbf{k}}$ はイオン化不純物散乱による電子の運動量緩和時間、 $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ は波数ベクトル \mathbf{k} の電子の速度ベクトルである。Lyo[9]の論文では S_g の対応する式は余分な因子 2 を含んでいる。遷移確率 $P_{\mathbf{q}, s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は次式で与えられる。

$$P_{\mathbf{q}, s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\mathbf{q}, s}|^2 n_{\mathbf{q}, s} \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_{\mathbf{q}, s}) |I(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}_{\parallel}}. \quad (3.3)$$

ここで $n_{\mathbf{q}, s}$ はモード (\mathbf{q}, s) のフォノンに対する Planck 分布であり、 \mathbf{q}_{\parallel} と q_z は \mathbf{q} の平行 (xy 面内) 成分と垂直 (z 方向) 成分である。重なり積分 $I(q_z)$ は次式で定義される。

$$I(q_z) = \int_0^{\infty} \zeta^2(z) \exp(iq_z z) dz. \quad (3.4)$$

ここで $\zeta(z)$ は最低サブバンドに対応する包絡関数である。ここでは $\zeta(z)$ として次の Fang-Howard 変分関数[11] を用いる。

$$\zeta(z) = (b^3/2)^{1/2} z \exp(-bz/2). \quad (3.5)$$

変分パラメータ b は次式で与えられる。

$$b = \left[\frac{48\pi m^* e^2}{\kappa_0 \hbar} \left(N_{depl} + \frac{11}{32} N_s \right) \right]^{1/3}. \quad (3.6)$$

(3.5) を (3.4) に代入すると

$$|I(q_z)|^2 = b^6 / (b^2 + q_z^2)^3 \quad (3.7)$$

となる。 $|V_{qs}|^2$ は電子・フォノン相互作用に対する行列要素の二乗であり縦モードに対しては[24]

$$|V_{qt}|^2 = \frac{\hbar\omega_{qt}}{2\epsilon^2(q_{\parallel})\rho c_t^2 L^3} \left[D^2 + (eh_{14})^2 \frac{A_l}{q^2} \right], \quad (3.8)$$

横モードに対しては[24]

$$|V_{qt}|^2 = \frac{\hbar\omega_{qt}}{2\epsilon^2(q_{\parallel})\rho c_t^2 L^3} (eh_{14})^2 \frac{A_t}{q^2} \quad (3.9)$$

である。ここで h_{14} は piezoelectric tensor の成分、 ρ は質量密度、 c_l 、 c_t はそれぞれ縦波音速度、横波音速度、 L^3 は系の体積である。 A_l 、 A_t はそれぞれ次式で与えられる[24]。

$$A_l = 9q_{\parallel}^4 q_z^2 / 2q^6, \quad (3.10)$$

$$A_t = (8q_{\parallel}^2 q_z^4 + q_{\parallel}^6) / 4q^6. \quad (3.11)$$

スクリーニング因子は次の RPA による式を用いる[25]。

$$\epsilon(q_{\parallel}) = 1 + \frac{2\pi e^2}{\kappa_0 q} F(q_{\parallel}) \Pi(q_{\parallel}). \quad (3.12)$$

ここで形状因子 $F(q_{\parallel})$ は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} F(q_{\parallel}) &= \int_0^{\infty} dz \int_0^{\infty} dz' \zeta^2(z) \zeta^2(z') \exp(-q_{\parallel} |z - z'|) \\ &= \frac{(8b^2 + 9bq_{\parallel} + 3q_{\parallel}^2)b}{8(b + q_{\parallel})^3}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

$T = 0K$ における静分極関数は次式で与えられる[25]。

$$\Pi(q_{\parallel}) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \left\{ 1 - \theta(q_{\parallel} - 2k_F) \left[1 - \left(\frac{2k_F}{q_{\parallel}} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}. \quad (3.14)$$

以下で考察する温度領域 ($\leq 5K$) では $T = 0K$ におけるスクリーニング因子を用いる。

フォノンの運動量緩和時間は境界散乱で決まると仮定する。この仮定は系の熱伝導度が考える温度領域で T^3 則を示し[7]、フォノンの境界散乱により説明されるという事実に基づく。その1例を図3-1に示す[3]。直線が T^3 の傾きを表している。従って τ_{qs} は次のようになる。

$$\tau_{qs} = \Lambda / c_s. \quad (3.15)$$

Λ はフォノンの平均自由行程であり、計算においては熱伝導度の温度依存性から実験的に得た Λ の値を採用する。

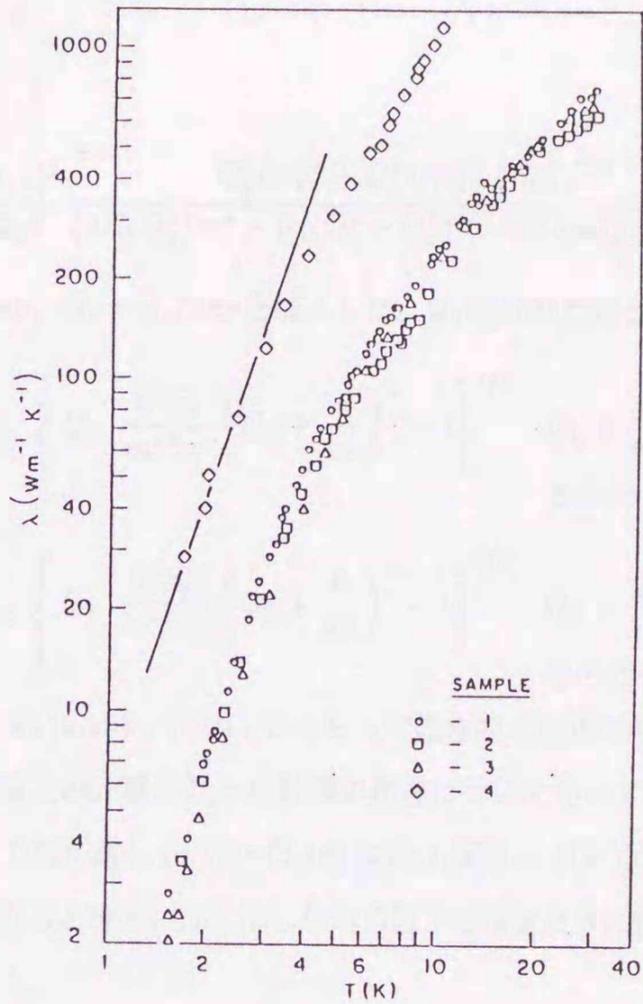


図 3-1 低温における熱伝導度の測定例[3]。実線はフォノンの境界散乱から期待される T^3 の温度依存性の傾きを表す。

フォノン・ドラッグ熱電能は変形ポテンシャル結合の寄与とピエゾエレクトリック結合の寄与（縦モードと横モード）の和からなる。

$$S_g = S_g^{DP} + S_g^{PE-L} + S_g^{PE-T}. \quad (3.16)$$

ここでそれぞれの寄与は次式で与えられる。

$$S_g^{DP} = -\frac{8m^*\Lambda D^2 k_F^5}{\pi^3 N_s |e| k_B T^2 \rho \hbar} \int_0^\infty dE_{\mathbf{k}} \int_0^\infty dQ_{\parallel} \int_{(Q_z)_{\min}}^{(Q_z)_{\max}} dQ_z f(E_{\mathbf{k}}) \{1 - f[E_{\mathbf{k}} + 2\hbar k_F c_l (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2}]\} \\ \times n_{ql} \frac{|I(2k_F Q_z)|^2}{\epsilon^2 (2k_F Q_{\parallel})} \frac{Q_{\parallel}^3 (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2}}{\{2E_{\mathbf{k}} Q_{\parallel}^2 / m^* - [c_l (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2} - \hbar k_F Q_{\parallel}^2 / m^*]^2\}^{1/2}}, \quad (3.17)$$

$$S_g^{PE-L} = -\frac{m^* \Lambda (eh_{14})^2 k_F^3}{\pi^3 N_s |e| k_B T^2 \rho \hbar} \int_0^\infty dE_{\mathbf{k}} \int_0^\infty dQ_{\parallel} \int_{(Q_z)_{\min}}^{(Q_z)_{\max}} dQ_z f(E_{\mathbf{k}}) \{1 - f[E_{\mathbf{k}} + 2\hbar k_F c_l (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2}]\} \\ \times n_{ql} \frac{|I(2k_F Q_z)|^2}{\epsilon^2 (2k_F Q_{\parallel})} \frac{9Q_z^2 Q_{\parallel}^7 / (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{7/2}}{\{2E_{\mathbf{k}} Q_{\parallel}^2 / m^* - [c_l (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2} - \hbar k_F Q_{\parallel}^2 / m^*]^2\}^{1/2}}, \quad (3.18)$$

$$S_g^{PE-T} = -\frac{m^* \Lambda (eh_{14})^2 k_F^3}{\pi^3 N_s |e| k_B T^2 \rho \hbar} \int_0^\infty dE_{\mathbf{k}} \int_0^\infty dQ_{\parallel} \int_{(Q_z)'_{\min}}^{(Q_z)'_{\max}} dQ_z f(E_{\mathbf{k}}) \{1 - f[E_{\mathbf{k}} + 2\hbar k_F c_l (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2}]\}$$

$$\times n_{qt} \frac{|I(2k_F Q_z)|^2}{\epsilon^2 (2k_F Q_{\parallel})} \frac{Q_{\parallel}^5 (8Q_z^4 + Q_{\parallel}^4) / (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{7/2}}{\{2E_k Q_{\parallel}^2 / m^* - [c_t (Q_{\parallel}^2 + Q_z^2)^{1/2} - \hbar k_F Q_{\parallel}^2 / m^*]^2\}^{1/2}} \quad (3.19)$$

ここで無次元量 $Q_{\parallel} = q_{\parallel} / 2k_F$, $Q_z = q_z / 2k_F$ を導入した。 Q_z 積分の上限と下限はそれぞれ次式で与えられる。

$$(Q_z)_{max} = \begin{cases} Q_{\parallel} \left[\frac{\hbar^2 k_F^2}{m^{*2} c_t^2} \left(Q_{\parallel} + \frac{k}{k_F} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} & Q_{\parallel} + \frac{k}{k_F} > \frac{m^* c_t}{\hbar k_F} \text{ のとき} \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (3.20)$$

$$(Q_z)_{min} = \begin{cases} Q_{\parallel} \left[\frac{\hbar^2 k_F^2}{m^{*2} c_t^2} \left(Q_{\parallel} + \frac{k}{k_F} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} & Q_{\parallel} - \frac{k}{k_F} > \frac{m^* c_t}{\hbar k_F} \text{ のとき} \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (3.21)$$

$(Q_z)_{max}'$, $(Q_z)_{min}'$ はそれぞれ (3.20)、(3.21) で c_t を c_l で置き換えた式で与えられる。

計算結果を示す前に本論文の計算と Lyo の計算の相違について述べておく必要がある。Lyo は (3.3) におけるデルタ関数の中の $\hbar \omega_{qs}$ の項を落し (3.17)~(3.19) 中の $f(\mathbf{k})[1 - f(\mathbf{k}')]$ の項を $k_B T \delta(E_k - E_{F'})$ で置き換えた。この近似 (以下 Lyo の近似と呼ぶ) はしかしながら以下で示すように誤りである。本論文ではエネルギー保存則を考慮して計算を行う。

3.3 結果と考察

(3.16)~(3.19) を評価し結果を Fletcher ら [7,8] の 4 つの試料 (A1~A4) の実験データと比較する。また比較のため Lyo の近似を用いて計算した結果も示す。計算で用いたパラメータは $\kappa_0 = 12.9$ 、 $m^* = 0.067m_0$ 、 $c_l = 5.14 \times 10^5 \text{ cm/s}$ 、 $c_t = 3.04 \times 10^5 \text{ cm/s}$ 、 $\rho = 5.3 \text{ g/cm}^3$ 、 $h_{14} = 1.2 \times 10^7 \text{ V/cm}$ である。彼らの論文で与えられていない N_{depl} はゼロと仮定した。各試料の電子濃度は $2.21 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (試料 A1)、 $2.82 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (試料 A2)、 $3.90 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (試料 A3)、 $5.95 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (試料 A4) である。これら 4 つの試料は 1 つの試料に光を照射し電子濃度を変えているだけなので、フォノンの平均自由行程はすべて同じであり $\Lambda = 1.5 \text{ mm}$ である [7,8]。

まず S_g の温度依存性を調べる。図 3-2(a) と (b) は実験データとともにスクリーニング因子を入れず $D = 8 \text{ eV}$ を用いた理論の計算結果、スクリーニング因子を入れ $D = 11 \text{ eV}$ を用いた理論の計算結果をそれぞれ示している。すでに述べたように、図に示した実験データは熱電能全体のデータから電子拡散熱電能 S_d を引いた値である。 S_d は (3.1) で $p = 1$ として評価した。 p の値の誤差は $|S_g|$ が $|S_d|$ に比べ非常に大きいため S_g の評価にはほとんど影響しない。実線は本論文の計算結果であり、TO、DP、PE はそれぞれトータルの熱電能、変形ポテンシャル結合の寄与、ピエゾエレクトリック結合の寄与を表している。点線は Lyo の近似を用いた場合の結果 (但し因子 2 の誤りは訂正した後) を表す。

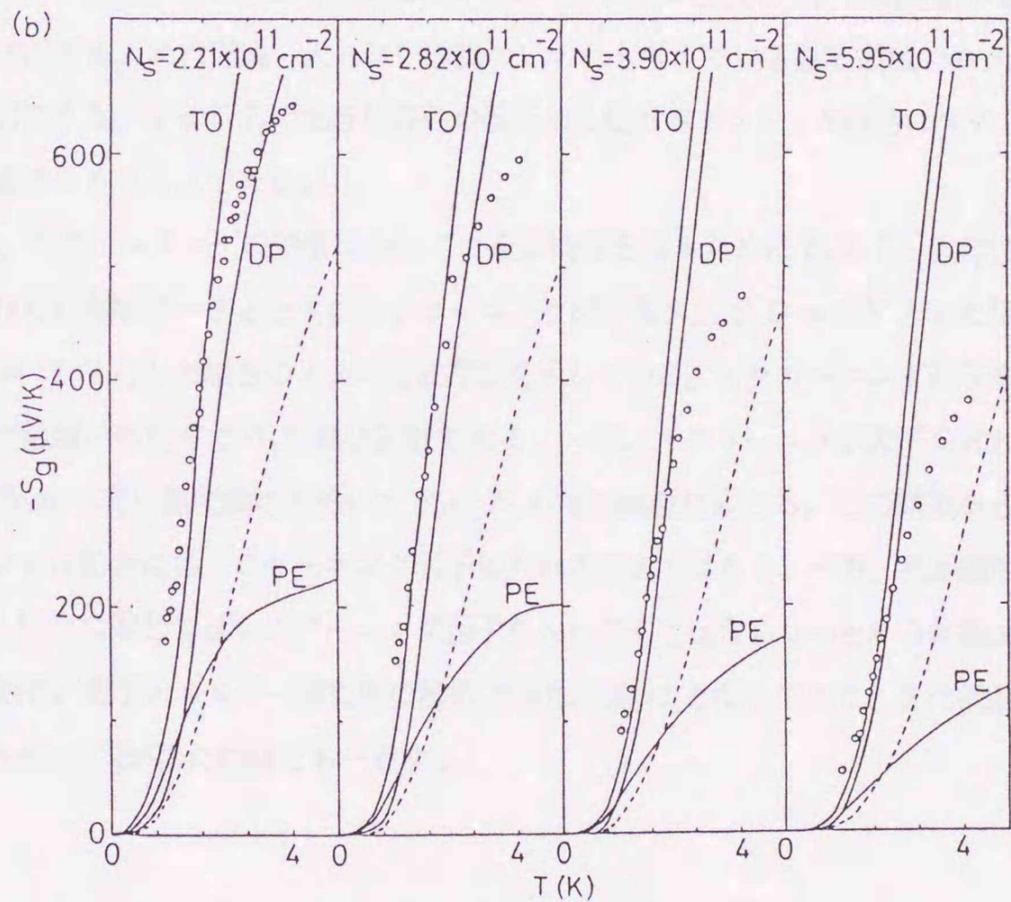
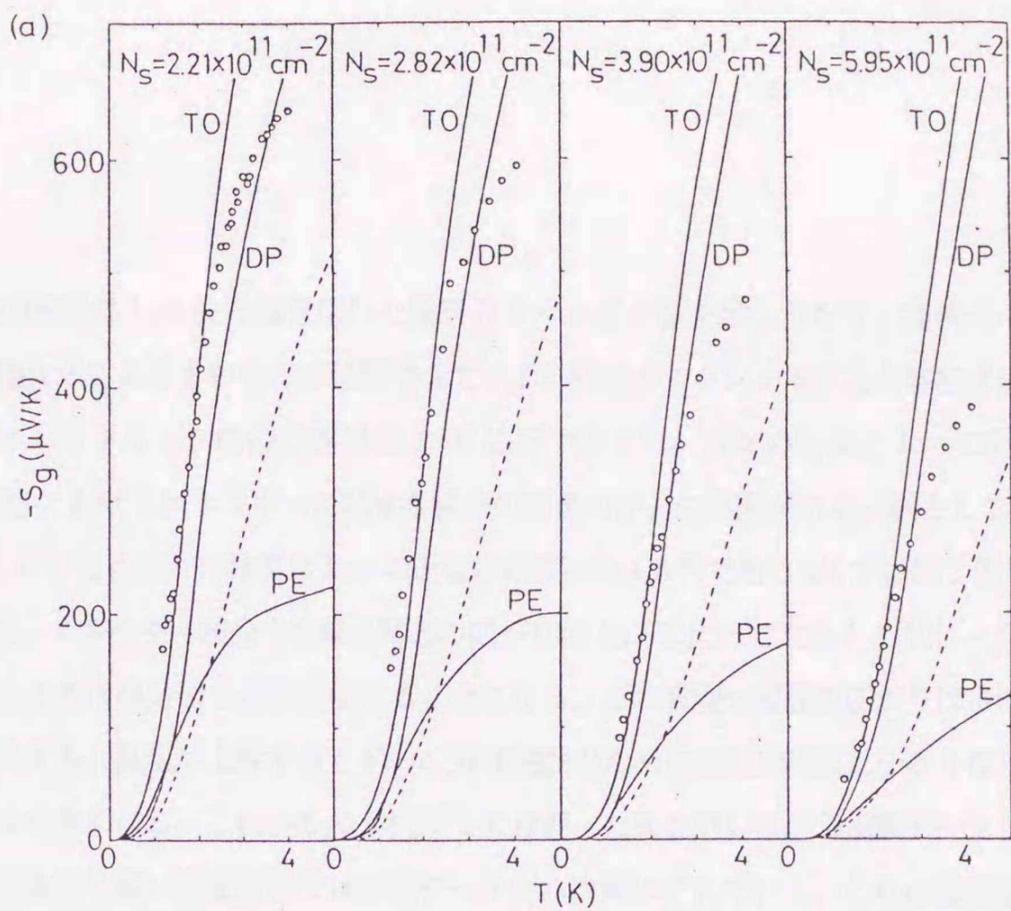


図3-2 (a) フォノン・ドラッグ熱電能と温度の関係。実線は理論値で DP、PE、TO は変形ポテンシャル結合、 piezoelectric 結合の寄与及びその和を表し、破線は Lyo の近似による値である。 $D = 8\text{eV}$ とし、変形ポテンシャル結合にスクリーニング因子は入っていない。(b) $D = 11\text{eV}$ とし、スクリーニング因子をいれた場合。

本論文の結果は Lyo の近似を用いた結果の 2 ~ 4 倍の値を示しており、実験データの大きさや温度とともに急激に増大するふるまいをほぼ説明できている。変形ポテンシャル結合の寄与はほぼ 1.5K 以上で大きく、一方ピエゾエレクトリック結合の寄与は 1.5K 以下で大きい。我々の結果と Lyo の近似による結果の相違は (3.17)~(3.19) におけるエネルギーに関する積分の評価の仕方に原因がある。例として $N_S = 2.21 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ に対しては 1K のとき我々の結果は Lyo の近似の結果の約 4.3 倍であり 5K では約 2 倍である。これは次のような理由による。エネルギー積分の被積分関数の広がり $f(\mathbf{k})[1-f(\mathbf{k}')] / k_B T \delta(E_{\mathbf{k}} - E_F)$ を $k_B T \delta(E_{\mathbf{k}} - E_F)$ で置き換えることは積分値を過小評価することになる。この被積分関数の広がり $f(\mathbf{k})[1-f(\mathbf{k}')] / k_B T \delta(E_{\mathbf{k}} - E_F)$ はほぼフォノンのエネルギーの大きさで決まる。温度が上昇すると Fermi 分布関数のために被積分関数は小さくなり、結果として 2 つの計算結果の差は小さくなる。これが Lyo が因子 2 だけ誤った式を用いながら実験データとほぼ一致した理由である。我々の理論値は高い温度領域では実験データから次第にずれていく。これは温度が上昇するにつれ境界散乱以外のフォノン散乱メカニズム（例えばフォノン・フォノン散乱など）が効き始めるためと考えられる。スクリーニング因子を入れた理論、入れない理論のいずれも考えている温度領域での S_g の温度依存性をほぼ同じように説明できる。従って S_g の温度依存性の解析から変形ポテンシャル結合にスクリーニング因子を入れるべきか否かを定めることはできない。

そこで、スクリーニングの効果についてさらに情報を得るために S_g の N_s 依存性を考察する。図 3-3(a) と (b) はそれぞれ実験データとともにスクリーニング因子を入れず $D = 8\text{eV}$ とした場合、スクリーニング因子を入れ $D = 11\text{eV}$ とした場合の S_g の N_s 依存性を示している。スクリーニング因子を入れない場合、 S_g は考えている温度領域にわたって N_s の減少関数である。一方、スクリーニング因子を入れると温度が上昇するにつれ大きい N_s かつ高い温度領域を除いて S_g は N_s の増加関数に変わる。この結果から短距離相互作用である変形ポテンシャル結合にはスクリーニング因子は入れるべきではなく、一方、長距離相互作用であるピエゾエレクトリック結合に対してはスクリーニング因子を入れなくてはならないという結論に達した。この結論は前章の電子移動度、電子エネルギー損失率の解析で得た結論[26]と同じであり、また低温での電子移動度の解析から Walukiewicz[13]が得た結論とも一致する。

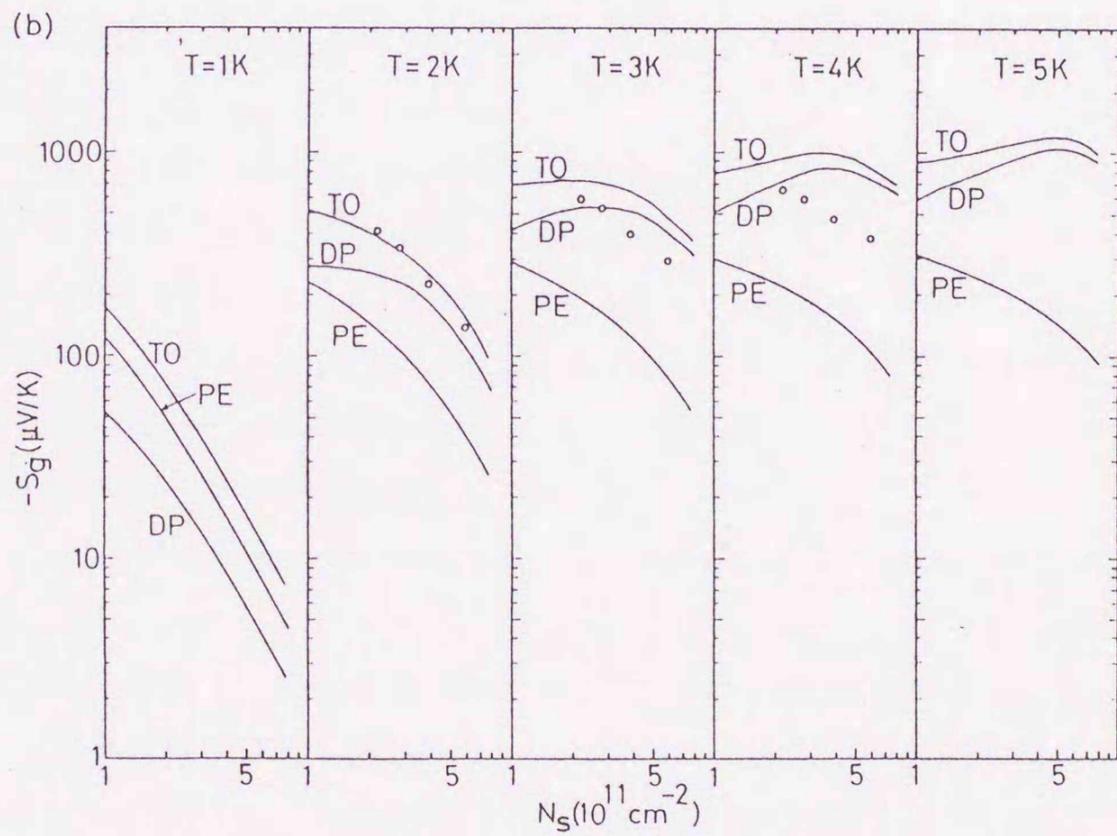
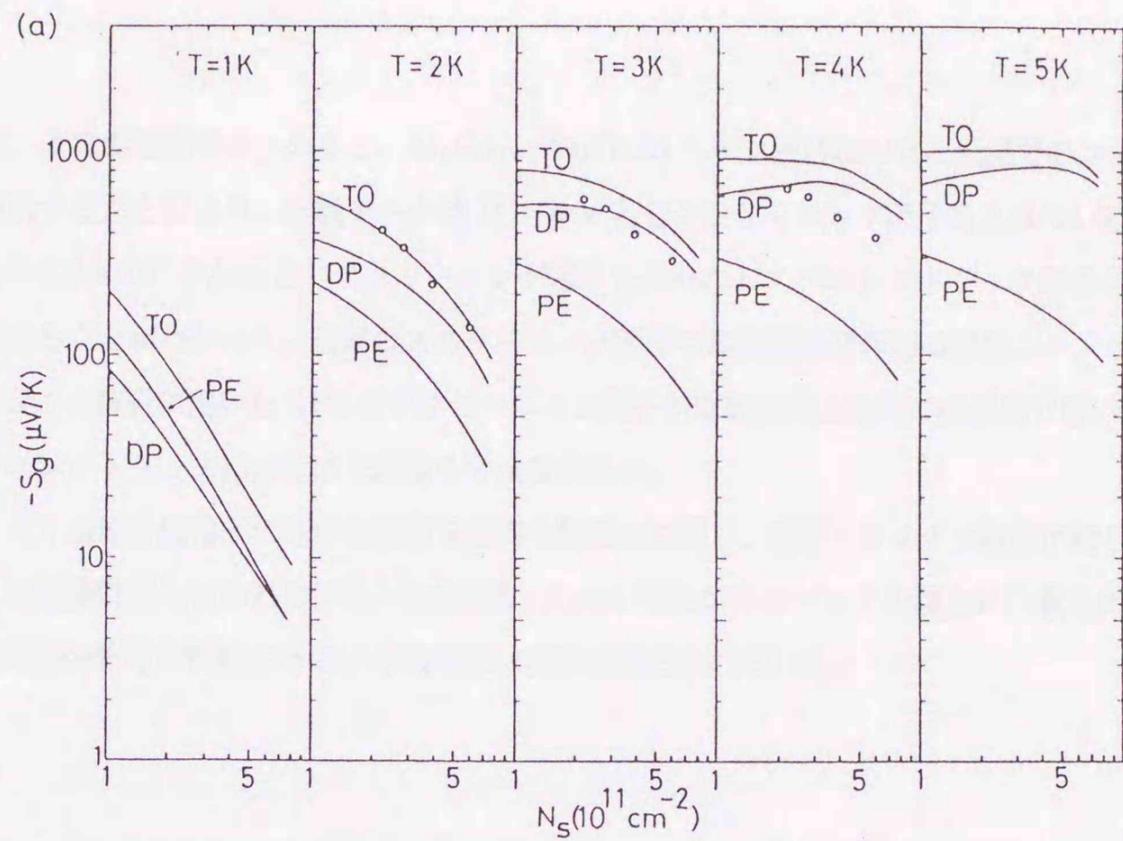


図 3-3 (a) 1~5K におけるフォノン・ドラッグ熱電能と電子濃度の関係。記号は図 3-2 と同じである。
 $D = 8\text{eV}$ とし、変形ポテンシャル結合にスクリーニング因子は入っていない。(b) $D = 11\text{eV}$ とし、
 スクリーニング因子を入れた場合。

以上、本章の結論をまとめると、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合における低温でのフォノン・ドラッグ熱電能を解析することにより、実験データは $D = 8\text{eV}$ としスクリーニング因子を入れない変形ポテンシャル結合と $h_{14} = 1.2 \times 10^7 \text{ V/cm}$ としスクリーニング因子を入れた piezoelectronic 結合を考慮した理論で良く説明できることがわかった。通常のスクリーニング因子は短距離相互作用の変形ポテンシャル結合には入れない方が良く（解析に用いた RPA のスクリーニング因子が短距離相互作用には適当でない）、長距離相互作用の piezoelectronic 結合には入れなくてはならない。

尚、ごく最近、超格子で井戸に垂直な方向の熱電能に関し、電子・フォノン散乱に対しウムクラップ過程を考慮した理論計算も行われた[27]。その結果、Fermi 準位がミニバンドの頂上に一致したときフォノン・ドラッグ熱電能の符号が反転するという興味深い現象が見出されている。

参考文献

- 1 R.Fletcher, J.C.Maan, and G.Weimann, Phys.Rev.B**32**,8477(1985).
- 2 R.J.Nicholas, J.Phys.C**18**,L695(1985).
- 3 R.Fletcher, J.C.Maan, K.Ploog, and G.Weimann, Phys.Rev.B**33**,7122(1986).
- 4 D.G.Cantrell and P.N.Butcher, J.Phys.C**19**,L429(1986).
- 5 D.G.Cantrell and P.N.Butcher, J.Phys.C**20**,1985(1987); **20**,1993(1987).
- 6 C.Ruf, H.Obloh, B.Junge, E.Gmelin, K.Ploog, and G.Weimann, Phys.Rev.B**37**,6377(1988).
- 7 R.Fletcher, M.D'Iorio, A.S.Sachrajda, R.Stoner, C.T.Foxon, and J.J.Harris, Phys.Rev.B**37**,3137(1988).
- 8 R.Fletcher, M.D'Iorio, W.T.Moore, and R.Stoner, J.Phys.C**21**,2681(1988).
- 9 S.K.Lyo, Phys.Rev.B**38**,6345(1988).
- 10 P.K.Basu, C.K.Sarkar, and S.Kundu, Surf.Sci.**196**,700(1988).
- 11 F.F.Fang and W.E.Howard, Phys.Rev.Lett.**16**,797(1966).
- 12 D.D.Nolte, W.Walukiewicz, and E.E.Haller, Phys.Rev.Lett.**59**,501(1987); Phys.Rev.B**36**,9392(1987).
- 13 W.Walukiewicz, Phys.Rev.B**37**,8530(1988).
- 14 Y.Okuyama and N.Tokuda, Phys.Rev.B**42**,7078(1990).
- 15 S.M.Girvin and M.Jonson, J.Phys.C**15**,L1147(1982).
- 16 M.Jonson and S.M.Girvin, Phys.Rev.B**29**,1939(1984).
- 17 W.Zawadzki and R.Lassnig, Surf.Sci.**142**,225(1984).
- 18 H.Obloh, K.von Klitzing, and K.Ploog, Surf.Sci.**142**,236(1984).
- 19 S.K.Lyo, Phys.Rev.B**30**,3257(1984).
- 20 J.S.Davidson, E.D.Dahlberg, A.J.Valois, and G.Y.Robinson, Phys.Rev.B**33**,2941(1986);
*ibid.***33**,8238(1986).
- 21 S.S.Kubakaddi, P.N.Butcher, and B.G.Mulimani, Phys.Rev.B**40**, 1377(1989).
- 22 S.K.Lyo, Phys.Rev.B**40**,6458(1989).
- 23 W.Walukiewicz, H.E.Ruda, J.Lagowski, and H.C.Gatos, Phys.Rev.B**30**, 4571(1984).
- 24 P.J.Price, Ann.Phys.(N.Y.)**133**,217(1981).
- 25 F.Stern, Phys.Rev.Lett.**18**,546(1967).
- 26 Y.Okuyama and N.Tokuda, Phys.Rev.B**40**,9744(1989).
- 27 S.S.Kubakaddi, P.N.Butcher, and B.G.Mulimani, J.Phys.Condens.Matter **3**,5445(1991).

4章 メゾスコピック系の電子輸送

4.1 拡散領域及びバルスティック領域における諸現象

固体中の電気伝導の性質を特長づける長さスケールは Fermi 波長 λ_F 、弾性散乱長 l_e 、非弾性散乱長 L_ϕ 、それに試料の大きさ L などである。メゾスコピック系の定義は $L \leq L_\phi$ となるような大きさの系であり、すなわち原子のサイズのオーダーの系であるミクロスコピック系と電子を波束として扱いうるマクロスコピック系の中間の系である。近年の微細加工技術の進歩に伴い λ_F のオーダーの系の電子輸送が研究の対象となり始めてきたがそれは考えている系が半導体に移ってきたからである。微小な系の研究はまず金属細線を用いて始められたが、不純物が多く $l_e = 1 \sim 10\text{nm}$ であり、一方 $\lambda_F \sim 0.1\text{nm}$ であるため電子の運動は拡散的であった。この拡散的な運動を反映して普遍的コンダクタンスゆらぎ[1-3]、Aharonov-Bohm 効果[4,5]などの現象が起こる。半導体ヘテロ接合の場合、変調ドーピングによりイオン化不純物と電子を空間的に分離できるので高品質の試料では散乱をあまり受けず高移動度が達成される。このような試料を用いて微小な系を作れば、平均自由行程は試料サイズよりも大きくなり散乱のない電子輸送すなわちバルスティックな電子輸送が可能となる。特に、微細加工により一方向に対しては Fermi 波長のオーダーまで狭くした細線[6,7]またはポイントコンタクトの形の系が作られ、電子の直進性と系の次元性を反映した現象が数多く見いだされている。例えば十字状に加工した系でのホール効果の消失[8,9]や負の曲がり抵抗[10,11]、磁場をかけたときの電子フォーカシング[12,13]、あるいはポイントコンタクトにおけるコンダクタンスの量子化[14,15]などである。本章では次章との関連からポイントコンタクトにおけるコンダクタンスの量子化に焦点を当てて議論するのでその他の現象はいくつかを以下に簡単に述べるにとどめる。

- 普遍的コンダクタンスのゆらぎ[1-3]と Aharonov-Bohm 効果[4,5]

Aharonov-Bohm(AB) 効果[16]とは電場や磁場がなくても波動関数の位相はベクトルポテンシャルやスカラーポテンシャルにより影響を受けるのでポテンシャルの存在が物理量に反映される現象である。この効果を観測するには電子線の干渉を用いれば良い。以下、ベクトルポテンシャルの場合に限定する。今、細いソレノイドに磁束を通しその回りには磁場が漏れないようにする。但し、ベクトルポテンシャルは回りにも存在している。このとき電子線を2つに分割しソレノイドを囲んで再び1つに合流させると2つの電子線の位相のずれが異なるために合流点で干渉が起こる。合流点での電子線の強度はソレノイドを貫く磁束の関数として周期 hc/e で振動する。当初この AB 効果を円形リング構造の金属細線で観測しようという目的で実験が開始されたがコンダクタンスの測定の結果は磁場の関数として不規則な振動を示した。この振動は時間がたっても変わらず、試料ごとに決まったパターンをとる。このゆらぎは常に e^2/h 程度であることから普遍的コンダクタンス

ゆらぎと呼ばれる。電子は試料内部で多くの不純物により散乱されるが AB 効果と同じ原理で他の経路を通ってきた電子と干渉する。試料全体では複雑な干渉をしているが試料にかかる磁場を変化させると干渉の様子が変わり、コンダクタンスが不規則に振動していく。実験では AB 効果は普遍的コンダクタンスゆらぎと重なってしまい観測できなかつたのである。AB 効果を分離して観測するには円形リングにおいて穴の部分の面積を細線の面積より十分大きくすればよく、これはその後の実験で確かめられた。図 4-1 に実験で用いられた金属細線[4]を、図 4-2(a) (b) に磁気抵抗及びそのフーリエスペクトル[5]を示す。図 4-2(a) において不規則な振動が普遍的コンダクタンスゆらぎであり、拡大された図の中の規則的振動が AB 振動に対応する。

図 4-1

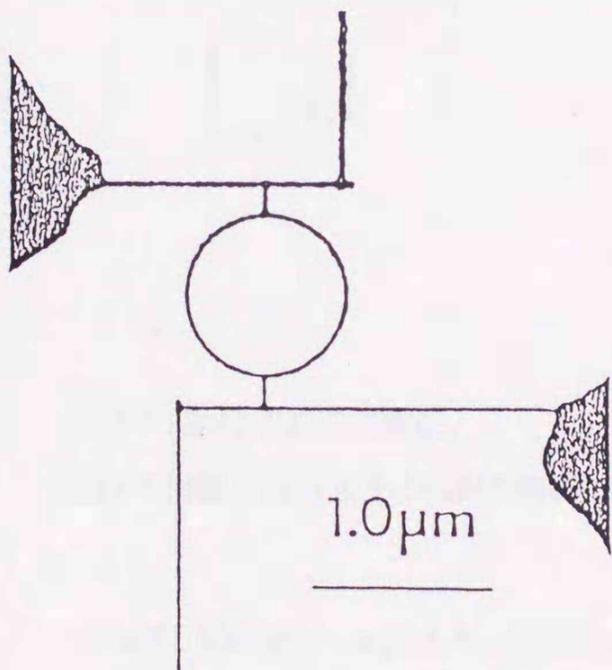


図 4-2

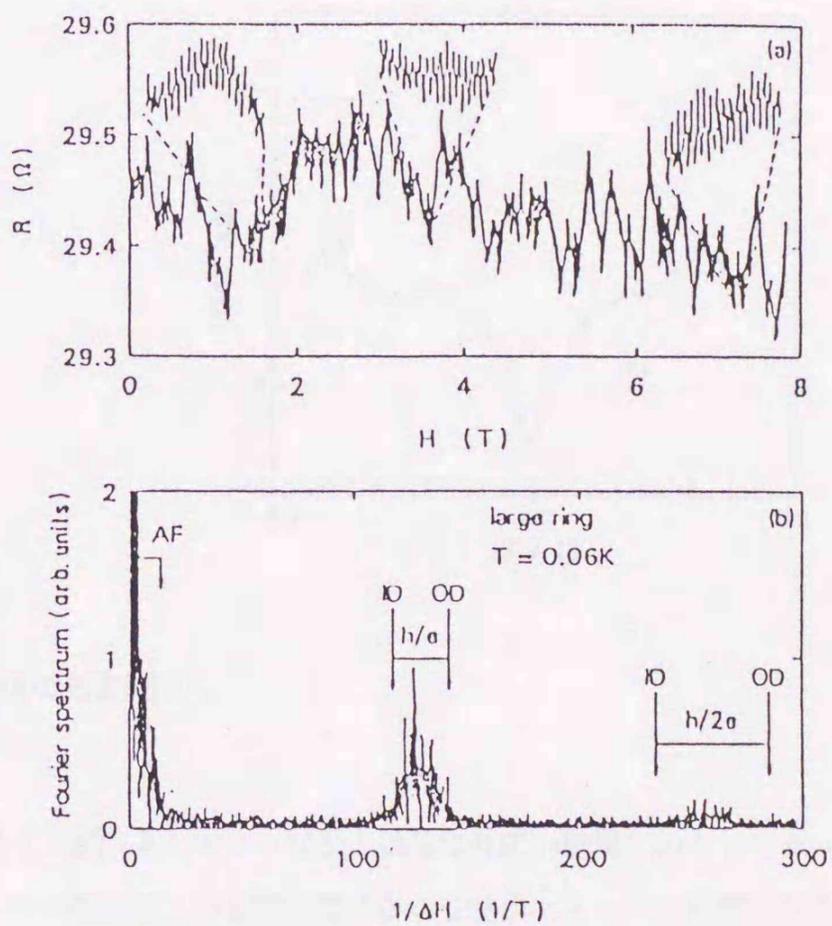


図 4-1 金で作られた金属細線[4]。内径は 7800\AA 、線幅は 410\AA 、厚さは 380\AA である。

図 4-2 (a) 磁気抵抗の測定例[5]。非周期的振動が普遍的コンダクタンスゆらぎであり、拡大図の中の周期的振動が AB 効果によるものである。(b) 磁気抵抗のフーリエスペクトル。ID、OD はそれぞれ細線の内径及び外径中に含まれる磁束に対応した周期を表す。

- 十字型細線における負の曲がり抵抗[10,11]とホール効果の消失[8,9]

試料は十字型細線からなるが曲がり抵抗 R_B の測定では電圧端子対と電流端子対は向かい合った配置をとり、電流経路は直角に折れ曲がっている (図 4-3)。系内では電子はバリスティックに運動するため直進性が高い。従って、電流端子から交差点へ入ってきた電子が交差点でもう 1 つの電流端子へ曲がりきれず向かい合った電圧端子へ行ってしまう。電圧端子に電流が流れないためにはこの電子の流れを打ち消すのに必要な電位差が生じなければならない。これは電位の測定とは逆向きの電位差であり、負の抵抗として観測される。実験の結果[10]を図 4-4 に示す。

図 4-3

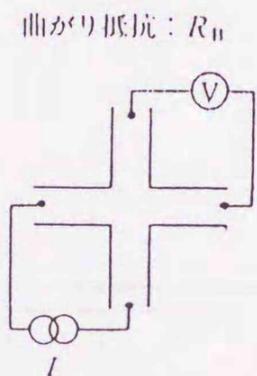


図 4-4

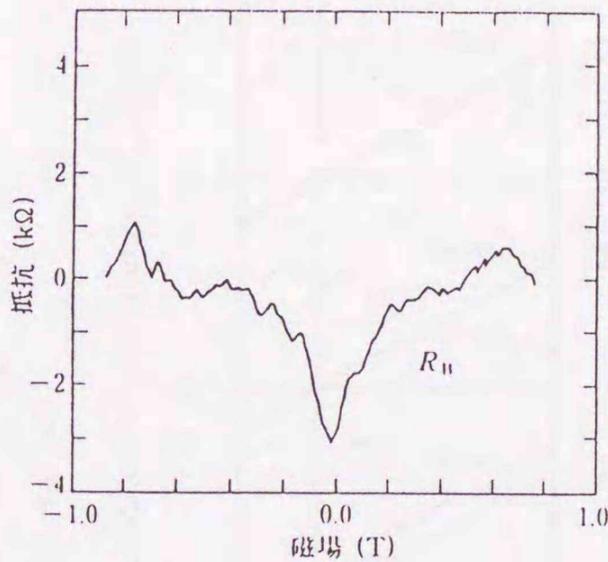


図 4-3 曲がり抵抗の測定法。

図 4-4 線幅 $0.1\mu\text{m}$ 以下の細線の曲がり抵抗の測定例[10]。

この同じ試料でホール抵抗 R_H を測定すると (図 4-5) マクロな系とは異なり広い磁場にわたってホール抵抗が生じない。この様子を図 4-6 に示す。ホール抵抗は 1 つの電流端子から交差点に入ってきた電子が左右の電圧端子へ入る確率に依存する。消失の原因は左右の電圧端子への透過確率が等しくなっているためである。このことは交差点の実際の幾何学的形状は加工精度やポテンシャルのスクリーニングのために角が丸みを帯びているので、交差点での電子は前方方向にコリメートされ[17,18]電圧端子に入りにくいことによっている。以上 2 つの現象は電子がバリスティックに運動することを反映したものである。

ホール抵抗: R_H

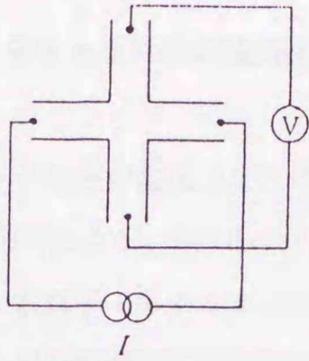


図 4-5 ホール抵抗の測定法。

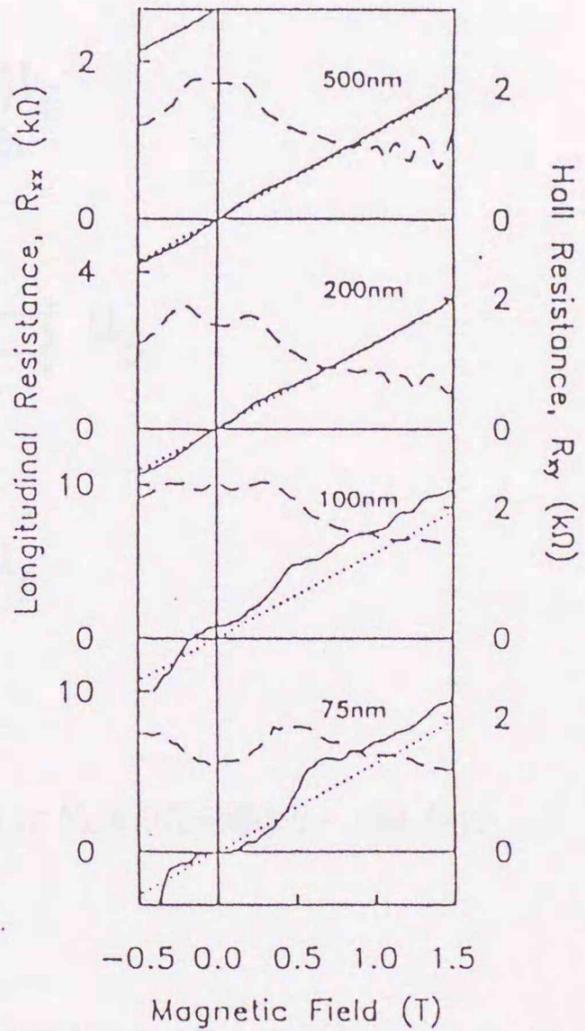
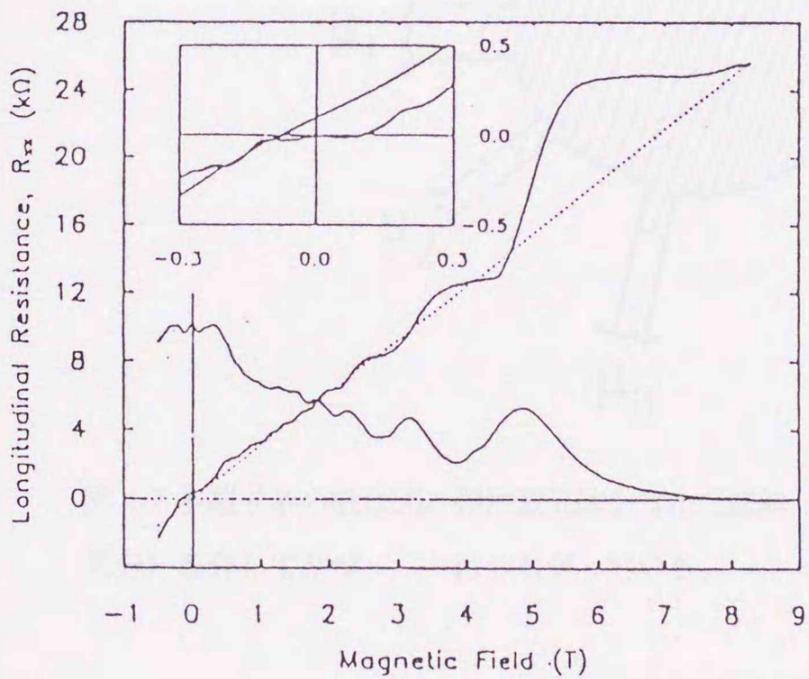


図 4-6 左図は線幅 $0.1\mu\text{m}$ の細線のホール抵抗[8]。右図は弱磁場での結果を拡大したものである。磁場が弱く線幅が細い場合にホール抵抗がゼロになる。

4.2 多端子・多チャネル系の輸送係数に対する Landauer-Büttiker 公式

メゾスコピックな系の抵抗（またはコンダクタンス）を試料に対する電子の透過係数を用いて表すという発想は Landauer[19]による。Landauer が提案した公式は完全な一次元系に対するもので、その後、2端子多チャネルの場合、多端子・多チャネルの場合に拡張された。以下の議論は Büttiker[20]が4端子系におけるコンダクタンスゆらぎの磁場反転非対称性を説明するために導いた多端子系に対する公式を磁場がない場合に単純化したものである。まず $T = 0\text{K}$ とする。不純物を含んだ乱れた系に散乱体を全く含まない一次元完全導体のリード線を介して N_L 個のリザーバーを取り付ける（図47）。

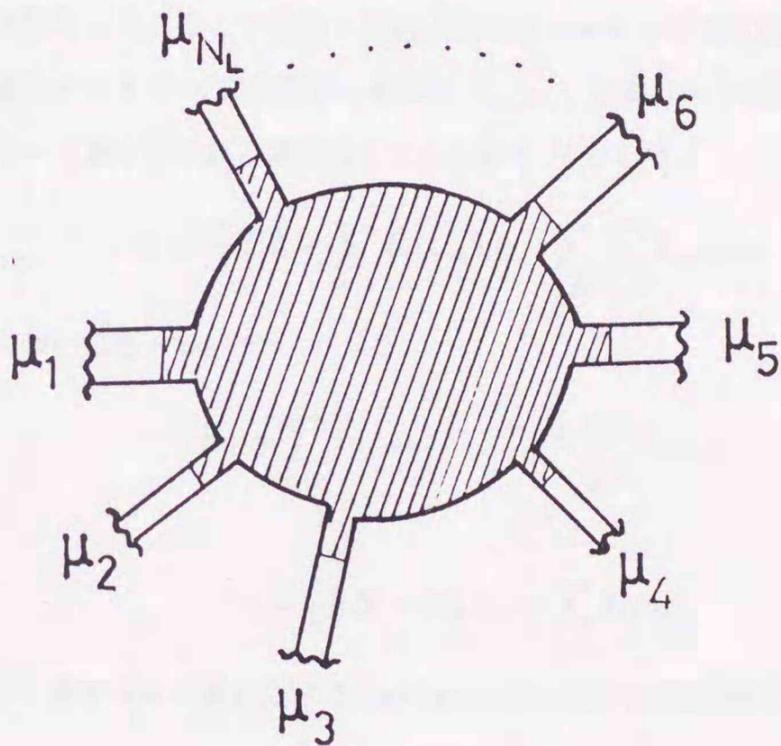


図4-7 多端子系の概念図。弾性散乱体を含んだ試料（斜線部分）は N_L 本の完全導体リード線（白い部分）を介してリザーバーにつながっている。

リザーバー中では非弾性散乱が頻繁に起こり熱平衡状態にあると仮定する。各リザーバーはそれぞれ異なる化学ポテンシャルをもっており、それを $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{N_L}$ とする。リード線からリザーバーに入ってくる電子は100%リザーバーに吸収されるとする。リザーバーからリード線中を出て行く向きを正にとる。いま $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{N_L}$ のうち最低の化学ポテンシャルを μ_0 とすると μ_0 以下ではリード線中の正及び負の速度をもった状態はすべて占有されており、電流には寄与しない。従って μ_0 以上のエネルギーをもった電子のみを議論する。 $\Delta\mu_i = \mu_i - \mu_0$ と定義するとリザーバー i からリード線 i へ流れ出る電流は $ev_i(dn_i/dE)\Delta\mu_i$ で与えられる。こ

ここで v_i はリード線 i における Fermi 準位での速度、 $dn_i/dE = 1/hv_i$ は Fermi 準位での状態密度である。従ってリザーバー i からリード線 i へ注入される電流は $(e/h)\Delta\mu_i$ となる。試料で散乱されてリザーバー i に戻る確率を R_{ii} とすると、リザーバー i から流れ出る正味の電流は $(e/h)(1 - R_{ii})\Delta\mu_i$ となる。一方、他のリザーバーからリード線 i へ入ってくる電流は $-(e/h)\sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j$ である。ここで T_{ij} はリザーバー j から系を通りリザーバー i へ透過する確率である。結局、リード線 i を流れる電流は

$$J_i = \frac{e}{h} [(1 - R_{ii})\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j] \quad (4.1)$$

となる。さらにリード線が有限の幅の場合にはリード線中の状態は横方向の量子化により量子数で指定されるチャンネルと呼ばれる状態をとる。そこで透過・反射係数を各チャンネル間で定義する。リード線 i のチャンネル n から出て同じリード線のチャンネル m に反射する確率を $R_{ii,mn}$ 、他のリード線 j のチャンネル m に透過する確率を $T_{ji,mn}$ とすると、リード線 i を流れる電流はチャンネル数を N_i として

$$J_i = \frac{e}{h} [(N_i - \sum_{m,n} R_{ii,mn})\mu_i - \sum_{j \neq i} \sum_{m,n} T_{ij,mn}\mu_j] \quad (4.2)$$

となるが、チャンネルについてのトレース

$$R_{ii} = \sum_{m,n} R_{ii,mn}, \quad T_{ij} = \sum_{m,n} T_{ij,mn} \quad (4.3)$$

を導入すると

$$J_i = \frac{e}{h} [(N_i - R_{ii})\mu_i - \sum_{j \neq i} T_{ij}\mu_j] \quad (4.4)$$

となる。これが多端子・多チャンネル系に対する Landauer-Büttiker 公式と呼ばれるものである。

この公式を各リザーバーの温度が異なり熱的輸送も含んだ場合[21,22]に拡張する。 i 番目のリザーバーの化学ポテンシャルを μ_i 、温度を T_i とする。リード線は一次元でありチャンネルは1つの場合をまず考える。リード線 i の入射波の占有確率 $f_i(\epsilon)$ は次の Fermi-Dirac 分布関数で与えられるとする。

$$f_i(\epsilon) = \{\exp[(\epsilon - \mu_i)/k_B T_i] + 1\}^{-1}. \quad (4.5)$$

このときリード線 i を試料方向へ流れる電流は波数 k の電子の速度、状態密度をそれぞれ $v_{i,k}$ 、 $N_{i,k}$ と書くと次式で与えられる。

$$\begin{aligned} J_i &= -|e| \int d\epsilon f_i(\epsilon) N_{i,k} v_{i,k} + |e| \sum_{j \neq i} \int d\epsilon f_j(\epsilon) N_{j,k} v_{j,k} T_{i,j}(\epsilon) \\ &= -|e|^{-1} \sum_j \int d\epsilon f_j(\epsilon) \Gamma_{ij}(\epsilon). \end{aligned} \quad (4.6)$$

ここで次の量を定義した。

$$\Gamma_{ij}(\epsilon) = (2e^2/h)(\delta_{ij} - T_{ij}(\epsilon)). \quad (4.7)$$

同様にしてリード線 i 中の熱流は次式で与えられる。

$$J_{Qi} = e^{-2} \sum_j \int d\epsilon f_j(\epsilon) \Gamma_{ij}(\epsilon) (\epsilon - \mu_i). \quad (4.8)$$

(4.6)(4.8) を線形化するために次のようにおく。

$$\mu_i = \mu - |e| V_i, \quad (4.9)$$

$$T_i = T - \theta_i. \quad (4.10)$$

μ 、 T は系全体の平衡状態での化学ポテンシャルと温度である。従って分布関数は次のように展開される。

$$f_i(\epsilon) \simeq f_0(\epsilon) + f'_0(\epsilon) \{ |e| V_i + (\epsilon - \mu) \theta_i / T \}. \quad (4.11)$$

(4.11) を用いると (4.6)(4.8) は次のようになる。

$$J_i = \sum_j (M_{ij}^{11} V_j + M_{ij}^{12} \theta_j), \quad (4.12)$$

$$J_{Qi} = \sum_j (M_{ij}^{21} V_j + M_{ij}^{22} \theta_j). \quad (4.13)$$

ここで各係数は次の式で与えられる。

$$M_{ij}^{11} = - \int d\epsilon f'_0(\epsilon) \Gamma_{ij}(\epsilon) \simeq \Gamma_{ij}(\mu), \quad (4.14)$$

$$M_{ij}^{12} = - \frac{1}{|e| T} \int d\epsilon f'_0(\epsilon) \Gamma_{ij}(\epsilon) (\epsilon - \mu) \simeq L_0 |e| T \Gamma'_{ij}(\mu), \quad (4.15)$$

$$M_{ij}^{21} = - T M_{ij}^{12} \simeq - L_0 |e| T^2 \Gamma'_{ij}(\mu), \quad (4.16)$$

$$M_{ij}^{22} = \frac{1}{e^2 T} \int d\epsilon f'_0(\epsilon) \Gamma_{ij}(\epsilon) (\epsilon - \mu)^2 \simeq - L_0 T \Gamma_{ij}(\mu). \quad (4.17)$$

但し、 $L_0 = (\pi k_B / e)^2 / 3$ は Lorenz 数である。リード線が複数のチャンネルをもつ場合の表式は $\Gamma_{ij}(\epsilon)$ を各リード線におけるチャンネルについて和をとってしまっただけと読み直すことにより得られる。

4.3 線形応答理論による多端子・多チャンネル系の輸送係数に対する Landauer-Büttiker 公式の導出

Landauer 公式を線形応答理論[23,24]を用いて導出する試みは 80 年代の初めから行われている。Economou と Soukoulis[25] は 1 次元系に対する公式

$$G = \frac{e^2}{h} T \quad (4.18)$$

を導出した。その後 Fisher と Lee[26]がこれを N チャンネルの場合に一般化した次の式を得た。

$$G = \frac{e^2}{h} \text{Tr}(tt^\dagger). \quad (4.19)$$

ここで t は入射波と出射波を関係づける $N \times N$ の透過行列である。一方、Thouless[27]及び Langreth と Abrahams[28]は彼らがセルフコンシステント条件と呼ぶ条件を考慮して次の式を導いた。

$$G = \frac{e^2 T}{h R}. \quad (4.20)$$

この式は完全導体 ($R=0$) ならばコンダクタンスは無限大になるという直感とも一致している。そのため、有限のコンダクタンスを与える (4.18)(4.19) は疑問視された時期もあったが現在では (4.20) は 4 端子系で測られるコンダクタンスに対応しており、2 端子系での測定には (4.18)(4.19) が適当であるという見解に達している。また完全導体に対して (4.18)(4.19) から得られる有限のコンダクタンスは 2 端子測定では必ず含まれるリード線とリザーバーの間の接触抵抗に起因しているという Imry[29]や Landauer[30]の説明により公式をめぐる混乱は解決した。多端子系に対する公式の導出は Stone と Szafer[31]により行われ、Landauer-Büttiker 公式が得られた。その後、磁場がかかっている場合への拡張が Baranger と Stone[32] 及び Shepard[33]、Prêtre[34]によって行われており、いずれも Landauer-Büttiker 公式を導いている。以上、線形応答理論の立場からも任意の数の端子をもった系に対しては Landauer-Büttiker 公式が正しいことを示している。この節ではより一般的な状況を考え、前節で与えた多端子・多チャンネル系での電流及び熱流を記述する一般的な Landauer-Büttiker 公式を導出する。

- 系の構造と各端子における座標の定義

系は弾性散乱体を含んだ乱れた領域 (斜線部分) と N_L 本の無限に長い完全導体リード線からなる (図 4-8)。外場がない状態では個々の電子に対するハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{p^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) \quad (4.21)$$

で与えられる。 $V(\mathbf{r})$ は不純物による散乱ポテンシャルであり、乱れた領域の外ではゼロになる。またその固有関数は無限遠を除きすべての境界でゼロとなる。各リード線においては hard-wall の境界条件のために電子の横方向の運動量は量子化される。従って、あるエネルギーに対しては各リード線の線幅に応じて有限個の伝搬モードが存在するがそれをチャンネルと呼ぶ。横方向の量子準位が与えられたエネルギーよりも大きいモードは evanescent 波であり乱れた領域から外側へリード線に沿って指数関数的に減衰する。Fermi エネルギーに対する減衰モードの振幅がゼロになるようなリード線中の領域を漸近領域と呼ぶ。図 4-9 で C_n はリード線 n において電位、温度が一定であるような漸近領域中の境界線である。座標系は図のようにとる。 $\{C_n\}$ で囲まれた領域を A と名付ける。

図 4-8

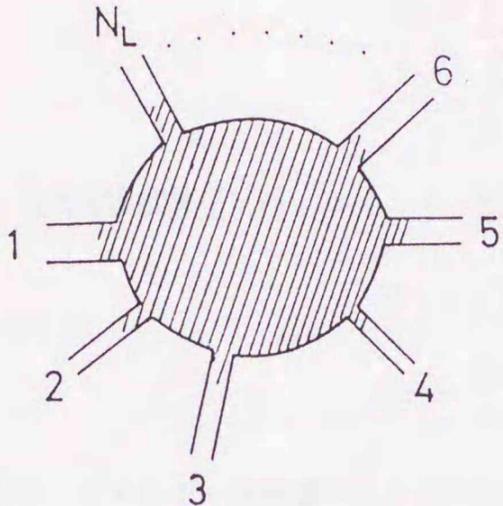


図 4-9

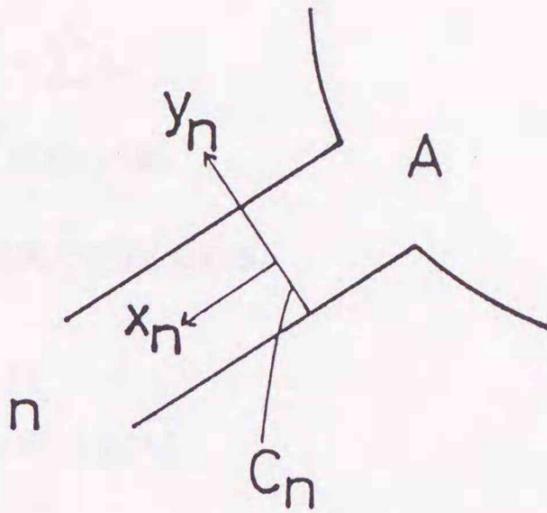


図 4-8 N_L 本の無限に長い完全導体リード線が取り付けられた弾性散乱体のみを含む試料 (斜線部分)。

図 4-9 リード線 n 中の漸近領域において電位、温度が一定となる境界線 C_n と座標系。すべての $\{C_n\}$ で囲まれた領域を A と名付ける。

以下、3ステップに分けて Landauer-Büttiker 公式を導出する。まず多端子・多チャネル系での輸送係数に対する線形応答理論による表式を導き、次にその式をグリーン関数を用いて書き直す。最後に散乱理論を用いてグリーン関数を系の透過・反射確率に関連づける。導出の枠組みは Stone と Szafer[31]に基づく。

● 線形応答理論による輸送係数の導出

以下では静的な輸送係数を求める。電場に対する電子系の応答を記述する場合は外力が力学変数であるからハミルトニアンの変動項として直接取り込まれる。一方、温度勾配に由来する熱的な内力は分布関数または密度行列が平衡値からずれることにより生ずるので、直接変動項の形に書くことができない。Luttinger[35]は重力場がエネルギー流を引き起こすことを用いて熱的輸送係数の力学的導出を行った。以下の導出もその方法に従う。

点 \mathbf{r} における静電ポテンシャルを $\phi(\mathbf{r})(= -\mathbf{E} \cdot \mathbf{r})$ 、重力ポテンシャルを $c^2\psi(\mathbf{r})$ とおく。エネルギー密度を $h(\mathbf{r})$ とすれば質量密度は $h(\mathbf{r})/c^2$ で与えられる。全ハミルトニアンは

$$H = H_0 + Fe^{st} \tag{4.22}$$

で与えられる。摂動を $t = -\infty$ からゆっくりと印加することを示すため因子 e^{st} を導入した (s は正の無限小量)。ここで

$$H_0 = \sum_i \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right] = \sum_i h_i, \quad (4.23)$$

$$F = \int \rho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4.24)$$

であり、電荷密度演算子 $\rho(\mathbf{r})$ 、エネルギー密度演算子 $h(\mathbf{r})$ は次式で与えられる。

$$\rho(\mathbf{r}) = e \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (4.25)$$

$$h(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_i [h_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) h_i]. \quad (4.26)$$

電流演算子、エネルギー流演算子はそれぞれ次式で与えられる。

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{e}{2m} \sum_i [\mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i], \quad (4.27)$$

$$\mathbf{j}_E(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[h(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r})}{e} + \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r})}{e} h(\mathbf{r}) \right]. \quad (4.28)$$

但し、これらはそれぞれ独立に求められた式であり、電場と温度勾配が存在するときの全電流、全エネルギー流ではない。全電流演算子 $\mathbf{j}^E(\mathbf{r})$ 、全エネルギー流演算子 $\mathbf{j}_E^T(\mathbf{r})$ は次の連続の式から求められる。

$$i\hbar[H, \rho(\mathbf{r})] = -\nabla \cdot \mathbf{j}^T(\mathbf{r}), \quad (4.29)$$

$$i\hbar[H, h_T(\mathbf{r})] = -\nabla \cdot \mathbf{j}_E^T(\mathbf{r}). \quad (4.30)$$

$h_T(\mathbf{r})$ は全エネルギー密度である ($H = \int h_T(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$)。解は、

$$\mathbf{j}^T(\mathbf{r}) = \mathbf{j}(\mathbf{r}) + e^{st} \psi(\mathbf{r}) \mathbf{j}(\mathbf{r}), \quad (4.31)$$

$$\mathbf{j}_E^T(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) + e^{st} [\phi(\mathbf{r}) \mathbf{j}(\mathbf{r}) + 2\psi(\mathbf{r}) \mathbf{j}_E(\mathbf{r})]. \quad (4.32)$$

密度行列に対する運動方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] \quad (4.33)$$

で与えられるが、外場に対する線形応答のみを議論するので密度行列を次のように書く。

$$\rho = \rho_0 + f e^{st}, \quad (4.34)$$

$$\rho_0 = \exp[\beta(\Omega - H_0)]. \quad (4.35)$$

これを運動方程式に代入し、一次の微小量まで残すと

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(fe^{st}) = [H_0, fe^{st}] + [Fe^{st}, \rho_0] \quad (4.36)$$

となる。この解は[36]

$$f = -\rho_0 \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\beta' \dot{F}(-t - i\hbar\beta'), \quad (4.37)$$

$$\dot{F} = - \int d\mathbf{r} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}) \quad (4.38)$$

となる。電子流の期待値は次のようになる。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}^T(\mathbf{r}) \rangle &= \text{Tr}[f\mathbf{j}^T(\mathbf{r})] \\ &= \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr}[\rho_0 \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}, -t - i\hbar\beta') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r})] \\ &\quad - \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr}[\rho_0 \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}') \mathbf{j}(\mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (4.39)$$

エネルギー流の期待値は次のようになる。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}_E^T(\mathbf{r}) \rangle &= \text{Tr}[f\mathbf{j}_E^T(\mathbf{r})] \\ &= \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr}[\rho_0 \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}, -t - i\hbar\beta') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') \mathbf{j}_E(\mathbf{r})] \\ &\quad - \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \text{Tr}[\rho_0 \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}') \mathbf{j}_E(\mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

リード線 m から出ていく電流は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} J_m &= \int_{c_m} dy_m \langle \mathbf{j}^T(\mathbf{r}) \rangle \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \\ &= \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \left\langle \int_A d\mathbf{r}' \int_{c_m} dy_m (\mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta')) (\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m) \right\rangle_0 \\ &\quad - \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \left\langle \int_A d\mathbf{r}' \int_{c_m} dy_m (\nabla \psi(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta')) (\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m) \right\rangle_0 \\ &= - \sum_{n=1}^{N_L} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \left\langle \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (\hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta')) (\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m) \right\rangle_0 V_n \\ &\quad - \sum_{n=1}^{N_L} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \left\langle \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (\hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta')) (\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m) \right\rangle_0 \psi_n. \end{aligned} \quad (4.41)$$

$\hat{\mathbf{x}}_m$ は x_m 方向の単位ベクトルであり、 V_n は c_n 上の電圧である。最後の等式は部分積分をし、 $\{c_n\}$ 以外の境界ではゼロになることを用いて導いた。また、 $\text{Tr}[\rho_0 \dots] = \langle \dots \rangle_0$ の表式を導入した。同様にしてリード線 m か

ら出ていくエネルギー流は次式で与えられる。

$$J_{Em} = - \sum_{n=1}^{N_L} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \left\langle \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (\hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta')) (\mathbf{j}_E(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m) \right\rangle_0 V_n \\ - \sum_{n=1}^{N_L} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \left\langle \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (\hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta')) (\mathbf{j}_E(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m) \right\rangle_0 \psi_n. \quad (4.42)$$

まとめて

$$J_m = \sum_{n=1}^{N_L} (L_{mn}^{11} V_n + L_{mn}^{12} \psi_n), \quad (4.43)$$

$$J_{Em} = \sum_{n=1}^{N_L} (L_{mn}^{21} V_n + L_{mn}^{22} \psi_n). \quad (4.44)$$

重力ポテンシャルから温度差に変換するには、 $\psi_n \rightarrow -T_n/T$ とすればよい。ここで T は平衡温度である。

$$J_m = \sum_{n=1}^{N_L} \left(L_{mn}^{11} V_n + \frac{L_{mn}^{12}}{T} T_n \right), \quad (4.45)$$

$$J_{Em} = \sum_{n=1}^{N_L} \left(L_{mn}^{21} V_n + \frac{L_{mn}^{22}}{T} T_n \right), \quad (4.46)$$

$$L_{mn}^{11} = - \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \left\langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \right\rangle_0, \quad (4.47)$$

$$L_{mn}^{12} = \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \left\langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \right\rangle_0, \quad (4.48)$$

$$L_{mn}^{21} = - \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \left\langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \right\rangle_0, \quad (4.49)$$

$$L_{mn}^{22} = \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \left\langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}_E(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \right\rangle_0. \quad (4.50)$$

ここでエネルギー流を熱流に変換する。熱流は

$$\mathbf{j}_Q(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_E(\mathbf{r}) - \mu \mathbf{j}(\mathbf{r})/e \quad (4.51)$$

で与えられる。従って、次のようになる。

$$J_m = \sum_{n=1}^{N_L} \left(M_{mn}^{11} V_n + \frac{M_{mn}^{12}}{T} T_n \right), \quad (4.52)$$

$$J_{Qm} = \sum_{n=1}^{N_L} \left(M_{mn}^{21} V_n + \frac{M_{mn}^{22}}{T} T_n \right), \quad (4.53)$$

$$M_{mn}^{11} = - \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \left\langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \right\rangle_0, \quad (4.54)$$

$$M_{mn}^{12} = \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}_Q(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \rangle >_0 \quad (4.55)$$

$$M_{mn}^{21} = -\lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}_Q(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \rangle >_0, \quad (4.56)$$

$$M_{mn}^{22} = \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \langle \hat{\mathbf{x}}'_n \cdot \mathbf{j}_Q(\mathbf{r}', -t - i\hbar\beta') \mathbf{j}_Q(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m \rangle >_0. \quad (4.57)$$

ここで $\mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}_m = j_m(\mathbf{r})$ などと書くと

$$\begin{aligned} M_{mn}^{11} &= -\lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \langle j_n(\mathbf{r}, -t - i\hbar\beta') j_m(\mathbf{r}) \rangle >_0 \\ &= -\pi\hbar \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \text{Tr}[\delta(E - H) j_n \delta(E - H) j_m] \\ &= -\pi\hbar \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sum_{\alpha, \beta} \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (j_n)_{\alpha\beta} (j_m)_{\beta\alpha} \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_\beta), \end{aligned} \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} M_{mn}^{12} &= \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-st} \int_0^\beta d\beta' \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \langle j_{Qn}(\mathbf{r}, -t - i\hbar\beta') j_m(\mathbf{r}) \rangle >_0 \\ &= \frac{\pi\hbar}{e} \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \sum_{\alpha, \beta} \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n \left[\frac{1}{2} \{ E_\alpha (j_n)_{\alpha\beta} + (j_n)_{\alpha\beta} E_\beta \} - \mu (j_n)_{\alpha\beta} \right] \\ &\quad \times (j_m)_{\beta\alpha} \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_\beta) \\ &= \frac{\pi\hbar}{e} \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (E - \mu) \sum_{\alpha, \beta} \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (j_n)_{\alpha\beta} (j_m)_{\beta\alpha} \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_\beta) \\ &= -M_{mn}^{21}, \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$M_{mn}^{22} = \frac{\pi\hbar}{e^2} \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (E - \mu)^2 \sum_{\alpha, \beta} \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (j_n)_{\alpha\beta} (j_m)_{\beta\alpha} \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_\beta). \quad (4.60)$$

ここで α, β は H_0 の固有状態を表し、固有値はそれぞれ E_α, E_β である。簡単化のために

$$\Gamma_{mn}(E) \equiv -\pi\hbar \sum_{\alpha, \beta} \int_{c_m} dy_m \int_{c_n} dy'_n (j_n)_{\alpha\beta} (j_m)_{\beta\alpha} \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_\beta) \quad (4.61)$$

とおくと

$$M_{mn}^{11} = \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \Gamma_{mn}(E), \quad (4.62)$$

$$M_{mn}^{12} = -M_{mn}^{21} = -\frac{1}{e} \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (E - \mu) \Gamma_{mn}(E), \quad (4.63)$$

$$M_{mn}^{22} = -\frac{1}{e^2} \int_{-\infty}^\infty dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (E - \mu)^2 \Gamma_{mn}(E) \quad (4.64)$$

となる。

- グリーン関数を用いた表式

グリーン関数は次式で定義される。

$$G^{(\pm)}(E) = \frac{1}{E - H \pm i\eta}. \quad (4.65)$$

H_0 の固有関数で表示すると

$$G^{(\pm)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}'_n : E) = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}_m) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}'_n) \frac{1}{E - E_{\alpha} \pm i\eta} \quad (4.66)$$

となるので次式が得られる。

$$\begin{aligned} \Delta G(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}'_n : E) &\equiv G^{(+)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}'_n : E) - G^{(-)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}'_n : E) \\ &= -2\pi i \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}_m) \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}'_n) \delta(E - E_{\alpha}). \end{aligned} \quad (4.67)$$

y 座標に関するフーリエ変換を次式で定義する。

$$G_{ba}^{(\pm)}(x_m, x'_n : E) = \int dy_m \int dy'_n \chi_b^{(m)}(y_m) \chi_a^{(n)*}(y'_n) G^{(\pm)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}'_n : E). \quad (4.68)$$

逆変換は

$$G^{(\pm)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}'_n : E) = \sum_{a,b} G_{ba}^{(\pm)}(x_m, x'_n : E) \chi_b^{(m)*}(y_m) \chi_a^{(n)}(y'_n) \quad (4.69)$$

で与えられる。ここで $\chi_a^{(n)}(y'_n)$ はリード線 n の漸近領域におけるチャネル a に対応した横方向の規格化された波動関数である。

電流演算子の行列要素

$$(j_n(\mathbf{r}'))_{\alpha\beta} = \frac{\hbar e}{2im} \left[\Psi_{\alpha}^*(x'_n, y'_n) \frac{\partial \Psi_{\beta}(x'_n, y'_n)}{\partial x'_n} - \frac{\partial \Psi_{\alpha}^*(x'_n, y'_n)}{\partial x'_n} \Psi_{\beta}(x'_n, y'_n) \right] \quad (4.70)$$

を用いると

$$\begin{aligned} \Gamma_{mn}(E) &= -\frac{\hbar^3 e^2}{16m^2 \pi} \sum_{a,b} \left[\frac{\partial}{\partial x_n} \Delta G_{ab}(x_m, x'_n : E) \frac{\partial}{\partial x'_n} \Delta G_{ba}(x'_n, x_m : E) \right. \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x'_n} \Delta G_{ab}(x_m, x'_n : E) \frac{\partial}{\partial x_m} \Delta G_{ba}(x'_n, x_m : E) \\ &\quad - \Delta G_{ab}(x_m, x'_n : E) \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x'_n} \Delta G_{ba}(x'_n, x_m : E) \\ &\quad \left. - \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x'_n} \Delta G_{ab}(x_m, x'_n : E) \Delta G_{ba}(x'_n, x_m : E) \right]. \end{aligned} \quad (4.71)$$

• 透過・反射係数への関連づけ

まず、グリーン関数と透過・反射係数の関係を求める。

リード線 n 、チャンネル a を通り入射してくる波を考え、不純物のある場合とない場合のハミルトニアン固有状態をそれぞれ $\Psi_{(n,a)}^{(+)}$ 、 $\Phi_{(n,a)}$ とする。2つの状態は次式で関連づけられる。

$$\Psi_{(n,a)}^{(+)}(\mathbf{r}) = \Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}) + \int_A d\mathbf{r}' G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') \Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}'). \quad (4.72)$$

漸近領域でのそれぞれの形は次のようになる。

$$\Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{\exp(-ik_a^{(n)} x_n)}{\sqrt{k_a^{(n)}}} \chi_a^{(n)}(y_n) + \sum_{a'} r_{nna',a}^B \frac{\exp(-ik_{a'}^{(n)} x_n)}{\sqrt{k_{a'}^{(n)}}} \chi_{a'}^{(n)}(y_n) & \mathbf{r} \text{ がリード線 } n \text{ 内のとき} \\ \sum_{a'} t_{ln,a'a}^B \frac{\exp(ik_{a'}^{(l)} x_l)}{\sqrt{k_{a'}^{(l)}}} \chi_{a'}^{(l)}(y_l) & \mathbf{r} \text{ がリード線 } l (\neq n) \text{ 内のとき} \end{cases} \quad (4.73)$$

$$\Psi_{(n,a)}^{(+)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{\exp(-ik_a^{(n)} x_n)}{\sqrt{k_a^{(n)}}} \chi_a^{(n)}(y_n) + \sum_{a'} r_{nna',a} \frac{\exp(-ik_{a'}^{(n)} x_n)}{\sqrt{k_{a'}^{(n)}}} \chi_{a'}^{(n)}(y_n) & \mathbf{r} \text{ がリード線 } n \text{ 内のとき} \\ \sum_{a'} t_{ln,a'a} \frac{\exp(ik_{a'}^{(l)} x_l)}{\sqrt{k_{a'}^{(l)}}} \chi_{a'}^{(l)}(y_l) & \mathbf{r} \text{ がリード線 } l (\neq n) \text{ 内のとき} \end{cases} \quad (4.74)$$

グリーン関数の満たす運動方程式は

$$G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) V(\mathbf{r}') = \left(E + \frac{\hbar^2 \nabla'^2}{2m} \right) G^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4.75)$$

である。 \mathbf{r} をリード線 m 内の A 領域内の点とすると

$$\begin{aligned} & \int_A d\mathbf{r}' G^{(+)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^{N_L} \int_{c_l} dy_l' \left\{ \frac{\partial}{\partial x_l'} G^{(+)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_l') \Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}_l') - G^{(+)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_l') \frac{\partial}{\partial x_l'} \Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}_l') \right\} - \Phi_{(n,a)}(\mathbf{r}_m). \end{aligned} \quad (4.76)$$

ここで

$$G_{a'}^{(+)}(\mathbf{r}_m, x_l'; E) = \int_{c_l} dy_l' \chi_{a'}^{(l)}(y_l') G^{(+)}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_l'; E) \quad (4.77)$$

と定義すると次のような結果が得られる。

$$\begin{aligned} \Psi_{(n,a)}^{(+)}(\mathbf{r}_m) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\exp(-ik_a^{(n)} x_n')}{\sqrt{k_a^{(n)}}} \left(\frac{\partial}{\partial x_n'} + ik_a^{(n)} \right) G_a^{(n)}(\mathbf{r}_m, x_n'; E) \right. \\ &+ \sum_{a'} r_{nna',a}^B \frac{\exp(ik_{a'}^{(n)} x_n')}{\sqrt{k_{a'}^{(n)}}} \left(\frac{\partial}{\partial x_n'} + ik_{a'}^{(n)} \right) G_{a'}^{(+)}(\mathbf{r}_m, x_n'; E) \\ &+ \left. \sum_{l(\neq n)} \sum_{a'} t_{lna,a'}^B \frac{\exp(ik_{a'}^{(l)} x_l')}{\sqrt{k_{a'}^{(l)}}} \left(\frac{\partial}{\partial x_l'} - ik_{a'}^{(l)} \right) G_{a'}^{(+)}(\mathbf{r}_m, x_l'; E) \right]. \end{aligned} \quad (4.78)$$

$G_a^{(+)}(\mathbf{r}, x')$ は \mathbf{r} を固定し、点 \mathbf{r} よりも乱れた領域から離れた漸近領域中の点 \mathbf{r}' に対する x' 依存性をみると、外向波のみを含む。

$$G_a^{(+)}(\mathbf{r}, x' : E) \sim \exp(ik_a x'). \quad (4.79)$$

また

$$G_a^{(+)}(\mathbf{r}, x' : E) = \sum_b G_{ba}^{(+)}(x, x' : E) \chi_b(y') \quad (4.80)$$

と書くと

$$\Psi_{(n,a)}^{(+)}(\mathbf{r}_m) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_b 2ik_a^{(n)} G_{ba}^{(+)}(x_m, x'_n : E) \frac{\exp(-ik_a^{(n)} x'_n)}{\sqrt{k_a^{(n)}}} \chi_b^{(n)}(y_m) \quad (4.81)$$

となる。これを $\Psi_{(n,a)}^{(+)}$ に対する漸近形と比較して次式を得る。

$$G_{ba}^{(+)}(x_n, x'_n : E) = \frac{-i}{\hbar v_a^{(n)}} \left[\delta_{ba} \exp(ik_a^{(n)}(x'_n - x_n)) + r_{nn,ba} \sqrt{\frac{k_a^{(n)}}{k_b^{(n)}}} \exp(ik_b^{(n)} x_n + ik_a^{(n)} x'_n) \right] \quad x_n \leq x'_n \text{ のとき} \quad (4.82)$$

$$G_{ba}^{(+)}(x_m, x'_n : E) = \frac{-i}{\hbar v_a^{(n)}} t_{mn,ba} \sqrt{\frac{k_a^{(n)}}{k_b^{(m)}}} \exp(ik_b^{(m)} x_m + ik_a^{(n)} x'_n) \quad m \neq n \text{ のとき} \quad (4.83)$$

一方、 $G_{ba}^{(-)}$ は次式から得られる。

$$G_{ba}^{(-)}(x, x', E) = [G_{ab}^{(+)}(x', x : E)]^*. \quad (4.84)$$

上式より、 $m \neq n$ のとき

$$\frac{\partial}{\partial x_m} G_{ba}^{(\pm)}(x_m, x'_n) = \pm ik_b^{(m)} G_{ba}^{(\pm)}(x_m, x'_n), \quad (4.85)$$

$$\frac{\partial}{\partial x'_n} G_{ba}^{(\pm)}(x_m, x'_n) = \pm ik_a^{(n)} G_{ba}^{(\pm)}(x_m, x'_n) \quad (4.86)$$

となる。従って次の結果を得る。

$$\begin{aligned} \Gamma_{mn}(E) &= \frac{\hbar^3 e^2}{4m^2 \pi} \sum_{a,b} k_a^{(m)} k_b^{(n)} [G_{ab}^{(+)}(x_m, x'_n : E) G_{ab}^{(+)*}(x_m, x'_n : E) + G_{ab}^{(-)}(x_m, x'_n : E) G_{ab}^{(-)*}(x_m, x'_n : E)] \\ &= \frac{e^2}{4\pi \hbar} \sum_{a,b} [|t_{nm,ba}(E)|^2 + |t_{mn,ab}(E)|^2] \\ &= \frac{e^2}{2\pi \hbar} \text{Tr}\{t_{mn}(E) t_{mn}^\dagger(E)\} \\ &= \frac{e^2}{h} T_{mn}(E), \end{aligned} \quad (4.87)$$

$$M_{mn}^{11} = \frac{e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) T_{mn}(E), \quad (4.88)$$

$$M_{mn}^{12} = -M_{mn}^{21} = -\frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (E - \mu) T_{mn}(E), \quad (4.89)$$

$$M_{mn}^{22} = -\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) (E - \mu)^2 T_{mn}(E). \quad (4.90)$$

同様にして次式を得る。

$$\begin{aligned} \Gamma_{nn}(E) &= \frac{e^2}{h} \text{Tr} \{ r_{nn}(E) r_{nn}^\dagger(E) - 1 \} \\ &= \frac{e^2}{h} (R_{nn}(E) - N_n), \end{aligned} \quad (4.91)$$

$$N_n = R_{nn}(E) + \sum_{m(\neq n)} T_{mn}(E). \quad (4.92)$$

4.4 コンダクタンスの量子化

1988年に van Wees らと Wharam らは独立にポイントコンタクトにおけるコンダクタンスの量子化を発見した。van Wees らが用いた試料の構造を図4-10に示す。試料は2章と3章で扱った系と同じだが、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 層の上にゲート電極を2つ取り付け、このゲート電極に二次元電子系に対して負の電圧をかけると、ゲート電極下とその近傍のポテンシャルが高くなり、電子が入り込めない電子空乏層が形成される(図4-11)。ゲート電極の下のポテンシャルの様子の計算例を図4-12に示しておく。(a)が計算に用いた系のモデルであり、(b)がポテンシャルとゲート電圧の関係を示している。くびれが形成されたばかりのくびれ幅の広い時のポテンシャルは井戸型ポテンシャルに近く、くびれ幅が狭くなるにつれパラボリックなポテンシャルに近くなることがわかる。二次元電子系は狭いくびれによってつながれた2つの広い領域に分けられる。van Wees らはこの2つの領域に電位差を与え、ゲート電圧を変えながらくびれを通る電流を測定して抵抗を求めた。その結果を図4-13に示す。また、この抵抗から電極の抵抗を引いてコンダクタンスに直したものが図4-14である。横軸はゲート電圧であり、電圧が小さいほどくびれ幅は狭い。従って、くびれ幅が広くなるにつれてコンダクタンスが $2e^2/h$ ずつ増えていることになる。この現象は以下で示すように準一次元性と電子のバリスティックな運動を反映した最も顕著な例である。

図 4-10

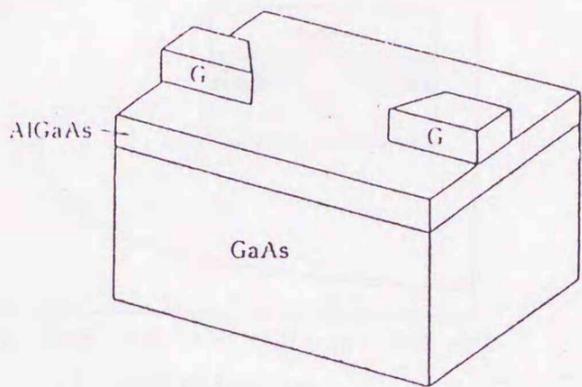


図 4-11

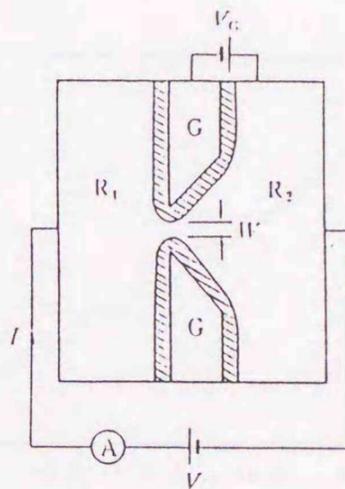
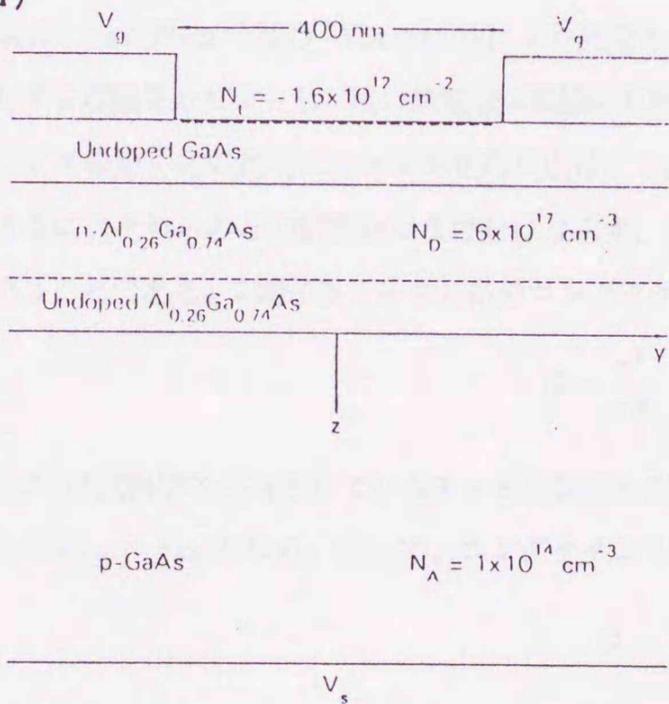


図 4-10 コンダクタンス量子化の測定に用いられた試料の構造[14]。

図 4-11 試料を上から見た図。ゲート電極下と斜線部分は電子空乏層になっている。

(a)



(b)

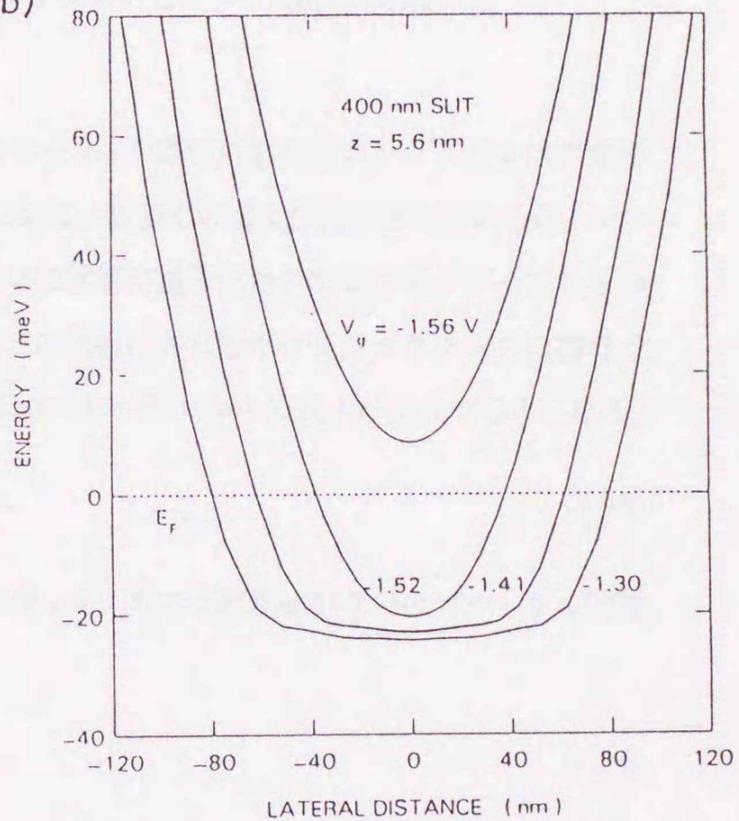


図 4-12 (a) ポテンシャルの計算に用いられたモデル[37]。(b) ポテンシャルとゲート電圧の関係[37]。

図 4-13

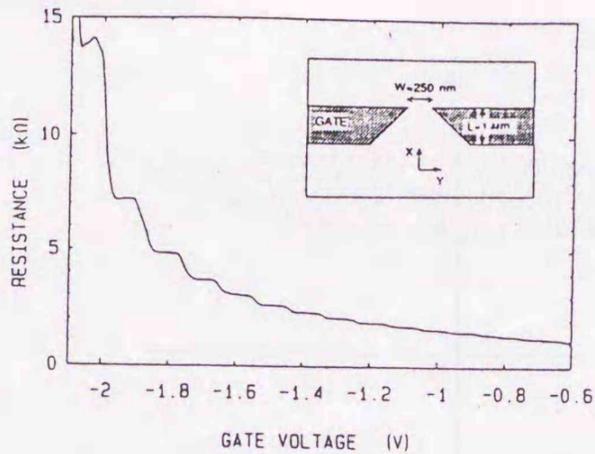


図 4-14

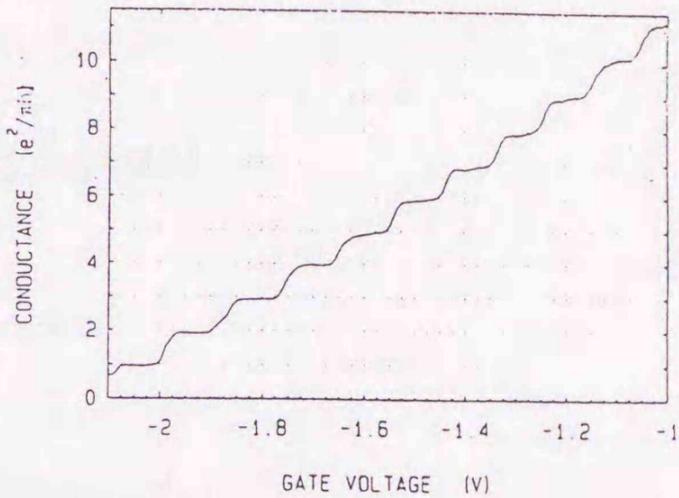


図 4-13 0.6K におけるポイントコンタクトの抵抗とゲート電圧の関係[14]。

図 4-14 電極抵抗を引いた後のポイントコンタクトのコンダクタンスとゲート電圧の関係[14]。

次に、van Wees ら及び Wharam らにより発見されたバリスティック領域におけるコンダクタンスの量子化に対する理論をレビューし、後の熱電能の議論の基礎を与えておく。数多くの論文が提出されているが、コンダクタンスの量子化の説明にとって本質的な点は、くびれにおいて状態が量子化されており電子がくびれを通り抜けるにはそれらのどの状態かになければならず、またすべての状態は同じ量だけコンダクタンスに寄与するという点である。2端子多チャネル系のコンダクタンスは Landauer-Büttiker 公式より次式で与えられる。

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n,m=1}^{N_c} T_{nm}. \quad (4.93)$$

ここで N_c は試料中で占有されているチャネル数である。バリスティック系では散乱体がないのでチャネル間遷移もなく $T_{nm} = \delta_{nm}$ となる。従って、コンダクタンスは

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} N_c \quad (4.94)$$

で与えられる。一方、現実の系ではくびれ幅は一定ではなく、またくびれは両端で広い二次元領域につながっている。従って、上の説明は単純すぎる。くびれ幅の変化を考慮した理論は大きく分けて、(1) 系全体を2つの広い二次元領域と狭いくびれ領域に分割し、各々の領域での波動関数を計算して各領域間の界面で波動関数及びその勾配を接続し、確率密度流の計算からコンダクタンスを求めるもの[38-48]、及び(2) くびれ幅の変化が十分ゆるやかであるとして断熱近似により系での輸送を一次元ポテンシャル問題に書き直し、半古典近似か

ら透過係数を求め Landauer 公式を援用するもの[49-54]、の2つがある。以下では次章との関連から(2)の理論について説明する。

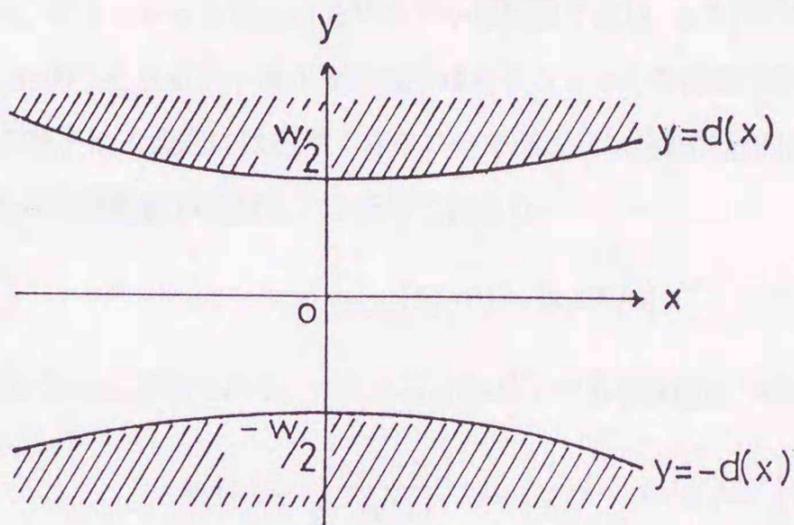


図 4-15 幅がゆるやかに変化するくびれに対する座標系。斜線部分は電子空乏層。

くびれの境界は電子空乏層により形成されるが、その形はゲート電極のシャープな形そのままではなく、幅はもっとゆるやかに変化していると考えられる。今、図 4-15 のように座標軸をとり、くびれの境界が x 軸に関して対称な $y = \pm d(x)$ で与えられるとする ($W/2 = d(0)$)。この系での Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) \Psi(x, y) = E_F \Psi(x, y) \quad (4.95)$$

であり、境界条件は

$$\Psi(x, y = \pm d(x)) = 0 \quad (4.96)$$

である。 $d(x)$ の変化がゆるやかであれば、 y 方向の固有関数は x の各点における幅 $2d(x)$ の井戸型ポテンシャル中の波動関数で近似できる (断熱近似)。すなわち

$$\Psi(x, y) = \psi(x) \phi_x(y) \quad (4.97)$$

とおくと

$$\phi_{x_n}(y) = \left[\frac{1}{d(x)} \right]^{1/2} \sin \left[\frac{n\pi(y + d(x))}{2d(x)} \right] \quad (4.98)$$

であり、 $d(x)$ の微分項を無視すると $\psi(x)$ に関する次の方程式を得る。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + E_n(x) \psi_n(x) = E_F \psi_n(x), \quad (4.99)$$

$$E_n(x) = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8md^2(x)}. \quad (4.100)$$

従って、問題は一次元系におけるポテンシャル中の電子の運動に帰着した。 $d(x)$ が x とともにゆるやかに変化する関数であるから、ポテンシャル $E_n(x)$ もゆるやかな関数であり、 x 方向の電子の運動は半古典的である。すなわち、 $n < n_{max}(k_F W)$ となるチャンネル n の電子はポテンシャルをほぼ完全に透過するが、 $n > n_{max}(k_F W)$ となるチャンネル n の電子は古典的には透過できないので透過率は指数関数的に小さい。ここで $n_{max}(k_F W)$ は $x = 0$ における x 方向の運動量が実数という条件で決まり

$$n_{max}(k_F W) = [k_F W / \pi] \quad (4.101)$$

で与えられる。 $[]$ は Gauss 記号である。 $n < n_{max}(k_F W)$ である状態は WKB 法により

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{p_n(-\infty)}{p_n(x)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^x p_n(x') dx'\right\}, \quad (4.102)$$

$$p_n(x) = \{2m[E_F - E_n(x)]\}^{1/2} \quad (4.103)$$

で与えられる。くびれの通過に際しては運動はバリスティックであるから、各チャンネルの透過率は

$$T_{nm}(k_F W) = \delta_{nm} \theta(n_{max}(k_F W) - n) \quad (4.104)$$

であり、2 端子多チャンネル系のコンダクタンスに対する Landauer 公式を用いると

$$\begin{aligned} G(k_F W) &= \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{m,n} T_{nm}(k_F W) \\ &= \frac{e^2}{\pi \hbar} n_{max}(k_F W) \end{aligned} \quad (4.105)$$

となるのでコンダクタンスの量子化が説明された。

次にこの値に対する補正を考察する。補正はポテンシャルバリアのトンネリングとバリア上での反射といった量子効果に起因する。 $E_n(x)$ において $1/d^2(x)$ を $x = 0$ 近傍で展開する。

$$\frac{1}{d(x)} = \frac{2}{W} \left(1 - \frac{x^2}{WR}\right). \quad (4.106)$$

ここで、 $R = 2/W''$ は $x = 0$ におけるくびれの曲率半径である。従って

$$E_n(x) \simeq \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2mW^2} \left(1 - \frac{2x^2}{WR}\right) \quad (4.107)$$

となる。バリアの頂上に近いエネルギーをもった電子を扱うので、 $k_F = -n\pi/2d$ は微小量であるから

$$p_n(x) \simeq \sqrt{\frac{2\pi^2 n^2 \hbar^2}{W^3 R}} x + \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{W^3 R}{2\pi^2 n^2}} \left(k_F^2 - \frac{n^2 \pi^2}{W^2}\right) \frac{1}{x} \quad (4.108)$$

と近似できる。波動関数の漸近形は

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \text{const } x^{-1/2} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int^x \left\{ \sqrt{\frac{2\pi^2 n^2 \hbar^2}{W^3 R}} x' + \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{W^3 R}{2\pi^2 n^2}} \left(k_F^2 - \frac{n^2 \pi^2}{W^2} \right) \frac{1}{x'} \right\} dx' \right] \\ &= \text{const } x^{\pm i\epsilon - 1/2} \exp \left(\pm i \frac{Ax^2}{2} \right)\end{aligned}\quad (4.109)$$

と書ける。ここで

$$\epsilon = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{W^3 R}{2\pi^2 n^2}} \left(k_F^2 - \frac{n^2 \pi^2}{W^2} \right), \quad (4.110)$$

$$A = \sqrt{\frac{2\pi^2 n^2 \hbar^2}{W^3 R}} \quad (4.111)$$

とおいた。\$x\$ 軸の負の方向から正の方向へ透過する波を考えると

$$\psi_n(x) = \begin{cases} t_n x^{i\epsilon - 1/2} \exp \left(i \frac{Ax^2}{2} \right) & x \rightarrow \infty \text{ のとき} \\ (-x)^{-i\epsilon - 1/2} \exp \left(-i \frac{Ax^2}{2} \right) + r_n (-x)^{i\epsilon - 1/2} \exp \left(i \frac{Ax^2}{2} \right) & x \rightarrow -\infty \text{ のとき} \end{cases} \quad (4.112)$$

とおける。接続条件より

$$r_n = t_n (e^{i\pi})^{i\epsilon - 1/2} = -i t_n e^{-\pi\epsilon}. \quad (4.113)$$

粒子数保存則より

$$|r_n|^2 + |t_n|^2 = 1. \quad (4.114)$$

(4.113)(4.114) より透過係数を求めると

$$T_n = |t_n|^2 = \frac{1}{1 + e^{-2\pi\epsilon}} \quad (4.115)$$

となるが

$$2\pi\epsilon \simeq \left(\frac{k_F W}{\pi} - n \right) \pi^2 \sqrt{\frac{2R}{W}} \quad (4.116)$$

であるので

$$T_n = \left[1 + \exp \left(-z \pi^2 \sqrt{\frac{2R}{W}} \right) \right]^{-1}, \quad z = \frac{k_F W}{\pi} - n \quad (4.117)$$

を得る。\$T_n\$ は \$z > 0\$ ならばバリア上の反射による補正を、\$z < 0\$ ならばバリアのトンネリングによる透過からの補正を含んでいる。従って、チャンネル \$n\$ からのコンダクタンスへの寄与は次式で与えられる。

$$G_n(z) = \frac{e^2}{\pi \hbar} \left[1 + \exp \left(-z \pi^2 \sqrt{\frac{2R}{W}} \right) \right]^{-1}. \quad (4.118)$$

すなわち、くびれ幅が十分ゆるやかに変化していればコンダクタンスは十分精度良く \$e^2/\pi\hbar\$ に量子化され、くびれの形状の効果はプラトーからプラトーへ移り変わる時の勾配にのみ現れることがわかる。

参考文献

- 1 C.P.Umbach, S.Washburn, R.B.Laibowitz, and R.A.Webb, *Phys.Rev.B***30**,4048(1984).
- 2 B.L.Al'tshuler, *JETP Lett.***41**,648(1985).
- 3 P.A.Lee and A.D.Stone, *Phys.Rev.Lett.***55**,1622(1985).
- 4 R.A.Webb, S.Washburn, C.P.Umbach, and R.B.Laibowitz, *Phys.Rev.Lett.***54**,2696(1985).
- 5 S.Washburn, C.P.Umbach, R.B.Laibowitz, and R.A.Webb, *Phys.Rev.B***32**,4789(1985).
- 6 A.B.Fowler, A.Hartstein, and R.A.Webb, *Phys.Rev.Lett.***48**,196(1982).
- 7 R.A.Webb, A.Hartstein, J.J.Wainer, and A.B.Fowler, *Phys.Rev.Lett.***54**,1577(1985).
- 8 M.L.Roukes, A.Scherer, S.J.Allen,Jr., H.G.Craighead, R.M.Ruthen, E.D.Beebe, and J.P.Harbison, *Phys.Rev.Lett.***59**,3011(1987).
- 9 C.J.B.Ford, T.J.Thornton, R.Newbury, M.Pepper, H.Ahmed, D.C.Peacock, D.A.Ritchie, J.E.F.Frost, and G.A.C.Jones, *Phys.Rev.B***38**,8518(1988).
- 10 Y.Takagaki, K.Gamo, S.Namba, S.Ishida, S.Takaoka, K.Murase, K.Ishibashi, and Y.Aoyagi, *Solid State Commun.***68**,1051(1988).
- 11 Y.Takagaki, K.Gamo, S.Namba, S.Takaoka, K.Murase, S.Ishida, K.Ishibashi, and Y.Aoyagi, *Solid State Commun.***69**,811(1989).
- 12 H.van Houten, B.J.van Wees, J.E.Mooij, C.W.J.Beenakker, J.G.Williamson, and C.T.Foxon, *Europhys.Lett.***5**,721(1988).
- 13 H.van Houten, C.W.J.Beenakker, J.G.Williamson, M.E.I.Broekaart, P.H.M.van Loosdrecht, B.J.van Wees, J.E.Mooij, C.T.Foxon, and J.J.Harris, *Phys.Rev.B***39**,8556(1989).
- 14 B.J.van Wees, H.van Houten, C.W.J.Beenakker, J.G.Williamson, L.P.Kouwenhoven, D.van der Marel, and C.T.Foxon, *Phys.Rev.Lett.***60**,848(1988).
- 15 D.A.Wharam, T.J.Thornton, R.Newbury, M.Pepper, H.Ahmed, J.E.F.Frost, D.G.Hasko, D.C.Peacock, D.A.Ritchie, and G.A.C.Jones, *J.Phys.C***21**,L209(1988).
- 16 Y.Aharonov and D.Bohm, *Phys.Rev.***115**,485(1959).
- 17 C.W.J.Beenakker and H.van Houten, *Phys.Rev.B***39**,10445(1989).
- 18 L.W.Molenkamp, A.A.M.Staring, C.W.J.Beenakker, R.Eppenga, C.E.Timmering, J.G.Williamson, C.J.P.M.Harmans, and C.T.Foxon, *Phys.Rev.B***41**,1274(1990).
- 19 R.Landauer, *IBM J.Res.Dev.***1**,223(1957); *Philos.Mag.***21**,863 (1970); *IBM J.Res.Dev.***32**,306(1988).
- 20 M.Büttiker, *Phys.Rev.Lett.***57**,1761(1986); *IBM J.Res.Dev.***32**,317(1988).

- 21 U.Sivan and Y.Imry, Phys.Rev.B**33**,551(1986).
- 22 P.N.Butcher, J.Phys.Condens.Matter**2**,4869(1990).
- 23 R.Kubo, J.Phys.Soc.Jpn.**12**,570(1957).
- 24 R.Kubo, M.Yokota, and S.Nakajima, J.Phys.Soc.Jpn.**12**,1203(1957).
- 25 E.N.Economou and C.M.Soukoulis, Phys.Rev.Lett.**46**,618(1981).
- 26 D.S.Fisher and P.A.Lee, Phys.Rev.B**23**,6851(1981).
- 27 D.J.Thouless, Phys.Rev.Lett.**47**,972(1981).
- 28 D.C.Langreth and E.Abrahams, Phys.Rev.B**24**,2978(1981).
- 29 Y.Imry, in *Directions in Condensed Matter Physics*, edited by G.Grinstein and G.Mazenko (World Scientific, Singapore, 1986), Vol.1,p101.
- 30 R.Landauer, J.Phys.Condens.Matter**1**,8099(1989).
- 31 A.D.Stone and A.Szafer, IBM J.Res.Dev.**32**,384(1988).
- 32 H.U.Baranger and A.D.Stone, Phys.Rev.B**40**,8169(1989).
- 33 K.Shepard, Phys.Rev.B**43**,11623(1991).
- 34 A.B.Prêtre, J.Phys.Condens.Matter**3**,8037(1991).
- 35 J.M.Luttinger, Phys.Rev.**135**,A1505(1964).
- 36 G.D.Mahan, *Many-Particle Physics*(Plenum, New York, 1981), Sec.3.7.
- 37 S.E.Laux, D.J.Frank, and F.Stern, Surf.Sci.**196**,101(1988).
- 38 R.Johnston and L.Schweitzer, J.Phys.C**21**,L861(1988).
- 39 I.B.Levinson, JETP Lett.**48**,301(1988).
- 40 G.Kirczenow, Solid State Commun.**68**,715(1988); J.Phys.Condens.Matter **1**,305(1989); Phys.Rev. B**39**,10452(1989).
- 41 A.Szafer and A.D.Stone, Phys.Rev.Lett.**62**,300(1989).
- 42 D.van der Marel and E.G.Kaanappel, Phys.Rev.B**39**,7811(1989).
- 43 S.He and S.Das Sarma, Phys.Rev.B**40**,3379(1989).
- 44 N.García and L.Escapa, Appl.Phys.Lett.**54**,1418(1989).
- 45 Y.Avishai and Y.B.Band, Phys.Rev.B**40**,12535(1989).
- 46 E.V.Sukhorukov and I.B.Levinson, Sov.Phys.JETP **70**,782(1990).
- 47 I.Kander, Y.Imry, and U.Sivan, Phys.Rev.B**41**,12941(1990).
- 48 E.Tekman and S.Ciraci, Phys.Rev.B**39**,8772(1989); *ibid.***42**,9098(1990); *ibid.***43**,7145(1991).

- 49 L.I.Glazman, G.B.Lesovik, D.E.Khmel'nitskii, and R.I.Shekhter, JETP Lett.**48**,238(1988).
- 50 L.I.Glazman and M.Jonson, J.Phys.Condens.Matter**1**,5547(1989); Phys.Rev.B**41**,10686(1990); *ibid.*
44,3810(1991).
- 51 M.C.Payne, J.Phys.Condens.Matter**1**,4939(1989).
- 52 A.Yacoby and Y.Imry, Phys.Rev.B**41**,5341(1990).
- 53 M.Büttiker, Phys.Rev.B**41**,7906(1990).
- 54 M.Yosefin and M.Kaveh, Phys.Rev.B**44**,3355(1991).

5章 バリステック輸送領域における熱電能

5.1 序論

3章で示したようにマクロスコピックなサイズの二次元電子系においては、フォノン・ドラッグによる寄与が電子拡散の寄与を上回る。一方、この二次元電子系にスプリット・ゲート電極を取り付け、負バイアスにして電子空乏層で細いくびれを形成[1,2]すると、このくびれを通る電子の運動はバリステックであり熱電能には電子拡散の寄与のみ存在する。このバリステック電子に対する熱電能を最初に論じたのは Streda[3]である。今、準一次元試料に同じ幅の完全導体リード線を介して、化学ポテンシャル差が $\Delta\mu$ 、温度差が ΔT の2つのリザーバーが取り付けられているとする。このとき試料を流れる電流は線形応答の枠内で[4]

$$J = -\frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f(E)}{\partial E} T(E) \left(\frac{E - \mu}{T} \Delta T + \Delta\mu \right) dE \quad (5.1)$$

となる。ここで μ 、 T はそれぞれ平衡状態における化学ポテンシャルと温度である。 $T(E)$ はエネルギー E をもつ電子に対する透過係数である。 $J = 0$ の条件のもとで熱電能 S は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\Delta\mu}{e\Delta T} \\ &= \frac{k_B}{e} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f(E)}{\partial E} T(E) \frac{E - \mu}{k_B T} dE \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f(E)}{\partial E} T(E) dE \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

ポイントコンタクトを通るバリステック電子の場合、透過係数 $T(E)$ はくびれが十分なめらかに変化し断熱近似が成立するならば

$$T(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n) \quad (5.3)$$

で近似できる。すると(5.2)は

$$S = \frac{k_B}{e} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{E_n}^{\infty} \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \frac{E - \mu}{k_B T} dE \left(\sum_{n=1}^{\infty} f(E_n) \right)^{-1} \quad (5.4)$$

となる。特に $\mu = E_n$ ($n = 1, 2, \dots$)のときはピーク値

$$S_n^{peak} = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\ln 2}{n - 1/2} = -\frac{59.73}{n - 1/2} \text{ (}\mu\text{V/K)} \quad (5.5)$$

を与えると予想される。すなわち、バリステック電子に対する熱電能はくびれ幅の関数として振動しそのピーク値は試料、温度によらない値に量子化されるというのが Streda の予想である。但し、 $k_B T$ がサブバンド間隔

より小さいような低温を仮定している。Stredaによる計算結果を図5-1に示す。くびれの閉じ込めポテンシャルとしてパラボラ型を用いてある。

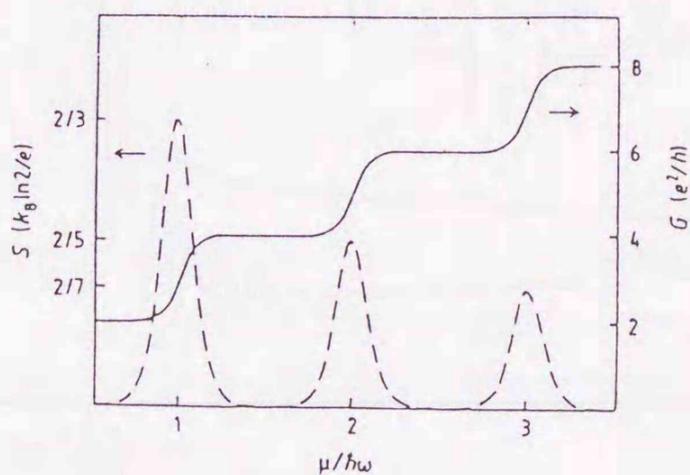


図5-1 ポイントコンタクトにおける熱電能（破線）とコンダクタンス（実線）[3]。横軸は化学ポテンシャルをサブバンドエネルギー間隔で割った量である。

ポイントコンタクトでの熱電能は Molenkamp ら[5]によって測定された。彼らを用いた試料の概略図、測定結果(a)及び計算値(b)を図5-2に示す。2つの二次元領域L、Rがそれぞれ異なったくびれ幅のポイントコンタクトを介して中央の二次元領域Cにつながっている。試料の特性は $N_s = 3.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 、 $\mu \approx 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ であり、C領域の幅と長さはそれぞれ $W = 4 \mu\text{m}$ 、 $L = 18 \mu\text{m}$ である。温度は 1.65K であり、このときの弾性散乱長 l_e 及び非弾性散乱長 L_ϕ はほぼ $l_e \approx L_\phi \approx 10 \mu\text{m}$ である。今、中央のC領域に電流を流すと非弾性散乱によりジュール熱が発生し電子温度が上昇する。従って、LとC、及びRとCの間には電子温度差が生じる。L、Rを電圧プローブとして V_1 と V_2 の差を測ると2つのポイントコンタクトの熱起電力の差を見ることができる。右のゲート電圧は -2.0V に固定しており、左のゲート電圧のみを変えている。従って右のポイントコンタクトのくびれ幅は一定だが、左のポイントコンタクトのくびれ幅は連続的に変化する。熱起電力のピークは抵抗（またはコンダクタンス）がプラトーからプラトーに移り変わるときに生じている。これは Streda の予想通りであるが振動の振幅は理論値よりやや小さい値を示している。この実験により Streda の予想はほぼ確かめられたが、Molenkamp らが実験データの解析に用いたモデルは各二次元領域の化学ポテンシャルのふるまいを見るには不十分である。以下、我々は特に化学ポテンシャルのふるまいに焦点を当て、熱起電力の計算を行うことにする[6]。

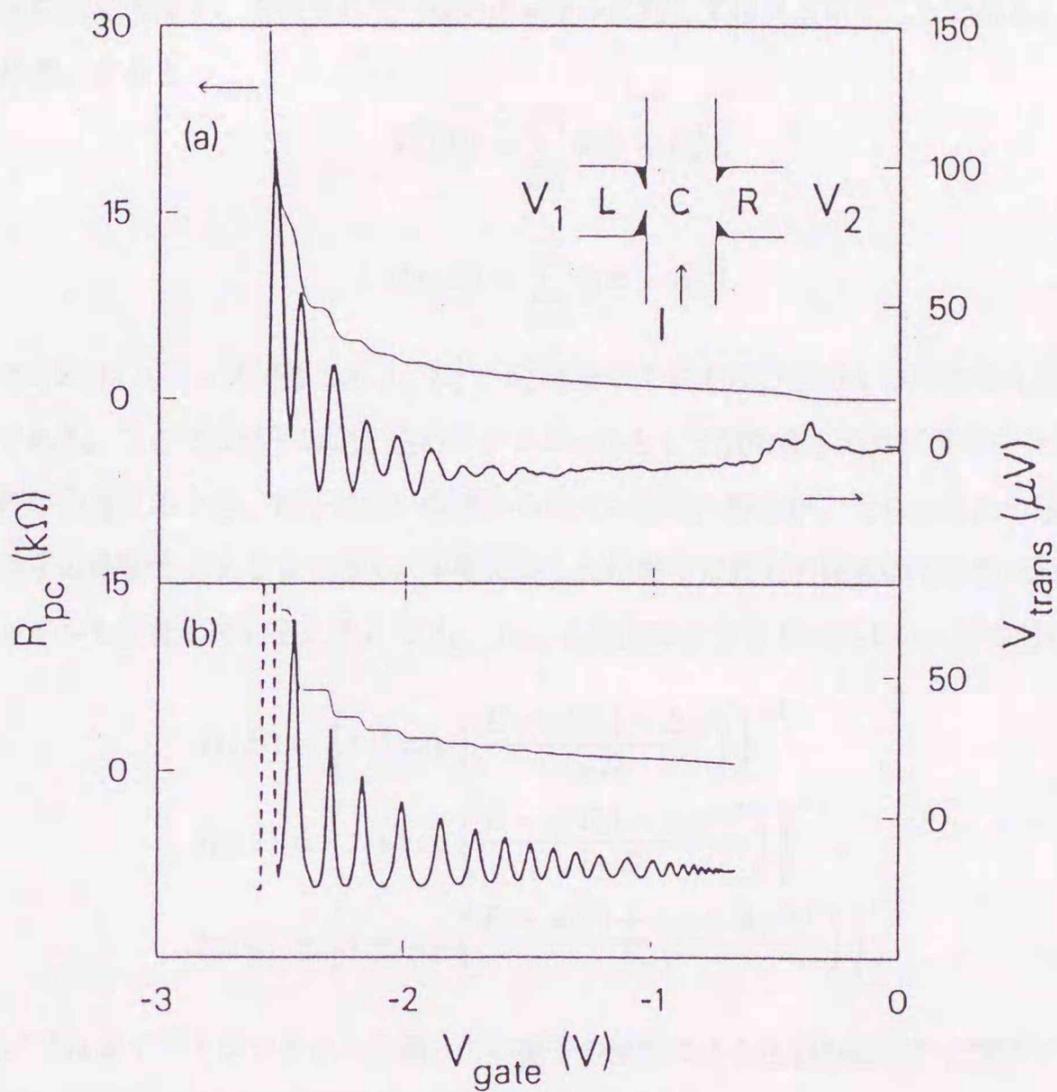


図5-2 (a)2つのポイントコンタクトを付けた細線の横電圧 V_{trans} と1つのポイントコンタクトの抵抗 R_{pc} の測定結果[5]。挿入図は試料の概略図。(b)Streda の理論に基づいて計算した横電圧と抵抗[5]。

5.2 ポイントコンタクトにおける熱電能の理論

L、R 及び C 領域における電子の分布関数をそれぞれ f_L 、 f_R 、 f_C と書く。熱電能の測定条件として、各ポイントコンタクトを流れる電流はゼロであるから

$$\int_0^{\infty} T_L(E)[f_L(E) - f_C(E)]dE = 0, \quad (5.6)$$

$$\int_0^{\infty} T_R(E)[f_R(E) - f_C(E)]dE = 0. \quad (5.7)$$

ここで $T_L(E)$ 、 $T_R(E)$ はそれぞれチャンネルについて和をとったエネルギー E の電子に対する左及び右のポイントコンタクトの透過係数である。4.4 節で議論したように透過係数に対する最も単純な取り扱いが占有され

ているチャンネルに対しては1、占有されていないチャンネルに対しては0とおくことである。以下、この取り扱いで議論を進める。すると

$$T_L(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n^L), \quad (5.8)$$

$$T_R(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \theta(E - E_n^R) \quad (5.9)$$

となる。ここで $\theta(E)$ はステップ関数であり、 E_n^L 、 E_n^R はそれぞれ左及び右のくびれでの n 番目のチャンネルの最低エネルギーである。ここでは電子の閉じ込めポテンシャルとして無限高さの井戸型ポテンシャルを仮定する。試料内に温度差が存在するとき、電子は熱い領域から冷たい領域へ移るが、それは冷たい領域に蓄積した電子の作る電場が電子の移動を抑えるまで続く。平衡に達した状態では両方の領域の電子数は異なっており、従って化学ポテンシャルも変化している。そこで f_L 、 f_R 、 f_C を次のような Fermi-Dirac 型の分布関数で近似する。

$$f_L(E) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - \mu(T_0) - \Delta\mu}{k_B T_0} \right) \right\}^{-1}, \quad (5.10)$$

$$f_R(E) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - \mu(T_0) - \Delta\mu^{ref}}{k_B T_0} \right) \right\}^{-1}, \quad (5.11)$$

$$f_C(E) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - \mu(T) + \Delta\mu + \Delta\mu^{ref}}{k_B T} \right) \right\}^{-1}. \quad (5.12)$$

ここで $\Delta\mu$ と $\Delta\mu^{ref}$ はポイントコンタクトを通過する電子の移動による左右の領域の化学ポテンシャルの変化量である。図5-3に各分布関数の様子を図示する。

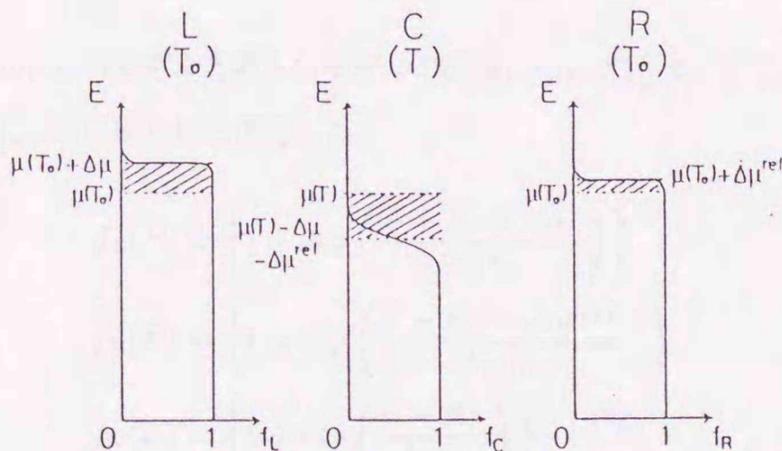


図5-3 L、C及びR領域における分布関数の様子。 $\Delta\mu$ と $\Delta\mu^{ref}$ はそれぞれL、R領域における化学ポテンシャルの変化量である。

有限温度での化学ポテンシャルは次式で与えられる。

$$\mu(T) = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{N_s \pi \hbar^2}{m^* k_B T} \right) - 1 \right]. \quad (5.13)$$

ここで N_s は二次元電子系の電子濃度である。中央領域における化学ポテンシャルの変化量を評価するために、系全体の電子数は一定であり3つの領域の面積はすべて等しいと仮定する。(3つの領域の化学ポテンシャルの変化量は面積比に依存するが、各化学ポテンシャルの差は変化しないので、横電圧や熱電能は変化しない。) 低温では化学ポテンシャルはほぼ電子濃度に比例するので、中央領域における化学ポテンシャルの変化量は $\Delta\mu$ と $\Delta\mu^{ref}$ の和で与えられると仮定した。さらに $\Delta\mu(T)(\Delta\mu^{ref}(T))$ と $\Delta\mu(T_0)(\Delta\mu^{ref}(T_0))$ の微小な差は無視した。横電圧は両ポイントコンタクトでの熱起電力の差で与えられる。

$$V_{trans} = V_2 - V_1 = \frac{\Delta\mu - \Delta\mu^{ref}}{|e|}. \quad (5.14)$$

V_{trans} は2つのポイントコンタクトの熱電能の差と次のような関係がある。

$$V_{trans} = (S_R - S_L)(T - T_0). \quad (5.15)$$

ここで S_L 、 S_R は次式で与えられる左右のポイントコンタクトの熱電能である。

$$S_L = - \frac{2\Delta\mu + \Delta\mu^{ref}}{|e|(T - T_0)}, \quad (5.16)$$

$$S_R = - \frac{\Delta\mu + 2\Delta\mu^{ref}}{|e|(T - T_0)}. \quad (5.17)$$

計算に進む前に Molenkamp らのモデルと我々のモデルの相違について述べておく。Molenkamp らは中央領域の化学ポテンシャルが常に E_F に等しいと仮定した。

$$f_L(E) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - E_F - \Delta\mu'}{k_B T_0} \right) \right\}^{-1}, \quad (5.18)$$

$$f_R(E) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - E_F - \Delta\mu'^{ref}}{k_B T_0} \right) \right\}^{-1}, \quad (5.19)$$

$$f_C(E) = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) \right\}^{-1}. \quad (5.20)$$

この場合、横電圧は次式で与えられる。

$$V'_{trans} = \frac{\Delta\mu' - \Delta\mu'^{ref}}{|e|} = (S'_R - S'_L)(T - T_0). \quad (5.21)$$

ここで S'_L 、 S'_R は左右のポイントコンタクトの熱電能である。

$$S'_L = -\frac{\Delta\mu'}{|e|(T-T_0)}, \quad (5.22)$$

$$S'_R = -\frac{\Delta\mu'^{ref}}{|e|(T-T_0)}. \quad (5.23)$$

これに対し、我々は電子数保存によりすべての領域の化学ポテンシャルが変化することを考慮に入れる。

5.3 結果と考察

我々は左のポイントコンタクトのくびれ幅 W_L の関数として横電圧 V_{trans} を計算した。計算においては $N_s = 3.64 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ ($E_F = 13 \text{meV}$)、 $W_R = 60 \text{nm}$ を用いた。 W_R は右のポイントコンタクトのくびれ幅である。この条件下では右のポイントコンタクトにおいては2番目のチャネルまで占有されている。温度は $T = 4.0 \text{K}$ 、 $T_0 = 1.65 \text{K}$ とした。図5-4は我々のモデルを用いて計算した3つの領域の化学ポテンシャルの変化量である。比較のため図5-5に Molenkamp らのモデルを用いて計算した左右の領域の化学ポテンシャルの変化量を示す。

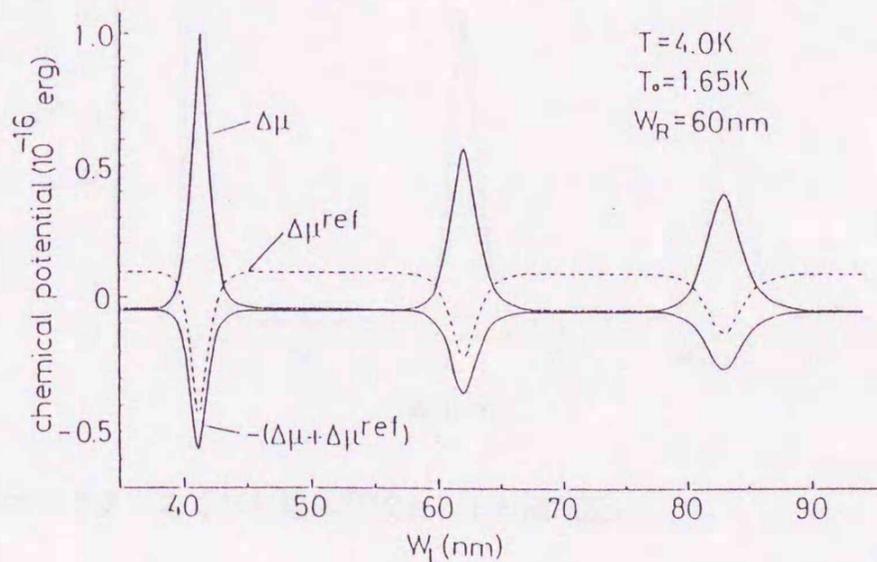


図5-4 左のポイントコンタクトのくびれ幅の関数としての化学ポテンシャルの変化量。 $\Delta\mu$ 、 $\Delta\mu^{ref}$ 、 $-(\Delta\mu + \Delta\mu^{ref})$ はそれぞれL、R、C領域における変化量である。

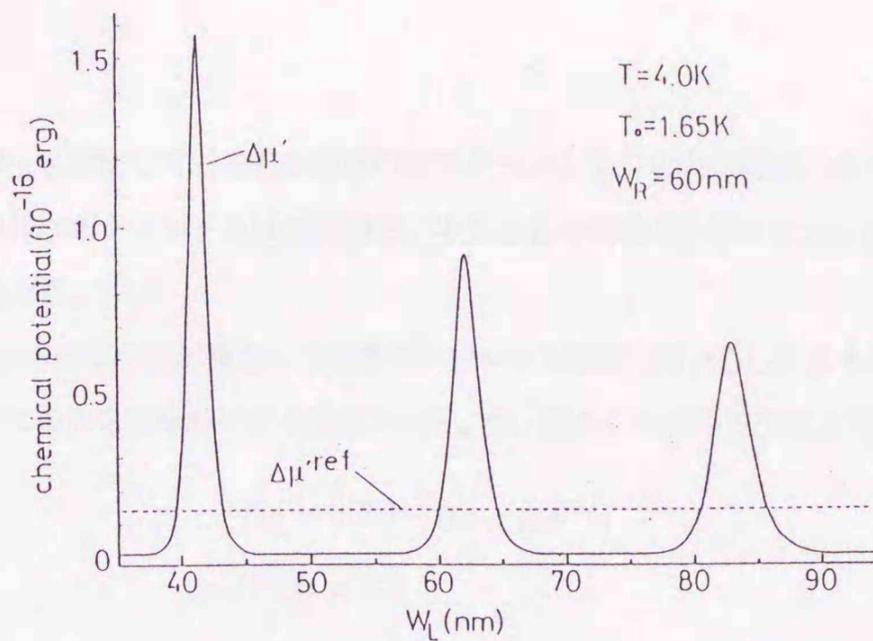


図 5-5 Molenkamp らのモデルを用いて計算した左のポイントコンタクトのくびれ幅の関数としての化学ポテンシャルの変化量。 $\Delta\mu'$ 、 $\Delta\mu^{ref}$ はそれぞれL、R領域における変化量である。

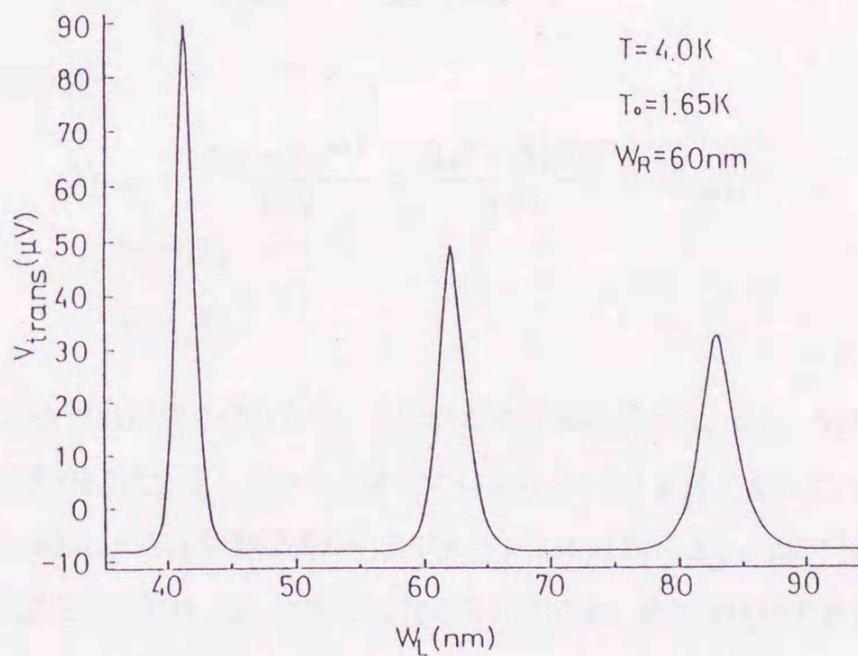


図 5-6 左のポイントコンタクトのくびれ幅の関数としての横電圧。

図 5-6 は我々のモデルを用いて計算した V_{trans} の W_L 依存性である。Molenkamp らのモデルで計算した V_{trans} もほとんど同じ値を示した。従って Molenkamp らの実験データとの一致は良い。図 5-4 において最初のピークは左のポイントコンタクトにおいて 2 番目のチャンネルが占有され始めるときに対応している。 V_{trans} の値に関しては両モデルともほぼ同じ結果を得ているが、我々の結果で特徴的なことは化学ポテンシャルの振動である。3つの領域すべてにおいて化学ポテンシャルが振動しており、振動の周期は V_{trans} のそれと同じで

ある。特に、くびれ幅 W_R を固定してある右の領域の化学ポテンシャルも中央領域とのバランスを保つように振動する。左右の領域の化学ポテンシャルは逆位相で、中央と右の領域の化学ポテンシャルは差をほぼ一定に保ったまま同位相で振動する。

ここで、Molenkamp らのモデルが異なった化学ポテンシャルの取り扱いをしたにもかかわらず、なぜ我々とほぼ同じ V_{trans} を与えたのかを明らかにする必要がある。今、我々のモデルで次のような近似をしたとする。

$$E_F = \mu(T) - \Delta\mu - \Delta\mu^{ref}, \quad (5.24)$$

$$\mu(T) = \mu(T_0). \quad (5.25)$$

すると、我々のモデルは次のような関係式をもって Molenkamp らのモデルに帰着する。

$$\Delta\mu' = 2\Delta\mu + \Delta\mu^{ref}, \quad (5.26)$$

$$\Delta\mu'^{ref} = \Delta\mu + \Delta\mu^{ref}. \quad (5.27)$$

従って、この場合次式が成り立つ。

$$V_{trans} = \frac{\Delta\mu - \Delta\mu^{ref}}{|e|} = \frac{\Delta\mu' - \Delta\mu'^{ref}}{|e|} = V'_{trans}, \quad (5.28)$$

$$S_L = S'_L, \quad (5.29)$$

$$S_R = S'_R. \quad (5.30)$$

(5.25) は温度差 $T - T_0$ が小さければ良く成り立つ。また我々の計算結果から、 $\Delta\mu$ 、 $\Delta\mu^{ref}$ が $\mu(T)$ に比べて大変小さく (5.24) も数%の誤差内で成り立っている。従って (5.28)~(5.30) も良く成り立つことになる。しかし、我々の見地からすれば Molenkamp らは中央領域の化学ポテンシャル $\mu(T) - \Delta\mu - \Delta\mu^{ref}$ から測った左右の領域の化学ポテンシャルの変化量を見ており、従って相対変化のみが知られ、絶対変化は求まらない。(5.28)~(5.30) からわかるように 2 つのモデルは横電圧や熱電能など化学ポテンシャルの差にのみ依存した量を評価することに関してはほぼ同じ結果を与えるが、化学ポテンシャルの変化の様子は我々のモデルからのみ知ることができる。

最後に V_{trans} の温度依存性を考察する。図 5-7 は温度差 $T - T_0$ を一定にして 4 つの温度で計算した V_{trans} の W_L 依存性である。低温では振動の振幅は次式に従う。

$$\Delta V_{trans} = \frac{k_B}{|e|} \frac{\ln 2}{n - 1/2} (T - T_0). \quad (5.31)$$

一方、温度を上げると振幅は減少し、ピークの幅は広がる。さらに、ピークを与える W_L の値も減少していく。これらの効果は電子の分布関数の温度による広がりがある原因である。この計算においては散乱プロセスをすべて

無視しているが、実際には高温では弾性散乱・非弾性散乱のために電子の運動はバリスティックではない。マクロな系でのフォノン・ドラッグ効果の重要性を考えれば、フォノンとの非弾性散乱を考慮した場合、上述の結果はどのように修正されるか非常に興味のあるところではあるが、現時点ではフォノン散乱を取り込んだ一般化された Landauer 公式が確立しておらず、この問題は今後の課題である。

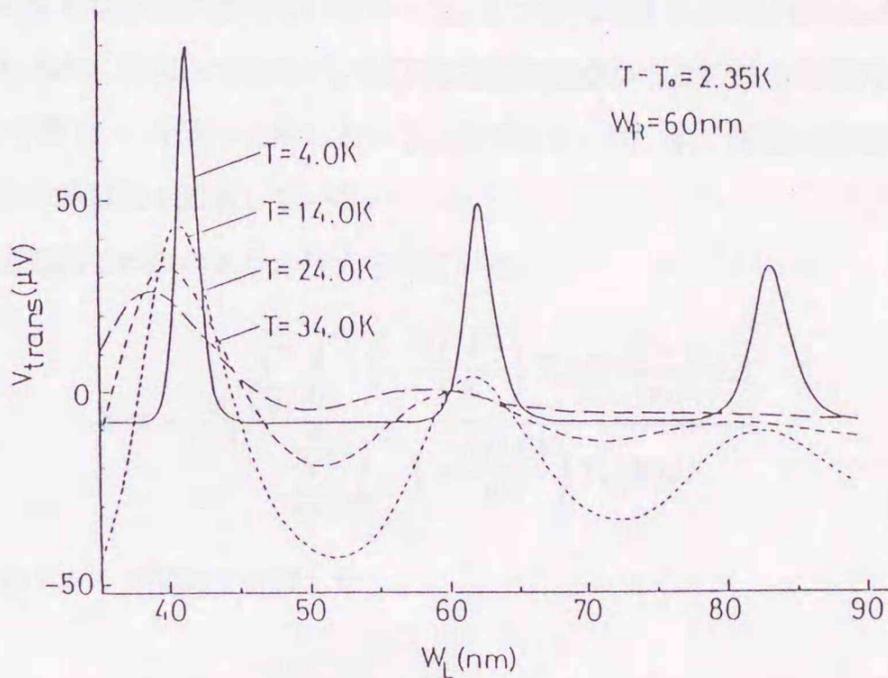


図 5-7 $T - T_0$ を一定として 4 つの異なる T に対して求めた横電圧の W_L 依存性。

以上をまとめると、ポイントコンタクトでの熱電能に関して行われた実験について、新しいモデルを用いて行った計算と実験結果を比較した結果、我々のモデルは実験で得られた横電圧のふるまいを良く説明し、さらに各領域における化学ポテンシャルが振動していることを明らかにした。また、横電圧の温度依存性をバリスティック電子に対するモデルで調べた範囲では、すべての効果は分布関数の温度依存性によるが、現実の系への拡張は今後の課題である。

5.4 量子効果の導入による量子化熱電能の検討

5.2 節で示したように、ポイントコンタクトにおける熱電能に対して Streda[4] は次のようなピーク値を示すと予想した。

$$S_n^{peak} = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\ln 2}{n - 1/2} \approx -\frac{59.73}{n - 1/2} (\mu\text{V}/\text{K}). \quad (5.5)$$

n 番目のピーク S_n^{peak} はくびれの最も細いところでの占有サブバンド数が $n - 1$ から n に変化するとき起こ

り、ピークの高さは温度にはよらない（但し、最初のピーク S_1^{peak} は存在しない。なぜならば S_1^{peak} を与えるはずの井戸幅からさらに幅を狭くしていくと、 S_1^{peak} は負にどんどん大きくなり発散してしまうためである。）。この予想はピークの周期がコンダクタンスのステップの周期と同じであるという点に関しては実験ではほぼ確かめられたが、ピークの高さに関しては実験値は (5.5) より常に小さい値を示している[5,7]。このピーク値の減少の原因についてはこれまで明らかにされていなかった。1つの可能性としては実験において温度差を過大評価しているとも考えられるが、明らかではない。以下では別の観点からこの減少の原因について考察する[8]。結論としては Streda の予想 (5.5) が正しくないということである。尚、全く同様の結論が最近 Proetto[9]により導かれた。彼は磁場中の熱電能も議論している。

熱電能は線形応答近似内では次のように与えられていた。

$$S = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) T_n(E) \frac{E - \mu}{k_B T} dE}{\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) T_n(E) dE}. \quad (5.2)$$

Streda は透過係数を次のステップ関数で近似した

$$T_n(E) = \theta(E - E_n). \quad (5.32)$$

この式はくびれ幅の変化が限りなく緩やかな断熱極限においては正しい。(5.32) を (5.2) に入れると (5.4) が得られる。

$$S = -\frac{k_B}{|e|} \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \int_{E_n}^{\infty} \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \frac{E - \mu}{k_B T} dE}{\sum_{n=1}^{\infty} f(E_n)}. \quad (5.4)$$

この式から Streda は (5.5) を得た。

一方、現実の系ではくびれ幅の変化は半古典近似[10-16]が厳密に成り立つほどゆるやかではなく、ポテンシャル・バリアでのトンネリングやバリア上での反射といった量子効果を無視できない。これらの効果を取り入れた透過係数は[10]

$$T_n(E) = \left[1 + \exp \left\{ -\pi^2 \left(\frac{2R}{W} \right)^{1/2} \left(\frac{kW}{\pi} - n \right) \right\} \right]^{-1}. \quad (5.33)$$

ここで W はくびれの最も狭いところの幅、 R はその点でのくびれの曲率半径である。また $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$ である。同じような表式は鞍点型ポテンシャル[17]の場合、及びより一般的な場合[18]に対しても求められている。(5.33) の $R \rightarrow \infty$ の極限が (5.32) となっている。

そこで(5.33)と(5.2)からいくつかの R に対し S を W の関数として計算した。計算では $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ヘテロ接合中の電子系を仮定し、 $N_s = 3.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ とした。これは $\lambda_F = 42.4 \text{nm}$ に対応する。図5-8は4Kにおける $R = 10\lambda_F$ 、 $30\lambda_F$ 、 ∞ の場合の熱電能とコンダクタンスを W の関数として示したものである。この図では熱電能に関しては $S_2^{peak} \sim S_4^{peak}$ が示されている。 $R \rightarrow \infty$ の極限では、熱電能のピーク値及びピークを与える W の値がStredaの予想とは多少異なっている。しかし、 $W = \lambda_F \times \text{整数}/2$ のときには熱電能は(5.5)で与えられる値をとる。この相違はStredaの(5.4)のピーク値の評価法に原因がある。(5.4)の分子は $W = \lambda_F \times \text{整数}/2$ のときに極大値をもつが、分母の存在のために(5.4)全体のピーク位置はやや小さい W にずれ、ピーク値はやや大きくなる。これより、熱電能が(5.5)で与えられた値に量子化されるという予想は本来正しくないことがわかった。さらに有限の R のときは R が小さいほどピーク値が $R \rightarrow \infty$ の時の値より小さくなることもわかる。この結果は熱電能がくびれの幾何学的形状に大きく依存していることを示している。

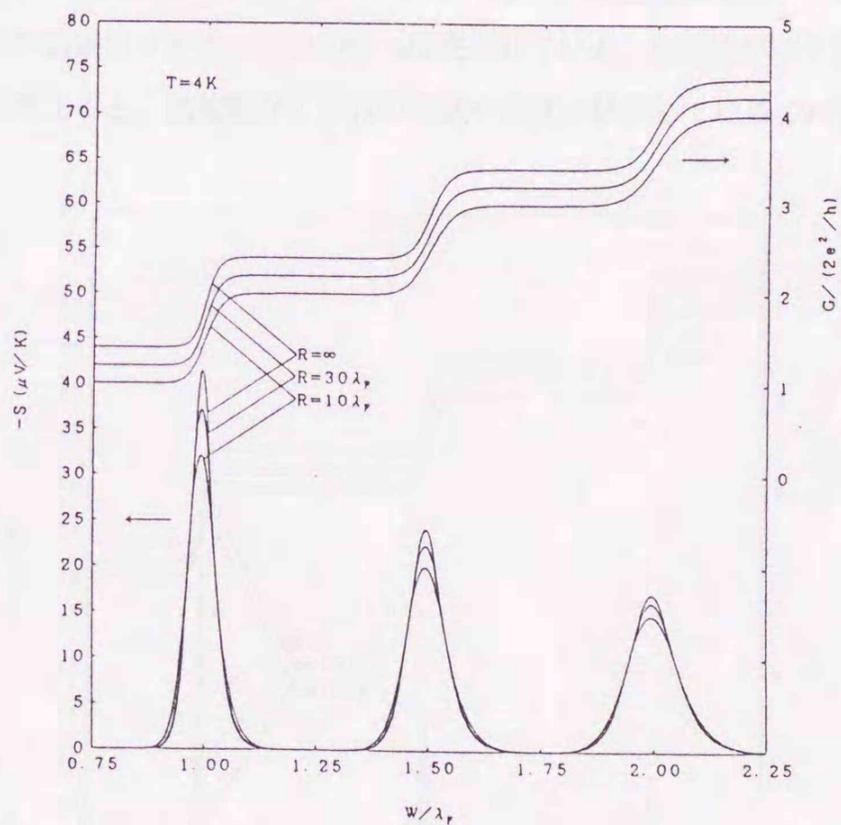


図5-8 $T = 4\text{K}$ における $R = 10\lambda_F$ 、 $30\lambda_F$ 、 ∞ の場合の熱電能とコンダクタンスのくびれ幅依存性。
 $R = \infty$ 、 $30\lambda_F$ に対するコンダクタンスは $R = 10\lambda_F$ のそれに対し、それぞれ0.4、0.2だけ縦軸の原点を上にずらしてある。

図5-9は1Kでの結果である。熱電能のピーク値の減少はこの温度では一層顕著である。Glazmanらに

よって指摘されているように、低温では R の値が (5.2) の被積分関数の幅を決めるが、高温では温度 T が決めるようになる。2つの温度領域の臨界温度 T_c は大ざっぱには次式で与えられる。

$$k_B T_c = \frac{n \hbar^2}{m^* (2RW^3)^{1/2}} \quad (5.34)$$

例えば、 $R = 10\lambda_F$ 、 $30\lambda_F$ に対する T_c は

$$n = 2 \text{ のとき } 3.29\text{K}(10\lambda_F); 1.90\text{K}(30\lambda_F),$$

$$n = 3 \text{ のとき } 2.68\text{K}(10\lambda_F); 1.55\text{K}(30\lambda_F),$$

$$n = 4 \text{ のとき } 2.32\text{K}(10\lambda_F); 1.34\text{K}(30\lambda_F)$$

である。従って、図 5-8 はピーク値が R にあまり依存しない高温領域に対応し、図 5-9 はピーク値が R に大きく依存する低温領域に対応している。これらの結果から、熱電能のピーク値はくびれ特性（曲率や幅など）だけでなく温度にも依存すると結論づけられる。この計算で扱った温度領域ではコンダクタンスは量子化を示し、くびれの曲率や温度の効果はプラトー間の勾配に反映されている。熱電能がコンダクタンスの対数のエネルギー微分であることを考えると、熱電能がくびれの形状や温度に依存しているのは当然と考えられる。

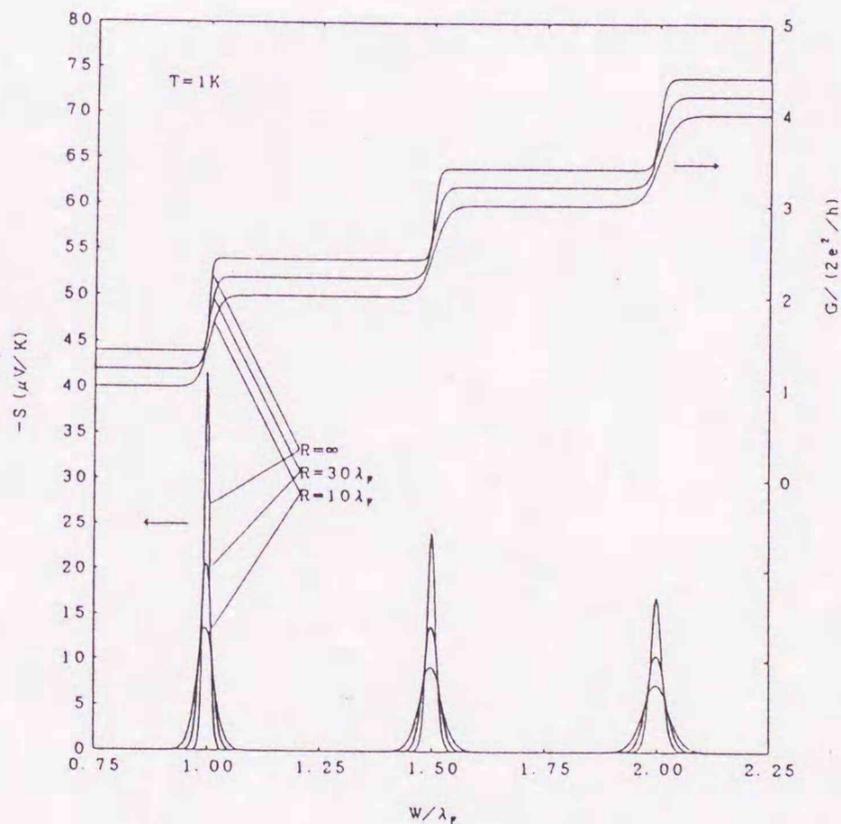


図 5-9 $T = 1\text{K}$ における $R = 10\lambda_F$ 、 $30\lambda_F$ 、 ∞ の場合の熱電能とコンダクタンスのくびれ幅依存性。
 $R = \infty$ 、 $30\lambda_F$ に対するコンダクタンスは $R = 10\lambda_F$ のそれに対しそれぞれ 0.4、0.2 だけ縦軸の原点を上にずらしてある。

まとめると、ポイントコンタクトでの熱電能をより現実的なモデルを用いて解析したところ、Stredaによる量子化の予想は現実のくびれの形状に対しては正しくなく、熱電能のピーク値はくびれの形状や系の温度に大きく依存するということが明らかになった。

参考文献

- 1 B.J.van Wees, H.van Houten, C.W.J.Beenakker, J.G.Williamson, L.P.Kouwenhoven, D.van der Marel, and C.T.Foxon, *Phys.Rev.Lett.***60**,848(1988).
- 2 D.A.Wharam, T.J.Thornton, R.Newbury, M.Pepper, H.Ahmed, J.E.F.Frost, D.G.Hasko, D.C.Peacock, D.A.Ritchie, and G.A.C.Jones, *J.Phys.C***21**,L209(1988).
- 3 U.Sivan and Y.Imry, *Phys.Rev.B***33**,551(1986).
- 4 P.Streda, *J.Phys.Condens.Matter***1**,1025(1989).
- 5 L.W.Molenkamp, H.van Houten, C.W.J.Beenakker, R.Eppenga, and C.T.Foxon, *Phys.Rev.Lett.***65**,1052(1990).
- 6 Y.Okuyama, T.Sakuma, and N.Tokuda, *Surf.Sci.*(掲載予定); *J.Phys.Condens.Matter*(掲載予定).
- 7 S.Yamada and M.Yamamoto, *Semicon.Sci.Tech.*(掲載予定).
- 8 Y.Okuyama and N.Tokuda, *Phys.Rev.B*(投稿中).
- 9 C.R.Proetto, *Phys.Rev.B***44**,9096(1991).
- 10 L.I.Glazman, G.B.Lesovik, D.E.Khmel'nitskii, and R.I.Shekhter, *JETP Lett.***48**,238(1988).
- 11 L.I.Glazman and M.Jonson, *J.Phys.Condens.Matter***1**,5547(1989); *Phys.Rev.B***41**,10686(1990).
- 12 M.C.Payne, *J.Phys.Condens.Matter***1**,4939(1989).
- 13 L.I.Glazman and A.V.Khaetskii, *Europhys.Lett.***9**,263(1989).
- 14 A.Yacoby and Y.Imry, *Phys.Rev.B***41**,5341(1990).
- 15 F.Hekking, Yu.V.Nazarov, and G.Schön, *Europhys.Lett.***14**,489(1991).
- 16 L.I.Glazman and M.Jonson, *Phys.Rev.B***44**,3810(1991).
- 17 M.Büttiker, *Phys.Rev.B***41**,7906(1990).
- 18 M.Yosefin and M.Kaveh, *Phys.Rev.B***44**,3355(1991).

6章 まとめ

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 半導体ヘテロ接合における二次元電子系の電子輸送の研究というテーマでマクロスコピック領域とメゾスコピック領域の電子の散乱メカニズムを議論した。マクロスコピック領域では電子・音響フォノン相互作用に焦点を当て、現在、議論の対象となっている変形ポテンシャル定数 D の値を求めた。近年のヘテロ接合における実験データの解析からは $D = 11 \sim 16\text{eV}$ といった値を得ているが、これは従来バルク GaAs で用いられてきた $D = 7 \sim 8\text{eV}$ に比べかなり大きい。バルクとヘテロ接合では音響フォノンに違いはないことから見れば、この違いは解析方法にあると考えられる。解析の結果にはスクリーニング因子の取り扱いが大きく影響しているので、我々は短距離相互作用の変形ポテンシャル結合に対するスクリーニング因子の妥当性を調べるために、スクリーニング因子を入れた理論と入れない理論とをそれぞれ電子移動度、電子エネルギー損失率、熱電能の実験データと比較し、どちらが実験データを良く再現できるか調べた。その結果、変形ポテンシャル結合には通常のスクリーニング因子は適当でなく、むしろスクリーニング因子を入れない方がよいという結論に達した。その場合、 $D = 8\text{eV}$ という値が得られ、バルク GaAs と矛盾のない結果を得た。

一方、メゾスコピック領域ではポイントコンタクトにおける熱電能に焦点を当てて電子輸送を議論した。ポイントコンタクトにおける熱電能に関してはまず Streda によってコンダクタンスの量子化に対応してポイントコンタクトのくびれ幅が変化するとピーク構造をとり、そのピーク値は温度・試料によらない値になることが理論的に予想され、その後その予想をほぼ確認したと思われる実験が Molenkamp らにより行われた。彼らが用いた方法は細線の両側面に異なったポイントコンタクトを介して2つの二次元電子系をつなげ、細線中の電子のみを加熱することで生じた各ポイントコンタクトの熱起電力の差を横電圧として測定するもので、理論計算で扱ったモデルより系の構造が複雑である。すなわちこの系は3つの二次元領域からなっている。我々はこの系に合うようなモデルを考え、横電圧の原因となる各領域の化学ポテンシャルのふるまいを調べた。その結果、従来の計算では見逃されていた化学ポテンシャルの振動を見いだした。実験では2つのポイントコンタクトのうち一方のくびれ幅を固定し、もう一方のくびれ幅を変えているため、従来は1つの領域の化学ポテンシャルのみが振動し、それが横電圧の振動の原因と考えられていたが、実は3つの領域すべてで化学ポテンシャルが振動していることがわかった。実験では今のところこのふるまいを直接観測できてはいないが、このようなふるまいが起きていることを認識することは現象の理解にとって重要であろう。

さらに、Molenkamp らの実験及びその後の山田・山本らの実験ではデータが Streda の予想値より常に小さい。従って、Streda により予想されたピーク値の量子化の妥当性を検討する必要性が生じてきた。そこで Streda の理論を現実的なポイントコンタクトに適合するよう改良したところ、Streda の予想値はある理想的極

限でのみ成り立つにすぎず、現実の状況ではピーク値は必ず Streda の予想値より小さくなり、さらにポイントコンタクトのくびれの形状や系の温度にも依存する量であることがわかった。この事実は、今後ポイントコンタクトの熱電能を調べる際には試料依存性、温度依存性を考慮することが必要不可欠であることを示している。

謝辞

本稿を終えるに当り、終始熱心に御指導して下さいました徳田先生に心からの謝意を表します。本稿を書き終えることができたのも先生の御指導と激励のおかげと感謝しています。また色々と助言をいただきお世話になった明楽先生、岡本先生、安仁屋先生にも深く感謝しています。修士2年の佐久間君には計算を一部手伝っていただきました。最後になりましたが、工業数理科学講座の他の皆さんにも多方面にわたりお世話になりました。すでに卒業された方も含めて大変感謝しています。

付録 A. サブバンドエネルギー E_0 の導出

拡張された Fang-Howard 変分関数は次式で与えられる。

$$\zeta(z) = \begin{cases} Bb^{1/2}(bz + \beta)e^{-bz/2} \equiv \zeta_1(z) & z \geq 0 \text{ のとき} \\ B'b^{1/2}e^{b'z/2} \equiv \zeta_2(z) & z \leq 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

以下、各領域ごとに静電ポテンシャル $\phi(z)$ を求める。

(1) $z \geq 0$ (GaAs 層)

Poisson 方程式は次式で与えられる。

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa_0} \left[N_s \zeta_1^2(z) - \frac{\rho_{depl}(z)}{e} \right]. \quad (\text{A.2})$$

ここで

$$\rho_{depl} = \begin{cases} -e(N_A - N_D) & 0 < z < z_d \text{ のとき} \\ 0 & z_d < z \text{ のとき} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

であり、 $(N_A - N_D)z_d = N_{depl}$ の関係がある。従って、Hartree ポテンシャルは次式で与えられる。

$$v_H(z) = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_s \int_0^z dz' \int_{z'}^\infty dz'' \zeta_1^2(z'') + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_{depl} z \quad (\text{A.4})$$

(2) $-W_{sp} < z < 0$ (スペーサ層)

Poisson 方程式は次式で与えられる。

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa_0} N_s \zeta_2^2(z) \quad (\text{A.5})$$

Hartree ポテンシャルは次式で与えられる。

$$v_H(z) = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} (N_s + N_{depl})z + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_s \frac{B'^2}{b'} - \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_s \frac{B'^2}{b'} e^{b'z} \quad (\text{A.6})$$

(3) $-W_D - W_{sp} < z < -W_{sp}$ (イオン化した Si を含む層)

Poisson 方程式は次式で与えられる。

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa_0} [N_s \zeta_2^2(z) - N_I] \quad (\text{A.7})$$

Hartree ポテンシャルは次式で与えられる。

$$v_H(z) = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_I \left[\frac{z^2 - W_{sp}^2}{2} + W_{sp}(z + W_{sp}) \right] + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} (N_s + N_{depl})z \\ + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_s \frac{B'^2}{b'} - \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_s \frac{B'^2}{b'} e^{b'z} \quad (\text{A.8})$$

ハミルトニアン

$$H_z = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 \theta(-z) + v_H \quad (\text{A.9})$$

の期待値は

$$\begin{aligned} E_0(b, b') &= \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^*(z) H_z \zeta(z) dz \\ &= -\frac{\hbar^2}{8m^*} [B^2 b^2 (\beta^2 - 2\beta - 2) + B'^2 b'^2] + V_0 B'^2 \\ &\quad + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_{depl} \left[\frac{B^2}{b} (\beta^2 + 4\beta + 6) - \frac{B'^2}{b'} \right] \\ &\quad + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} \left[\frac{B^4}{4b} (2\beta^4 + 12\beta^3 + 34\beta^2 + 50\beta + 33) + \frac{B'^4}{2b'} - \frac{B'^2}{b'} \right] \\ &\quad + \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} N_I \left(\frac{B'^2}{b'} \right)^2 (1 - e^{-b'W_D}) e^{-b'W_{sp}}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

(A.10) の第 4 項を 1/2 倍した式が全エネルギー $E(b, b')$ である。

付録 B. 電子拡散熱電能及びフォノン・ドラッグ熱電能の表式の導出

二次元波数ベクトル \mathbf{k} の電子に対する分布関数を $f(\mathbf{k})$ と書く。 xy 平面内に定常な温度勾配 ∇T が存在するときの定常状態 Boltzmann 方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} = \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_d + \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_c = 0. \quad (B.1)$$

ここで第 1 項はドリフト項

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right] = -\mathbf{v}_k \cdot \nabla f(\mathbf{k}) \quad (B.2)$$

であり、第 2 項は衝突項

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right] = \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_i + \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_a + \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_e \quad (B.3)$$

である。ここで添え字 i 、 a 、 e はそれぞれイオン化不純物散乱、フォノンを吸収する散乱、及び放出する散乱を表す。低温とし、イオン化不純物散乱の寄与が大きい場合を考える。緩和時間 τ_k を導入すると、

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_i = -\frac{f(\mathbf{k}) - f^0(\mathbf{k})}{\tau_k} \quad (B.4)$$

と書ける。ここで

$$f^0(\mathbf{k}) = [\exp\{(\epsilon_k - \mu)/k_B T\} + 1]^{-1} \quad (B.5)$$

はエネルギー ϵ_k をもつ電子の温度 T での平衡分布関数である。

次にフォノン散乱を考えると

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_{a(e)} = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}, s} \{f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] P_{qs}^{a(e)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] P_{qs}^{a(e)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\}, \quad (B.6)$$

$$P_{qs}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = A_{qs} N_{qs} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{qs}) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}_{\parallel}}, \quad (B.7)$$

$$P_{qs}^e(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = A_{qs} (N_{qs} + 1) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{qs}) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{q}_{\parallel}}, \quad (B.8)$$

$$A_{qs} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{qs}|^2 |I(q_z)|^2 \quad (B.9)$$

である。ここで N_{qs} は波数ベクトル \mathbf{q} 、モード s のフォノンの分布関数、 V_{qs} は電子・フォノン相互作用に対する行列要素であり、 $I(q_z)$ は重なり積分であり次式で与えられる。

$$I(q_z) = \int_0^{\infty} \zeta^2(z) \exp(iq_z z) dz. \quad (B.10)$$

次にフォノン分布関数に対する Boltzmann 方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} = \left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_d + \left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_c = 0. \quad (B.11)$$

ここで第1項はドリフト項

$$\left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_d = -\mathbf{v}_{qs} \cdot \nabla N_{qs} \quad (B.12)$$

であり、 v_{qs} は三次元波数ベクトル \mathbf{q} 、モード s のフォノンの速度である。第2項は衝突項

$$\left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_c = \left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_p + \left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_a + \left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_e \quad (B.13)$$

である。ここで添え字 p は境界散乱とフォノン・フォノン散乱の寄与を表し、 a 、 e はそれぞれフォノン吸収及び放出の散乱過程を表す。低温では境界散乱の寄与が大きい。緩和時間 τ_{qs} を導入すると

$$\left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_p = -\frac{N_{qs} - N_{qs}^0}{\tau_{qs}} \quad (B.14)$$

と書ける。ここで

$$N_{qs}^0 = [\exp(\hbar\omega_{qs}/k_B T) - 1]^{-1} \quad (B.15)$$

はエネルギー $\hbar\omega_{qs}$ 、モード s のフォノンの温度 T における平衡分布関数である。電子・フォノン散乱の項は

$$\left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_{a(e)} = -(+)2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] P_{qs}^{a(e)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (B.16)$$

と書ける。

次に各 Boltzmann 方程式を線形化する。今、温度勾配が x 方向にあるとする。すなわち

$$\nabla T = (dT/dx, 0, 0) \quad (B.17)$$

とする。 dT/dx が小さいとして $f(\mathbf{k})$ 、 N_{qs} を平衡分布に関して展開する。

$$f(\mathbf{k}) = f^0(\mathbf{k}) - \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} g(\mathbf{k}), \quad (B.18)$$

$$N_{qs} = N_{qs}^0 - \frac{dN_{qs}^0}{d\hbar\omega_{qs}} G_{qs}. \quad (B.19)$$

線形化された Boltzmann 方程式は次のようになる。

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_d^1 + \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_c^1 = 0, \quad (B.20)$$

$$\left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_d^1 + \left[\frac{\partial N_{qs}}{\partial t} \right]_c^1 = 0. \quad (B.21)$$

ここでドリフト項は次式で与えられる。

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_d^1 = v_{\mathbf{k}x} \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \frac{dT}{dx}, \quad (B.22)$$

$$\left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}s}}{\partial t} \right]_d^1 = v_{\mathbf{q}s x} \frac{dN_{\mathbf{q}s}^0}{d\hbar\omega_{\mathbf{q}s}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}s}}{T} \frac{dT}{dx}. \quad (B.23)$$

一方、衝突項は次のようになる。

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_c^1 &= \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \frac{g(\mathbf{k})}{\tau_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}, s} [g(\mathbf{k}') - g(\mathbf{k})] [\Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \\ &\quad - \frac{1}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}, s} G_{\mathbf{q}s} [\Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')], \end{aligned} \quad (B.24)$$

$$\left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}s}}{\partial t} \right]_c^1 = \frac{dN_{\mathbf{q}s}^0}{d\hbar\omega_{\mathbf{q}s}} \frac{G_{\mathbf{q}s}}{\tau_{\mathbf{q}s}} + \frac{2}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [g(\mathbf{k}') - g(\mathbf{k})] \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \frac{2}{k_B T} G_{\mathbf{q}s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (B.25)$$

ここで

$$\Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] P_{\mathbf{q}s}^{a0}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (B.26)$$

であり、 $P_{\mathbf{q}s}^{a0}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ は $P_{\mathbf{q}s}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ において $N_{\mathbf{q}s}$ を $N_{\mathbf{q}s}^0$ で置き換えた式である。さて

$$F_{\mathbf{q}s} = -\frac{dN_{\mathbf{q}s}^0}{d\hbar\omega_{\mathbf{q}s}} \frac{1}{\tau_{\mathbf{q}s}} + \frac{2}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (B.27)$$

と置くと

$$G_{\mathbf{q}s} = F_{\mathbf{q}s}^{-1} \left\{ \left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}s}}{\partial t} \right]_d^1 + \frac{2}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [g(\mathbf{k}') - g(\mathbf{k})] \Gamma(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right\}. \quad (B.28)$$

これを (B.24) に代入すると

$$Lg(\mathbf{k}) + \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_d^1 + U(\mathbf{k}) = 0 \quad (B.29)$$

となる。駆動項 $U(\mathbf{k})$ は次式で与えられる。

$$U(\mathbf{k}) = -\frac{1}{k_B T} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}, s} F_{\mathbf{q}s}^{-1} [\Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \left[\frac{\partial N_{\mathbf{q}s}}{\partial t} \right]_d^1. \quad (B.30)$$

衝突演算子 L は

$$L = L_1 + L_2 + L_3 \quad (B.31)$$

と書けるが、 $L_1 g(\mathbf{k})$ 、 $L_2 g(\mathbf{k})$ は (B.24) の第1項と第2項であり、 $L_3 g(\mathbf{k})$ は次式で与えられる。

$$L_3 g(\mathbf{k}) = -\frac{2}{(k_B T)^2} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}, s} F_{\mathbf{q}s}^{-1} [\Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_1} \Gamma_{\mathbf{q}s}(\mathbf{k}', \mathbf{k}_1) [g(\mathbf{k}') - g(\mathbf{k}_1)]. \quad (B.32)$$

電子・フォノン相互作用が弱いので、 L_3 と L_2 は L_1 に比べ無視できる。このとき (B.29) の解は次のようになる。

$$-\frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}}g(\mathbf{k}) = \tau_{\mathbf{k}} \left\{ \left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} \right]_d + U(\mathbf{k}) \right\}. \quad (B.33)$$

電流は次式で定義される。

$$J_x = -\frac{2|e|}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})v_{\mathbf{k}x}. \quad (B.34)$$

(B.34) に (B.18) を代入したとき、 $f^0(\mathbf{k})$ の寄与はゼロであるが、 $(df^0(\mathbf{k})/d\epsilon_{\mathbf{k}})g(\mathbf{k})$ の寄与は電子拡散の項とフォノン・ドラッグの項からなる。電子拡散の項は次式である。

$$J_x^d = -\frac{2|e|}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}x}^2 \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \frac{dT}{dx}. \quad (B.35)$$

電子拡散熱電能 S_d は $S_d dT/dx = -J_x^d/\sigma$ で定義される。 σ は電気伝導度であり次式で与えられる。

$$\sigma = \frac{m^*e^2}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \tau_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2 \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} d\epsilon_{\mathbf{k}}. \quad (B.36)$$

従って

$$\begin{aligned} S_d &= \frac{2|e|}{L^2\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}x}^2 \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \\ &= \frac{1}{|e|T} \frac{\int_0^\infty \tau_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} d\epsilon_{\mathbf{k}}}{\int_0^\infty \tau_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2 \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} d\epsilon_{\mathbf{k}}}. \end{aligned} \quad (B.37)$$

ここで

$$\int_0^\infty \tau_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^n \frac{df^0(\mathbf{k})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} d\epsilon_{\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2}{m^*\pi} \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^n \frac{\sigma(\epsilon)}{e^2} + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\{ (\epsilon - \mu)^n \frac{\sigma(\epsilon)}{e^2} \right\} + \dots \right]_{\epsilon=\mu} \quad (B.38)$$

より

$$\begin{aligned} S_d &= \frac{1}{|e|} \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \left[\frac{\sigma'(\epsilon)}{\sigma(\epsilon)} \right]_{\epsilon=\mu} \\ &= \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{|e|} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln \sigma(\epsilon) \Big|_{\epsilon=\mu} \end{aligned} \quad (B.39)$$

となるが、 $\sigma(\epsilon) \propto \epsilon^{p+1}$ のときは

$$S_d = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2 T}{|e|} (p+1) \frac{1}{\mu} \quad (B.40)$$

となる。但し、通常は化学ポテンシャル μ をフェルミエネルギー E_F で近似する。

次に、フォノン・ドラッグの項は

$$J_x^g = -\frac{2|e|}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}} U(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}x}. \quad (\text{B.41})$$

$U(\mathbf{k})$ に (B.30) を代入すると

$$J_x^g = \frac{2|e|}{L^2 k_B T} \sum_{\mathbf{k}} \tau_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}x} \sum_{\mathbf{k}', q, s} F_{qs}^{-1} [\Gamma_{qs}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \Gamma_{qs}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] v_{qsx} \frac{dN_{qs}^0}{d\hbar\omega_{qs}} \frac{\hbar\omega_{qs}}{T} \frac{dT}{dx} \quad (\text{B.42})$$

となる。フォノン・ドラッグ熱電能 S_g は $S_g dT/dx = -J_x^g/\sigma$ で定義される。従って、

$$S_g = \frac{-|e|}{\sigma L^2 k_B T^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{q, s} \frac{\hbar\omega_{qs}}{F_{qs}} \frac{dN_{qs}^0}{d\hbar\omega_{qs}} \Gamma_{qs}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \mathbf{v}_{qs} \cdot [\tau_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \tau_{\mathbf{k}'} \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}] \quad (\text{B.43})$$

となる。さらに、(B.27) で第1項が支配的だとすると次式が得られる。

$$S_g = \frac{|e|}{\sigma L^2 k_B T^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{q, s} \hbar\omega_{qs} \tau_{qs} f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] P_{qs}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [\tau_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \tau_{\mathbf{k}'} \mathbf{v}_{\mathbf{k}'}] \cdot \mathbf{v}_{qs}. \quad (\text{B.44})$$

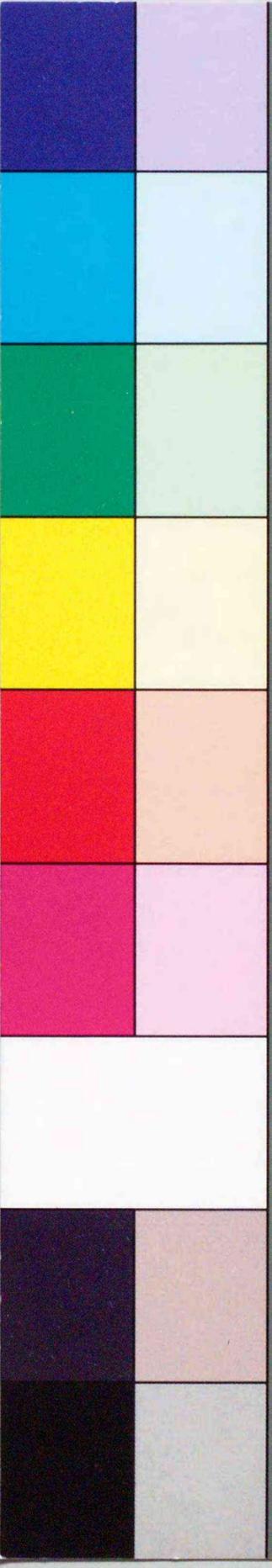


inches 1 2 3 4 5 6 7 8
cm 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19

Kodak Color Control Patches

© Kodak, 2007 TM: Kodak

Blue Cyan Green Yellow Red Magenta White 3/Color Black



Kodak Gray Scale



© Kodak, 2007 TM: Kodak

A 1 2 3 4 5 6 M 8 9 10 11 12 13 14 15 B 17 18 19

