HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	半導体量子井戸構造における井戸間電子移動を用いたスピン緩和スイッチングの理論的研究
Author(s)	飯島, 智徳
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第14426号
Issue Date	2021-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k14426
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/83149
Type	doctoral thesis
File Information	Tomonori_Iijima.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

令和２年度　博士論文

半導体量子井戸構造における井戸間電子移動を用いたスピン緩和スイッチングの理論的研究

北海道大学大学院工学院応用物理学専攻

飯島智徳

概 要

電子の電荷だけでなくスピンの自由度も利用するスピントロニクスが情報処理の省エネルギー化を実現する方法として注目され、数多くの研究がなされている。半導体などの非磁性体においてスピン自由度に情報を書き込むにはスピン偏極を生成することが必要で、その情報を輸送するにはスピン偏極を維持することが要求される。非磁性体におけるスピン偏極はスピン軌道相互作用に起因するスピンホール効果や Edelstein 効果によって生成することができるが、このスピン軌道相互作用はスピン偏極を壊すスピン緩和の原因にもなる。本学位論文では、スピン軌道相互作用に起因する有効磁場によって生じる Dyakonov-Perel スピン緩和に関する研究を半導体量子井戸構造を対象にして行った。

スピン緩和を制御することは、スピン自由度を活用する情報処理において必須である。情報の輸送においてはスピン緩和を抑制する必要があるが、スピン緩和率を大きく変化させることが要求されることもある。例えば、スピン緩和 FET ではスピン緩和率を大きく変化させることで電流をスイッチングするので、スピン緩和率の on/off 比を極めて大きくすることが要求される。

半導体量子井戸においてはゲート電圧を変えることによってスピン緩和率を変えるという制御方法が実験的に確立している。ゲート電圧を調節して量子井戸に加わる電場をゼロにすることでスピン緩和は消失し、電場を大きくすることでスピン緩和を強めることができるので、スピン緩和率の on/off 比は原理的には極めて大きくできる。しかし実際の FET において電場をゼロに近づけたり極めて大きくすることは困難である。

そこで本研究では、スピン緩和を抑制した量子井戸とスピン緩和を強化した量子井戸との間で電子を移動させることによってスピン緩和率をスイッチングするという制御方法を提案した。十分低温では、基底サブバンドにおける有効磁場によりスピン緩和率が決まるため、有効磁場を抑制した量子井戸と有効磁場を強化した量子井戸との間の電子移動を用いることによって従来の方法より数桁大きいスピン緩和率 on/off 比が得られた。一方室温においては、有効磁場が大きい励起サブバンドがスピン緩和率の off での値を引き上げるためスピン緩和率 on/off 比は何桁も減少した。そこで、室温でのスピン緩和率 on/off 比を改善するために、励起サブバンドの影響を低減できる量子井戸構造を、半導体の種類や各層の厚さを変えて、探索した。その結果、室温においても絶対零度と同程度のスピン緩和率 on/off 比を達成することに成功した。

本論文を構成する各章の概要は次の通りである。

第 1 章では、スピントロニクスにおいてスピン緩和を制御する必要性、従来のスピン緩和制御方法とその問題点、本論文で提案するスピン緩和制御方法と本論文の目的を述べる。

第 2 章から第 5 章において半導体量子井戸構造におけるスピン緩和の基礎理論を概説する。第 2 章では、密度行列と量子 Liouville 方程式による輸送現象の記述について解説し、ボルツマン方程式の衝突項を不純物散乱に対して導出する。第 3 章では、閃亜鉛鉱構造をもつ半導体のバルクにおける伝導帯の電子状態を良く記述できる Kane モデルについて解説する。

第 4 章では、閃亜鉛鉱構造をもつ半導体のバルクおよび量子井戸構造における伝導帯の電子に働く Dresselhaus スピン軌道相互作用と Rashba 型スピン軌道相互作用について解説する。第 5 章では、電子スピンの歳差運動と Dyakonov-Perel スピン緩和機構について解説する。

第 6 章と第 7 章において本論文の理論モデルと計算方法および計算結果について述べる。

第 6 章では面方位が (110) である 3 重量子井戸構造における Rashba スピン軌道相互作用による Dyakonov-Perel スピン緩和の研究を説明する。6.1 節において研究背景と研究目的を、6.2 節において 3 重量子井戸構造のモデルとハミルトニアンについて述べた後、6.3 節において基底サブバンドのみを考慮した従来のスピン緩和率の表式を励起サブバンドも考慮した表式に拡張し、6.4 節においてその拡張した表式を用いて求めたスピン緩和率の計算結果を示す。本研究ではまず、スピン緩和を抑制した量子井戸を中央に置きスピン緩和を強化した量子井戸をその左右に置いた 3 重量子井戸構造について、励起サブバンドと基底サブバンドの間のエネルギー差を大きくして励起サブバンドの影響を低減するための方針として、スピン緩和を抑制した量子井戸の井戸幅を広くしスピン緩和を強化した量子井戸の井戸幅を狭くするというガイドラインを立てた。外側の障壁層の半導体として InAlAs を用いガイドラインに基づき設計した (110) 3 重量子井戸構造において、絶対零度でのスピン緩和率 on/off 比は従来の単一量子井戸を用いた制御方法に比べて数桁向上したが、室温では励起サブバンドを占める電子がスピン緩和率の off での値を引き上げるため、スピン緩和率の on/off 比は絶対零度での on/off 比より数桁減少した。そこで、スピン緩和 off のときの励起サブバンドの影響を低減するために、外側の障壁層の半導体として伝導帯のバンドオフセット（バンド端のエネルギー差）が大きい AlAsSb を用いて障壁を高くすることによって左右の井戸をさらに狭くできるようにし、ガイドラインに基づき 3 重量子井戸構造を設計した。その結果スピン緩和 off の電場領域において励起サブバンドの影響を低減することができ、室温でも絶対零度と同程度のスピン緩和率の on/off 比を達成することに成功した。6.5 節においてこの研究の結論を述べる。

第 7 章では面方位が (111) である 2 重量子井戸構造における Rashba スピン軌道相互作用および Dresselhaus スピン軌道相互作用による Dyakonov-Perel スピン緩和の研究を説明する。面方位が (111) である量子井戸では Rashba 有効磁場と Dresselhaus 有効磁場が打ち消し合うように調整することによりあらゆる方向のスピン偏極に対してスピン緩和を抑制することが可能である。本研究では障壁層の半導体 AlGaAsSb の Al の割合が左右で異なる非対称量子井戸を導入し、Rashba 有効磁場と Dresselhaus 有効磁場が相殺するように Al の割合を調節した。このように調節した量子井戸をスピン緩和を強化した量子井戸と組み合わせた 2 重量子井戸構造をガイドラインに基づき設計することにより、あらゆる方向のスピン偏極に対して、室温でのスピン緩和率の on/off 比を絶対零度と同程度にすることに成功した。この章では、7.1 節において研究背景と研究目的を、7.2 節において 2 重量子井戸構造のモデルとハミルトニアンについて述べた後、7.3 節において計算結果、7.4 節においてこの研究の結論を述べる。

最後に第 8 章においてこの学位論文の研究を総括する。

目 次

1 序論 **5**

2 密度行列と量子 Liouville 方程式による輸送現象の記述 **14**

2.1 密度行列と量子 Liouville 方程式 14

2.2 Kohn - Luttinger の密度行列 15

2.3 衝突項の導出 16

3 Kane モデル **19**

3.1 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論 19

3.2 スピン軌道相互作用 20

3.3 スピン軌道相互作用を考慮した $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論（Kane モデル） 22

3.4 Kane モデルでの伝導帯と価電子帯の基底ケット 22

3.5 Kane のハミルトニアン 23

4 半導体量子井戸構造のスピン軌道相互作用 **25**

4.1 量子井戸構造 25

4.2 化合物半導体における有効磁場 27

4.3 量子井戸における有効磁場 29

4.4 量子井戸における Rashba 有効磁場 30

5 スピンの歳差運動と緩和 **33**

5.1 スピンの歳差運動 33

5.2 スピン緩和の Dyakonov-Perel 機構 33

6 Rashba スピン軌道相互作用による Dyakonov-Perel スピン緩和のスイッチング **38**

6.1 序論 38

6.2 モデルとハミルトニアン 41

6.3 スピン緩和率の表式 44

6.4 スピン緩和率の計算結果 48

6.4.1 スピン緩和率 on/off 比向上のためのガイドライン 48

6.4.2 外側の障壁層の半導体が $In_{0.52}Al_{0.48}As$ である 3 重量子井戸構造 49

6.4.3 外側の障壁層の半導体が $AlAs_ySb_{1-y}$ である 3 重量子井戸構造 52

6.4.4 単一量子井戸との比較 55

6.5 結論 55

7 Rashba スピン軌道相互作用と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の釣り合いと Dyakonov-Perel スピン緩和のスイッチング **57**

7.1 序論 57
7.2 モデルとハミルトニアン 59
7.3 計算結果 60
7.3.1 (111) 単一量子井戸における有効磁場の釣り合い 60
7.3.2 (111) 2 重量子井戸構造における Dyakonov-Perel スピン緩和のスイッチング 61
7.4 結論 66

8 総括 **67**

A ボルツマンの輸送方程式 **70**
A.1 波束による電子の運動の記述 70
A.2 分布関数とボルツマンの輸送方程式 71

B 量子 Liouville 方程式の導出 **74**

C Kohn-Luttinger の密度行列に関する導出 **75**

D 衝突項の導出の詳細 **77**

E 1 次元井戸型ポテンシャルの問題の解法 **79**
E.1 左右の障壁の高さが有限で等しい場合 79
E.2 左右の障壁の高さが有限で異なる場合 81

F 時間反転対称性や空間反転対称性があるときのエネルギー固有値がもつ関係の導出 **86**

G Hartree 近似 **88**

H 半導体量子井戸の Rashba 型スピン軌道相互作用の導出 **91**

I Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率の導出 **93**

J 分布関数の運動方程式の導出の際の評価方法 **95**

K 3 重量子井戸構造の Rashba 係数の導出 **97**

L 不純物ポテンシャルの δ 関数型モデルの適用範囲 **99**

M スピン緩和が on となる電場の値と off となる電場の値の差が電子面密度に比例すること について **100**

N (111) 量子井戸中の Dresselhaus スピン軌道相互作用 **102**

1　序論

電子は電荷の自由度（軌道の自由度）とスピンの自由度を持つ。電子の電荷の自由度を利用する情報処理技術は、20 世紀にエレクトロニクスによって創られた。その後、1980 年代後半の磁性多層膜における巨大磁気抵抗効果の発見を契機として、電子の電荷とスピン両方の自由度による情報処理を目指すスピントロニクスという分野が新たに生まれた。このスピントロニクスに非磁性体を利用するにはまずスピン偏極を生成しなければならない。スピン偏極を生成する方法として、スピン軌道相互作用に起因するスピンホール効果や Edelstein 効果が用いられている。一方、このスピン軌道相互作用はスピン偏極を壊すスピン緩和の原因にもなる。

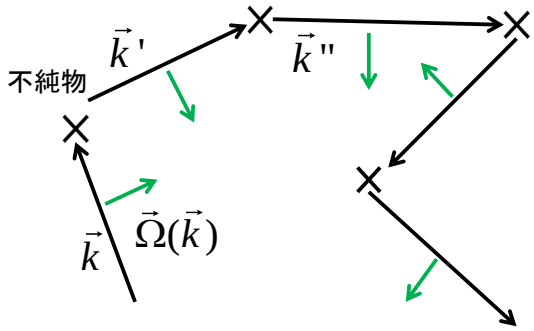


図 1: Dyakonov-Perel スピン緩和機構 [1, 2]。散乱による波数ベクトルの変化に伴い有効磁場が変化し、スピン緩和が生じる。

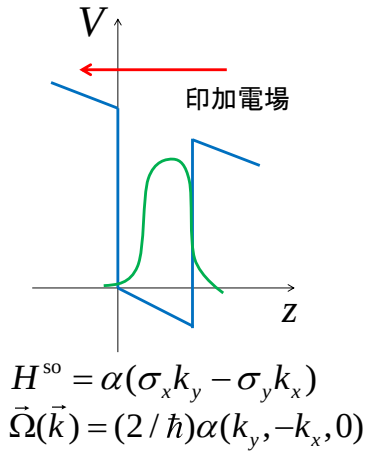


図 2: Rashba スピン軌道相互作用 H^{so}。半導体量子井戸に電場を印加しポテンシャル $V(z)$ の空間反転対称性を破ることにより有効磁場 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})$ が現れる。

スピン軌道相互作用に起因するスピン緩和の機構には、Dyakonov-Perel 機構と Elliott-Yafet 機構がある。前者の Dyakonov-Perel 機構 [1, 2] では、電子の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に依存する（スピン軌道相互作用から生じる）有効磁場 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})$ の回りを電子のスピンが歳差運動し、散乱により波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ が変化するたびに有効磁場 $\boldsymbol{\Omega}$ も変化すること（図 1）によってスピン偏極が減少する。本研究の舞台である半導体量子井戸では、図 2 に示すように、量子井戸に電場を印加してポテンシャルの空間反転対称性を破るこ

とで Rashba スピン軌道相互作用 [3, 4, 5, 6] による有効磁場が生じる。後者の Elliott-Yafet 機構 [7, 8] では、不純物ポテンシャル由来のスピン軌道相互作用により散乱と同時にスピンが反転しスピン偏極が緩和する。半導体量子井戸におけるスピン緩和では Dyakonov-Perel 機構が支配的であるので、この論文では Dyakonov-Perel 機構によるスピン緩和を議論する。

スピン緩和は、スピントロニクスにおいて重要な研究課題であり、数多くの研究がなされている。例えば、アップスピン状態とダウンスピン状態を用いて表現したデジタル情報の伝送のためには、スピン緩和を抑制することが必要である。一方、スピン緩和率を大きく変化させることで電流をスイッチングするスピン FET があり、スピン緩和 FET [9, 10, 11, 12] と呼ばれている。このスピン緩和 FET の性能を上げるには、スピン緩和率の on/off 比を大きくすることが必要である。

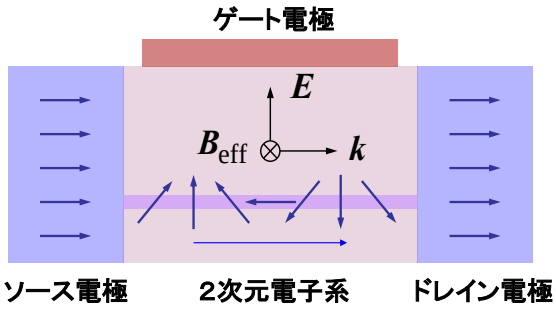


図 3: Datta-Das のスピン FET [13] （文献 [14] より転載）。

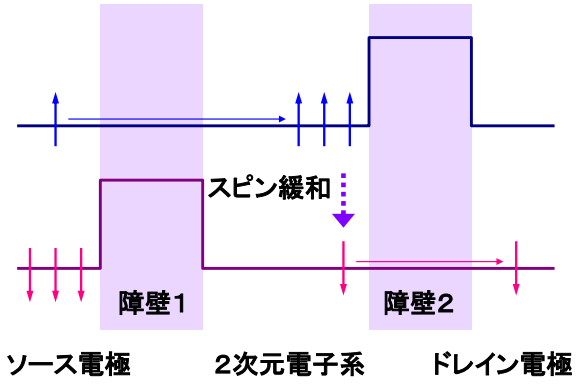


図 4: スピン緩和 FET [9, 10, 11, 12] （文献 [14] より転載）。

スピン FET の中で最も良く知られているのは、Datta-Das が提案したスピン FET [13] である。この FET では、図 3 に示すように、量子井戸によって形成される 2 次元チャネルにゲート電圧を印加して

Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場を変調する。この有効磁場の回りを歳差するスピンの回転角度をゲート電圧により変えることで電流をスイッチングする。一方、前述のスピン緩和 FET は 1 方向のスピン偏極のみを用いて電流をスイッチングするスピン FET で歳差運動は用いない。図 4 に示すように量子井戸に形成される 2 次元チャネルの左右にアップスピン電子のみを通す障壁 1 とダウンスピン電子のみを通す障壁 2 を設置する。スピン緩和が off のときはアップスピン電子は障壁 2 の手前で滞留し電流は流れない。スピン緩和を on にすると滞留していた電子のスピンが反転し障壁 2 も通って電流が流れる。スピン緩和の on/off はゲート電圧により切り替える。

スピン緩和率がゲート電圧によって変化することは実験と理論の両方で確認されている。Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率 $1/\tau_s$ は $1/\tau_s = \Omega_F^2 \tau_F$ （τ_F はフェルミエネルギーでの運動量緩和時間）[1, 2] のように有効磁場 $\mathbf{\Omega}$ の大きさ Ω で表され、Rashba スピン軌道相互作用の場合 $\Omega = (2/\hbar)\alpha k$ により有効磁場が Rashba 係数 α に比例するので、スピン緩和率をスイッチングするには Rashba 係数 α をスイッチングすることになる。この Rashba 係数 α はゲート電圧により制御できることが実験的に実証されている [15, 16, 17]。

理論的には、対称量子井戸の Rashba 係数 α は印加電場 E_z に比例する、即ち $\alpha = a_{\rm so} E_z$（$a_{\rm so}$ は比例係数）であることが示されている（図 5）。したがって Rashba 係数 α の on/off は印加電場 E_z の切り替えにより実現できる。しかし、この対称量子井戸における α のスイッチングには 2 つの課題がある。1 つ目の課題は off での α の値についてで、$\alpha = a_{\rm so} E_z$ の傾き $a_{\rm so}$ のため印加電場 E_z が $E_z = 0$ からずれると α の値を十分に小さくできないことである。実際の量子井戸ではドナー密度等が設計値からどうしてもずれてしまうため、E_z を正確にゼロすることはできない。2 つ目の課題は、on での α の値を大きくするには大きな電場が必要になるということである。

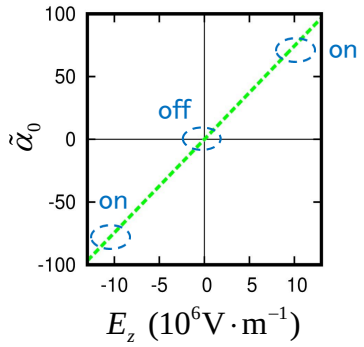


図 5: 対称量子井戸 $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ の基底サブバンドの Rashba 係数 $\tilde{\alpha}_0$（0 は基底サブバンドを表す）の（量子井戸に垂直な）電場 E_z 依存性。対称量子井戸の Rashba 係数は井戸幅や電子密度に依存しない。$\tilde{\alpha}_0 = \alpha_0 a_B^*/(\eta\ \mathrm{Ry}^*)$。$\tilde{\alpha}_0$ が on と off の領域も示した。

上記 1 つ目の課題は、図 6 に示すように、量子井戸の井戸層、障壁層に用いる半導体の組成を調節し $a_{\rm so}$ を消去する方法 [18] を用いて解決できる。傾き $a_{\rm so}$ が小さい場合、印加電場 E_z がゼロから少々ずれ

ても α_0 の値を十分に小さくできる。上記２つ目の課題は、図７に示すように、量子井戸の左右の障壁層に異なる半導体を用いて、界面でのバンドオフセット（バンド端のエネルギー差）を左右で非対称にすること [19] で解決できる。この非対称量子井戸では印加電場がゼロでも対称性が破れているので Rashba 係数 α は有限になり、その値は井戸幅を小さくすることで増大する [19]。このように、２つの課題は個別に解決できる。しかし、小さい Rashba 係数から大きい Rashba 係数への切り替えを１つの素子の中でどのようにして実現するかという課題が残されている。

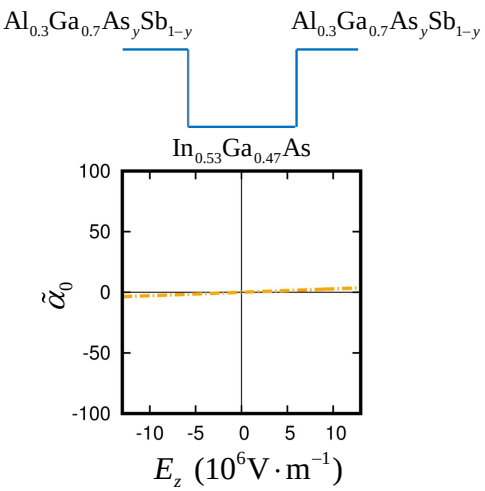


図 6: 対称量子井戸の基底サブバンドの Rashba 係数 $\tilde{\alpha}_0$ の電場 E_z 依存性。Al の割合を調節して $\tilde{\alpha}_0(E_z)$ の傾き $a_{\rm so}$ を抑制した [18]。

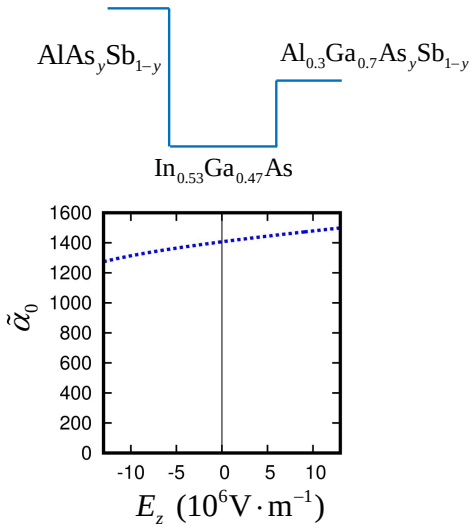


図 7: 非対称量子井戸の基底サブバンドの Rashba 係数 $\tilde{\alpha}_0$ の電場 E_z 依存性。左右の障壁層の Al の割合を大きく変え井戸幅を狭くして電場ゼロでの $\tilde{\alpha}_0$ の値を大きくした。井戸幅は 1.5nm。電子面密度はゼロ。

この課題を解決するために、図 8(a) のように $|\alpha|$ の大きい量子井戸と小さい量子井戸を並べて、電子に井戸間を移動させることを考えた。電子の井戸間移動にはゲート電圧を利用する。電場がゼロの近傍では電子は中央の井戸に局在し、α が off となる。電場を印加して電子を左右の井戸に移動することで、α が on になる。図 8(a) に示す 3 重量子井戸構造において、図 8(b) のように基底サブバンドの Rashba 係数 α_0 が印加電場により、極めて高い on/off 比で、切り替わる。絶対零度においては、on 領域と off 領域で基底サブバンドのみを電子が占有するようにできるので α_0 のスイッチングによりスピン緩和率のスイッチングができる。

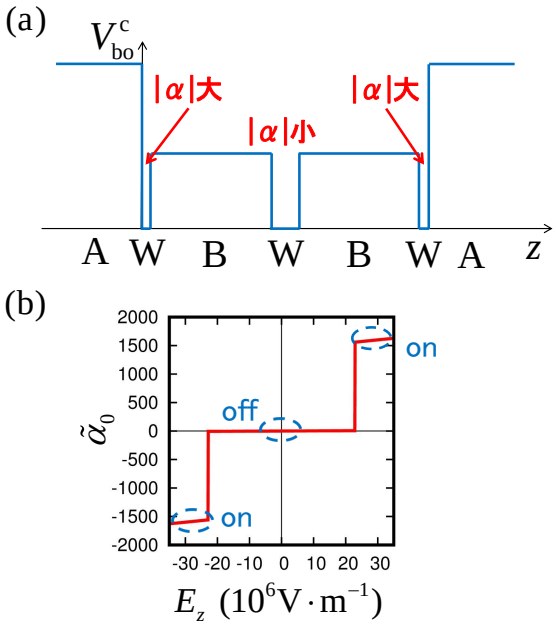


図 8: (a) 3 重量子井戸構造と伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{\rm bo}^{\rm c}(z)$ [20]。(b) 3 重量子井戸構造の基底サブバンドの Rashba 係数 $\tilde{\alpha}_0$ の電場 E_z 依存性。電子面密度はゼロ。中央の井戸の幅は 4.5nm、左右の井戸の幅は 1.5nm、障壁の幅は 20nm。A=$\mathrm{AlAs}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$, B=$\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ $(x = 0.3)$, W=$\mathrm{In}_{0.53}\mathrm{Ga}_{0.47}\mathrm{As}$。$\tilde{\alpha}_0 = \alpha_0 a_B^*/(\eta\ \mathrm{Ry}^*)$。

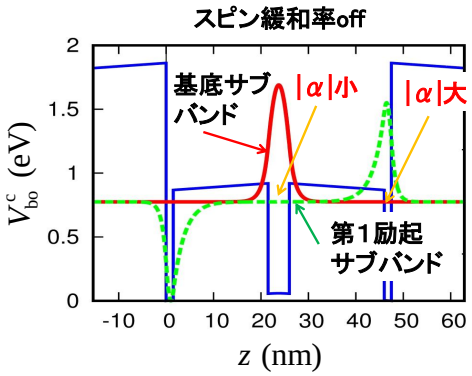


図 9: 電場 $E_z = 0$ での基底サブバンドと第 1 励起サブバンドの波動関数。

一方、有限温度でのスピン緩和率は励起サブバンドの影響を受ける。特にスピン緩和率の off での値は

励起サブバンドによるスピン緩和の影響を大きく受ける。図 8(a) に示す 3 重量子井戸構造では、図 9 に示すように、スピン緩和 off の電場領域において第 1 励起サブバンドの電子は左あるいは右の井戸内に大きな存在確率を持つため $|\alpha|$ が極めて大きく、スピン緩和率の off での値を格段に引き上げてしまう。そのため、スピン緩和率の on/off 比を高めるためには励起サブバンドの影響を低減することが必須である。そこで、第 1 の研究として次の 3 項目を行った。

(1) 3 重量子井戸構造において励起サブバンドの影響を低減するためのガイドラインを作成した。

(2) 励起サブバンドがスピン緩和率に及ぼす影響を評価するために、基底サブバンドのみを考慮した Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率の表式 [1, 2] を、励起サブバンドも考慮した表式に拡張した。

(3) ガイドラインに基づき設計した 3 重量子井戸構造の有限温度でのスピン緩和率を、拡張したスピン緩和率の表式を用いて計算した。

次に、Rashba スピン軌道相互作用とともに Dresselhaus スピン軌道相互作用を考慮した計算を第 2 の研究として行った。Dresselhaus スピン軌道相互作用は、図 10 に示す閃亜鉛鉱構造において最近接原子間を結ぶ線分の中点について空間反転対称性が破れているために生じる。量子井戸中の Dresselhaus

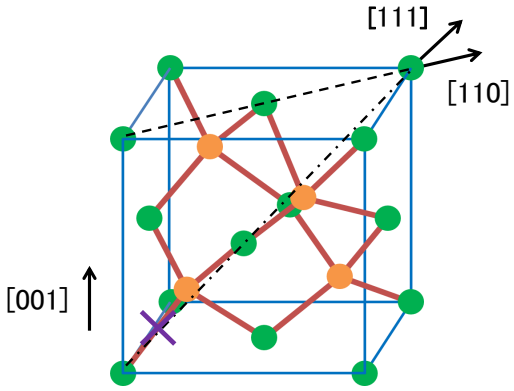


図 10: 閃亜鉛鉱構造と結晶軸の方向。

スピン軌道相互作用は、量子井戸の面直方向の束縛状態に関する（バルクの）Dresselhaus スピン軌道相互作用の期待値であり、面方位により有効磁場の方向や波数依存性が異なる。面方位が (110) である量子井戸において Dresselhaus スピン軌道相互作用により生じる有効磁場は、図 11 に示すように、波数によらず面直方向を向いている。そのため、スピン偏極が (110) 量子井戸の面直方向を向いている場合 Dresselhaus スピン軌道相互作用ではスピン緩和が生じない。したがって面直方向のスピン偏極に対しては、第 1 の研究で考慮する Rashba スピン軌道相互作用によるスピン緩和を抑制するだけでスピン緩和率の off での値を低減できる。

一方面方位が (111) である量子井戸では、Dresselhaus スピン軌道相互作用のうち面内波数について 1 次の項（ 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用）は $H_{\mathrm{D}}^{\mathrm{so}} = \beta(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$ と表され、誘起される有効磁場は Rashba スピン軌道相互作用の場合と方向および波数依存性が等しい。量子井戸の構造が対称である場合 Rashba 係数 α は $\alpha = a_{\mathrm{so}} E_z$ のように印加電場 E_z に比例し、一方 β は電場依存性が小さいた

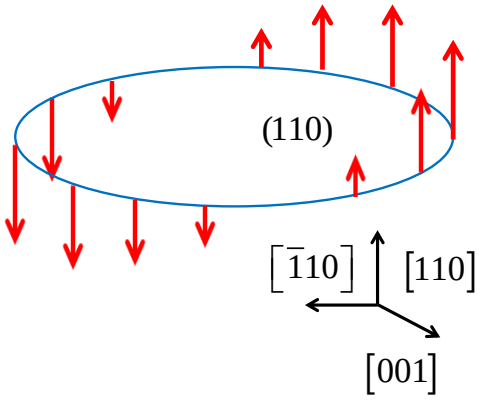


図 11: (110) 量子井戸において Dresselhaus スピン軌道相互作用により生じるフェルミ円上の有効磁場。

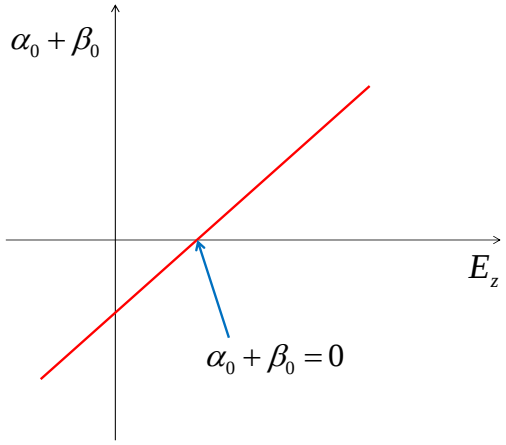


図 12: (111) 量子井戸の基底サブバンドの Rashba 係数 α_0 と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数 β_0 の和 の電場 E_z 依存性。

め、$\alpha+\beta$ の印加電場 E_z 依存性は図 12 のようになり、基底サブバンドにおいて $\alpha_0+\beta_0=0$ となる印加電場 E_z の値が存在する。印加電場 E_z をこの値に設定して、スピン偏極が 3 方向いずれの方向でも Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和を抑制するという理論的提案があり [21, 22, 23]、実験的に実証されている [24, 25, 26, 27, 28]。このようにあらゆる方向でスピン緩和を抑制できれば、スピン緩和率の off での値を低減するために前述のようにスピン偏極の向きを [110] 方向に揃える必要がなくなる。ただし (111) 面方位で $\alpha_0+\beta_0=0$ とすることによりスピン緩和を抑制する場合にも、(110) 面方位で $\alpha_0=0$ とする場合と同様に、$\alpha_0+\beta_0$ の印加電場 E_z に対する傾きが有限であるため（図 12)、印加電場 E_z を正確に $\alpha_0+\beta_0=0$ となるように調整しない限りスピン緩和率の off での値を十分に低減できない。

この課題は、図 13 のように量子井戸を非対称にして印加電場 $E_z=0$ での α_0 の値をノンゼロにすることで β_0 を打ち消すとともに、α_0 の電場依存性を消去することにより解決できる。量子井戸の非対称性は図 13 に示すように障壁層に用いる半導体 $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ の Al の割合を左右の障壁層で異なる値

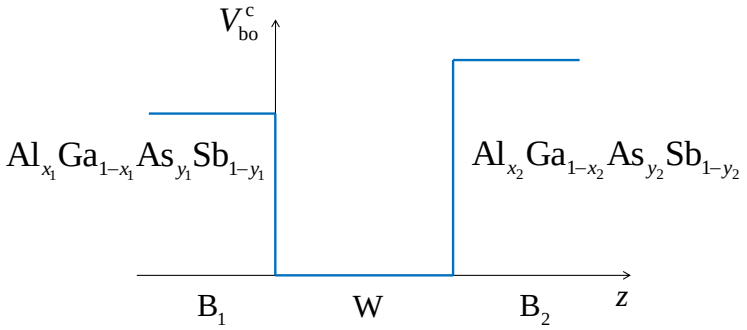


図 13: 障壁層の半導体 $\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ の Al の割合 x が左右の障壁層で異なる非対称量子井戸。

$x_1 \neq x_2$ に設定することにより導入する。x_1 と x_2 を調節することで、$\alpha_0 + \beta_0$ の印加電場 E_z について 0 次の項と 1 次の項の係数を消去することが可能である。この研究ではさらに、このようにして $\alpha_0 + \beta_0$ を抑制した非対称量子井戸と $|\alpha_0 + \beta_0|$ が大きい非対称量子井戸を並べて（図 14 2 重量子井戸構造）第 1 の研究と同様の電子の井戸間移動によるスピン緩和スイッチングの on/off 比を評価する。そこで、第

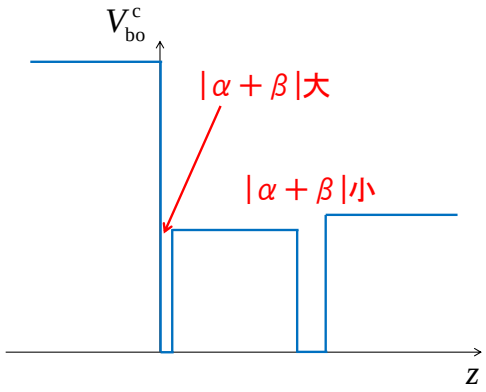


図 14: 2 重量子井戸構造と伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{\mathrm{bo}}^{\mathrm{c}}(z)$ [29]（図の転載は IOP Publishing により許可されている）。

2 の研究では次の 2 項目を行った。

(1) 単一量子井戸において左右の障壁層の Al の割合 x_1 と x_2 を、基底サブバンドの $\alpha + \beta$ を抑制するように決定した。

(2) (1) において決定した量子井戸と $|\alpha_0 + \beta_0|$ の大きい量子井戸を並べた 2 重量子井戸構造について、Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率を有限温度で評価した。

本論文の構成は次の通りである。第 2 章から第 5 章において半導体量子井戸構造におけるスピン緩和の基礎理論を概説する。第 2 章では、密度行列と量子論的 Liouville 方程式による輸送現象の記述につい

て解説し、ボルツマン方程式の衝突項を不純物散乱に対して導出する。第 3 章では、閃亜鉛鉱構造をもつ半導体のバルクにおける伝導帯の電子状態を良く記述できる Kane モデルについて解説する。第 4 章では、閃亜鉛鉱構造をもつ半導体のバルクおよび量子井戸における伝導帯の電子に働く Dresselhaus スピン軌道相互作用と、Rashba 型スピン軌道相互作用について解説する。第 5 章では、電子のスピンの歳差運動と Dyakonov-Perel スピン緩和機構について解説する。以上の基礎理論に基づき、第 6 章では第 1 の研究について記述する。6.3 節では、基底サブバンドのみを考慮したスピン緩和の Dyakonov-Perel 理論を拡張して励起サブバンドも考慮できるスピン緩和率の表式を導出する。6.4 節では計算結果について述べる。まず、3 重量子井戸構造において励起サブバンドの影響を低減するためのガイドラインを 6.4.1 節で設定し、6.4.2 節と 6.4.3 節において、そのガイドラインに基づき設計した 2 つの 3 重量子井戸構造に対して、絶対零度から室温までのスピン緩和率を評価した結果を示す。第 7 章では第 2 の研究について記述する。7.3.1 節では、単一量子井戸における Rashba 型スピン軌道相互作用と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による有効磁場の和を抑制した結果を示す。7.3.2 節においては、2 重量子井戸構造について絶対零度から室温までのスピン緩和率を評価した結果を示す。最後に第 8 章でこの博士論文の研究を総括する。

2　密度行列と量子 Liouville 方程式による輸送現象の記述

本研究で用いる密度行列と量子 Liouville 方程式について説明し、ボルツマン方程式に現れる電子の不純物による散乱を記述する衝突項を導出する。

2.1　密度行列と量子 Liouville 方程式

本節では、密度行列と量子 Liouville 方程式について記す。まず 1 電子系について記す。

次のように、時間に依存しないハミルトニアン H_0 の固有ケット、固有値が分かっているとする。

$$H_0|\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\nu\rangle. \tag{1}$$

その固有ケット $|\nu\rangle$ を基底ケットに選ぶ。すなわち

$$|\psi\rangle = \sum_\nu c_\nu(t)|\nu\rangle. \tag{2}$$

とする。このとき物理量 A の期待値は次式により与えられる。

$$\bar{A} = \langle\psi\,|A|\,\psi\rangle = \sum_{\nu,\nu'} c^*_{\nu'}(t)c_\nu(t)\,\langle\nu'\,|A|\,\nu\rangle = \sum_{\nu,\nu'} c^*_{\nu'}(t)c_\nu(t)A_{\nu'\nu}, \tag{3}$$

ここで、$A_{\nu'\nu} = \langle\nu'|A|\nu\rangle$ である。したがって、物理量 A の期待値の統計平均は、

$$\langle\langle\psi\,|A|\,\psi\rangle\rangle = \sum_{\nu\nu'} A_{\nu'\nu}\,\langle c^*_{\nu'}(t)c_\nu(t)\rangle\,. \tag{4}$$

となる。密度行列を $\rho^{\rm one}_{\nu\nu'} = \langle c_\nu(t)c^*_{\nu'}(t)\rangle$ により定義すると、

$$\langle\langle\psi\,|A|\,\psi\rangle\rangle = \sum_{\nu,\nu'} \rho^{\rm one}_{\nu\nu'}A_{\nu'\nu} = {\rm tr}(\rho^{\rm one}A), \tag{5}$$

と書ける。ここで、$\rho^{\rm one}$ は密度演算子であり、記号 ${\rm tr}(\cdots)$ は $\sum_\nu \langle\nu\,|\cdots|\,\nu\rangle$ の意味である。

また、状態ケットに対するシュレーディンガー方程式より、密度演算子 $\rho^{\rm one}$ がみたす方程式は、

$$i\hbar\frac{d\rho^{\rm one}}{dt} = [H, \rho^{\rm one}]. \tag{6}$$

であることが言える（導出は Appendix B に記す。）。上式を量子 Liouville 方程式と呼ぶ。さらに、規格化条件 $\sum_\nu |c_\nu(t)|^2 = 1$ より

$$ {\rm tr}(\rho^{\rm one}) = \sum_\nu \langle\nu\,|\rho^{\rm one}|\,\nu\rangle = \sum_\nu \rho^{\rm one}_{\nu\nu} = 1. \tag{7}$$

である。

次に多電子系について記す。多電子系の基底ケットについて説明する。 1 電子だけの状態 $|\nu\rangle$ を占有数で表すと、

$$|0\cdots0\ 1\ 0\cdots0\rangle, \tag{8}$$

のように表せる。ここで、上式の ν 番目が 1 で、その他が 0 である。この表記方法で N 電子系の基底ケットを次のように表す。

$$|\boldsymbol{n}\rangle = |\cdots n_\nu \cdots\rangle, \tag{9}$$

ここで、n_ν は 0 または 1 であり、$\sum_\nu n_\nu = N$ である。このとき、N 電子系の状態ケットは次のように表せる。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}} c_{\boldsymbol{n}}(t)|\boldsymbol{n}\rangle, \tag{10}$$

ここで、和は $\sum_\nu n_\nu = N$ をみたす $\boldsymbol{n}$ についてとる。

次に、N 電子系の密度行列について述べる。物理量 A の期待値の統計平均は、次のように書ける。

$$\left\langle\left\langle \Psi \left| \tilde{A} \right| \Psi \right\rangle\right\rangle = \sum_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} \tilde{A}_{\boldsymbol{n}'\boldsymbol{n}} \left\langle c^*_{\boldsymbol{n}'}(t) c_{\boldsymbol{n}}(t) \right\rangle, \tag{11}$$

$$\tilde{A}_{\boldsymbol{n}'\boldsymbol{n}} = \left\langle \boldsymbol{n}' | \tilde{A} | \boldsymbol{n} \right\rangle. \tag{12}$$

多電子系の密度行列を $\tilde{\rho}_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}'} = \left\langle c_{\boldsymbol{n}}(t) c^*_{\boldsymbol{n}'}(t) \right\rangle$ により定義すると、

$$\left\langle\left\langle \Psi \left| \tilde{A} \right| \Psi \right\rangle\right\rangle = \mathrm{Tr}(\tilde{\rho}\tilde{A}), \tag{13}$$

と書ける。ここで、$\tilde{\rho}$ は N 電子系の密度演算子であり、$\mathrm{Tr}(\cdots) = \sum_{\boldsymbol{n}} \langle \boldsymbol{n} | \cdots | \boldsymbol{n} \rangle$ である。また、$\tilde{\rho}$ がみたす方程式は、1 電子系の場合と同じ形式の

$$i\hbar \frac{d\tilde{\rho}}{dt} = [\tilde{H}, \tilde{\rho}]. \tag{14}$$

であり（導出も 1 電子系の場合と同様である。）、規格化条件 $\sum_{\boldsymbol{n}} |c_{\boldsymbol{n}}(t)|^2 = 1$ より

$$\mathrm{Tr}(\tilde{\rho}) = 1. \tag{15}$$

である。

2.2 Kohn - Luttinger の密度行列

本節では、電子間に相互作用がないとして多電子系を取り扱うために Kohn と Luttinger により導入された、Kohn - Luttinger の密度行列について記す。相互作用がない場合は波動関数の反対称化を課すだけである。それにより 1 電子系に近い密度行列を作ることができる。消滅演算子 a_ν 、 生成演算子 $a^\dagger_{\nu'}$ を用いると、このときの N 電子系のハミルトニアン $\tilde{H}$ は、第二量子化の形式で次のように書ける。

$$\tilde{H} = \sum_{\nu,\nu'} H_{\nu'\nu} a^\dagger_{\nu'} a_\nu, \tag{16}$$

$$H_{\nu'\nu} = \langle \nu' | H | \nu \rangle, \tag{17}$$

ここで、H は 1 電子系のハミルトニアンであり、$|\nu\rangle$、$|\nu'\rangle$ は 1 電子系の基底ケットである。N 電子系の基底ケットも

$$|\boldsymbol{n}\rangle = \left(\prod_{\nu\ (n_\nu=1)} a^\dagger_\nu \right) |\boldsymbol{0}\rangle, \tag{18}$$

により表せる。ここで、$|\mathbf{0}\rangle$ は $|0\cdots0\rangle$ の略で真空状態と呼ぶ。このとき、Kohn - Luttinger の密度行列 [30] を次式により定義する。

$$\rho_{\nu\nu'} = \mathrm{Tr}(\tilde{\rho} a^\dagger_{\nu'} a_\nu). \tag{19}$$

物理量 A の期待値の統計平均は、

$$\left\langle \left\langle \Psi \left| \tilde{A} \right| \Psi \right\rangle \right\rangle = \mathrm{Tr}(\tilde{\rho}\tilde{A}) = \mathrm{tr}(\rho A). \tag{20}$$

となる。ここで、ρ は Kohn - Luttinger の密度演算子であり、$\mathrm{tr}(\cdots) = \sum_\nu \langle \nu | \cdots | \nu \rangle$ である（上式と式 (21)、(22) の導出は Appendix C に記す。）。また、ρ が満たす方程式は、

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]. \tag{21}$$

となる。式 (20)、(21) は、1 電子系（式 (5)、(6)）や多電子系（式 (13)、(14)）と同じ形式である。規格化条件は

$$\mathrm{tr}(\rho) = \sum_\nu \rho_{\nu\nu} = \mathrm{Tr}(\tilde{\rho} \sum_\nu a^\dagger_\nu a_\nu) = N. \tag{22}$$

となり、1 電子系や多電子系と異なっている。ここで上式より、

$$\rho_{\nu\nu} = \mathrm{Tr}(\tilde{\rho} a^\dagger_\nu a_\nu) = |\nu\rangle \text{ における平均電子数.} \tag{23}$$

となり、$\rho_{\boldsymbol{kk}}$ を（空間的には一様な）分布関数 $f(\boldsymbol{k}, t)$ として用いることができる。

2.3 衝突項の導出

まず前節の式 (21) を相互作用表示を用いて表す。1 電子系のハミルトニアンは $H = H_0 + V(t)$（$V(t)$ は不純物ポテンシャル）であるとし、積分収束のための条件として $t \to -\infty$ のとき $V(t) \to 0$ となり、他の t では $V(t)$ は一定であるとする。相互作用表示を用い、相互作用表示の ρ と $V(t)$ を次のように定義する。

$$\rho_I(t) = U^\dagger(t)\rho(t)\,U(t), \tag{24}$$

$$V_I(t) = U^\dagger(t)V(t)\,U(t), \tag{25}$$

$$U(t) = \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right). \tag{26}$$

式 (24) の両辺を t で微分し、式 (21) を用いると次式が得られる。

$$i\hbar \frac{d\rho_I(t)}{dt} = [V_I(t), \rho_I(t)]. \tag{27}$$

上式を $-\infty$ から t まで積分し、次式が得られる。

$$\rho_I(t) = \rho_I(-\infty) + \int_{-\infty}^{t} dt' \frac{1}{i\hbar}[V_I(t'), \rho_I(t')]. \tag{28}$$

次に上式を式 (27) に代入すると、次式が得られる。

$$\frac{d\rho_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[V_I(t), \rho_I(-\infty)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{t} dt' [V_I(t), [V_I(t'), \rho_I(-\infty)]] + O(V_I^3). \tag{29}$$

H_0、$V(t)$ を具体的に次のようにする。不純物ポテンシャル $V(t)$ は、各不純物による短距離力のポテンシャルの和で表せるとする。$V(t)$ 中の δ は最後に $\delta \to +0$ とする。

$$H_0 = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}, \tag{30}$$

$$V(t) = \sum_{i=1}^{N_{\rm imp}} u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)e^{\delta t}. \tag{31}$$

衝突項の導出をするために、次の設定と仮定を適用する。まず設定は次式の通りである。

$$\langle \boldsymbol{k}|V(t)|\boldsymbol{k}\rangle = (1/\Omega)\int d\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}V(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = (1/\Omega)\int d\boldsymbol{r}V(t) = 0, \tag{32}$$

ここで、$|\boldsymbol{k}\rangle$ は自由電子モデルの固有ケット、Ω は系の体積である。この設定は、ポテンシャルエネルギーの原点を定数シフトすることにより満たされる。また、衝突項は不純物配置に依存しないと仮定し、不純物位置について平均をとる。

衝突項の導出過程は次の通りである。導出の詳細は Appendix D に記す。式 (29) の両辺について、自由電子モデルの固有ケット $|\boldsymbol{k}\rangle$ の期待値をとると、次式のようになる。

$$\langle \boldsymbol{k}|\frac{d\rho_I(t)}{dt}|\boldsymbol{k}\rangle = J_1 + J_2, \tag{33}$$

$$J_1 = \frac{1}{i\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}'(\neq\boldsymbol{k})}\left(\langle \boldsymbol{k}|V_I|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|\rho_I|\boldsymbol{k}\rangle - \langle \boldsymbol{k}|\rho_I|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|V_I|\boldsymbol{k}\rangle\right), \tag{34}$$

$$J_2 = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{t} dt' \left\langle \boldsymbol{k}|V_I(t)V_I(t')\rho_I - V_I(t)\rho_I V_I(t') - V_I(t')\rho_I V_I(t) + \rho_I V_I(t')V_I(t)|\boldsymbol{k}\right\rangle, \tag{35}$$

ここで、$\rho_I \equiv \rho_I(-\infty)$ である。上式の J_1 中の V_I の行列要素（式 (32) より $\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}$ となる。）は、不純物位置について平均をとるとゼロになり、$J_1 = 0$ となる。次に、J_2 中の $A \equiv \langle \boldsymbol{k}|V_I(t)V_I(t')\rho_I|\boldsymbol{k}\rangle$ について考える。

$$A = \langle \boldsymbol{k}|V_I(t)V_I(t')\rho_I|\boldsymbol{k}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}''}\langle \boldsymbol{k}|V_I(t)|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|V_I(t')|\boldsymbol{k}''\rangle\langle \boldsymbol{k}''|\rho_I|\boldsymbol{k}\rangle \tag{36}$$

である。$U^\dagger(t)$、$U(t)$ をそれぞれブラ、ケットに作用させた結果かかる t や t' の指数関数については、今は考えない。

$$\langle \boldsymbol{k}|V(t)|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|V(t')|\boldsymbol{k}''\rangle = \sum_{i,j}\exp[i(-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_i + i(-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}'')\cdot\boldsymbol{r}_j]u_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}u_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}''}\frac{e^{\delta(t+t')}}{\Omega^2} \tag{37}$$

となり、右辺の $i \neq j$ の項の $\exp[i(-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_i]$ は、$\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$ により $\boldsymbol{r}_i$ について平均をとるとゼロになり、$i = j$ の項の $\exp[i(-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'')\cdot\boldsymbol{r}_i]$ は $\boldsymbol{r}_i$ について平均をとると $\boldsymbol{k}'' = \boldsymbol{k}$ のときのみゼロでない値になる。このように計算を進めると、

$$A = \sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2\exp\left[\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{i\hbar}(t-t')\right]f(\boldsymbol{k},t) \tag{38}$$

が得られる。ここで、式 (28) より $V(t)$ の 0 次において成り立つ式 $\rho_I(t) = \rho_I(-\infty)$ を用いた。他の項についても同様に計算すると、

$$J_2 = \sum_{\boldsymbol{k}'}\left[-W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k},t) + W_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}f(\boldsymbol{k}',t)\right]. \tag{39}$$

$$W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} = \frac{2\pi}{\hbar}|\left\langle \boldsymbol{k}'\right|V(t=0)\left|\boldsymbol{k}\right\rangle|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}). \tag{40}$$

が得られる。一方

$$\langle \boldsymbol{k}|\frac{d\rho_I}{dt}|\boldsymbol{k}\rangle = \langle \boldsymbol{k}|\frac{d\rho}{dt}|\boldsymbol{k}\rangle \tag{41}$$

であり、$\langle \boldsymbol{k}|\rho|\boldsymbol{k}\rangle = \rho_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}} = f(\boldsymbol{k},t)$ を用いて式 (33) の左辺を $(\partial f/\partial t)_{\rm c}$ とすると、衝突項は次式のようになる。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm c} = \sum_{\boldsymbol{k}'} \left[-W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k},t) + W_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} f(\boldsymbol{k}',t)\right], \tag{42}$$

ここで、A.2 節の式 (246) に記したようなフォノン散乱の場合の、パウリの排他律を表す $1-f$ は存在しない。これは、相互作用がない電子系では一般に、$d\rho_I/dt$ の V_I についての展開式は ρ_I の 1 次式であるためである [30]。

また、式 (40) 中の $|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2$ は式 (37) より次式のように書けるので、単位時間当たりの遷移確率 $W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}$ は 1 不純物による単位時間当たりの遷移確率に比例する。

$$|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2 = \sum_i \frac{|u_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}|^2}{\Omega^2} = N_{\rm imp}|\langle \boldsymbol{k}'|u|\boldsymbol{k}\rangle|^2. \tag{43}$$

3 Kane モデル

閃亜鉛鉱構造の半導体の伝導帯の電子状態を良く記述できる Kane モデルについて記す。

3.1 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論は、ブリルアンゾーンのある点 $\boldsymbol{k}_0$ 近傍の特定のエネルギーバンドの波動関数とエネルギー固有値を摂動論により求める方法である。以下では、簡単のため $\boldsymbol{k}_0 = \boldsymbol{0}$ とする。結晶中の電子のシュレーディンガー方程式は次式のように書ける。

$$\begin{aligned} H_0\Psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) &= \varepsilon_{n\boldsymbol{k}}\Psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}). \\ H_0 &= \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U_{\text{lattice}}. \end{aligned} \tag{44}$$

ここで、n はバンド指標、$\boldsymbol{k}$ は波数ベクトル、m は自由電子の質量、U_{lattice} は結晶の周期ポテンシャルである。

まず、縮退がない場合（エネルギーバンド n のエネルギー固有値に近い値に他のバンド n' が存在しない場合）について述べる。上式に次式のブロッホ関数の表式を代入すると、

$$\Psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}). \tag{45}$$

次式が得られる。

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \frac{\hbar\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{m} + \frac{\hbar^2k^2}{2m} + U_{\text{lattice}}\right] u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{n\boldsymbol{k}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}). \tag{46}$$

上式において、次の項を摂動と考えて $\boldsymbol{k}$ における波動関数とエネルギー固有値を摂動論により求める。

$$H' = \frac{\hbar\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{m}. \tag{47}$$

式 (46) において $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ とした無摂動のシュレーディンガー方程式は次式のようになる。

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U_{\text{lattice}}\right] u_{n\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{n\boldsymbol{0}}u_{n\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}). \tag{48}$$

$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ で $\partial\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}/\partial\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ とし、上式の解の波動関数 $u_{n\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r})$、エネルギー固有値 $\varepsilon_{n\boldsymbol{0}}$ を用いて、$\boldsymbol{k}$ での波動関数、エネルギー固有値をそれぞれ 1 次、2 次まで求めると、次式のようになる。

$$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = u_{n\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}) + \frac{\hbar}{m}\sum_{n'\neq n}\frac{\langle u_{n'\boldsymbol{0}}|\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|u_{n\boldsymbol{0}}\rangle}{\varepsilon_{n\boldsymbol{0}} - \varepsilon_{n'\boldsymbol{0}}}u_{n'\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}). \tag{49}$$

$$\varepsilon_{n\boldsymbol{k}} = \varepsilon_{n\boldsymbol{0}} + \frac{\hbar^2k^2}{2m} + \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2\sum_{n'\neq n}\frac{|\langle u_{n\boldsymbol{0}}|\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|u_{n'\boldsymbol{0}}\rangle|^2}{\varepsilon_{n\boldsymbol{0}} - \varepsilon_{n'\boldsymbol{0}}}. \tag{50}$$

GaAs など III-V 族化合物半導体では、n が伝導帯の s 軌道のとき、n' として価電子帯の p 軌道をとる。つまり、伝導帯の波動関数に価電子帯の波動関数が混じる。またこのとき、$\frac{\hbar\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/m}{\varepsilon_g} \ll 1$（$\varepsilon_g$ はエネルギーギャップ、あるいはバンドギャップ）が、$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 近似が成立する必要条件である。ここで、必要条件 $\frac{\hbar\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/m}{\varepsilon_g} \ll 1$ は次のように書き直せる。$\hat{\boldsymbol{p}}$ の s 軌道と p 軌道のバンド間行列要素は、2 つの軌道の変動は

原子スケールなので $\hbar/a$（a は格子定数）程度であり、また ε_g は同様に軌道の原子スケールの変動から、原子軌道一次結合法より $\varepsilon_g \approx -2H_{12} \approx \hbar^2/ma^2$（$H_{12}$ はハミルトニアンの隣り合う混成軌道間の行列要素）程度であり、$ka \ll 1$ となる。

また、

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n\boldsymbol{k}} &= \varepsilon_{n\boldsymbol{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \\ \frac{1}{m^*} &= \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2 k^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle u_{n\boldsymbol{0}} | \boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | u_{n'\boldsymbol{0}} \rangle|^2}{\varepsilon_{n\boldsymbol{0}} - \varepsilon_{n'\boldsymbol{0}}}. \end{aligned} \tag{51}$$

と書け、m^* を電子の有効質量と呼ぶ。上式より、上記のように n が s 軌道のとき、n' として価電子帯の p 軌道をとると、$\varepsilon_p < \varepsilon_s$ なので、価電子帯が混じることにより有効質量は自由電子の質量より小さくなることが分かる。

次に、縮退がある場合について述べる。閃亜鉛鉱構造をとる物質に多く見られる、伝導帯の底が s 軌道、価電子帯の頂上が p 軌道からできていて、伝導帯の底も価電子帯の頂上も $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ にある場合を例に説明する。3.2 節で説明するスピン軌道相互作用を無視すると、価電子帯の頂上は 3 つの p 軌道の波動関数 $u_x = xf(r)$、$u_y = yf(r)$、$u_z = zf(r)$（$f(r)$ は距離 r のみによる関数）が 3 重に縮退している。この 3 つの波動関数に加えて伝導帯の底の s 軌道の波動関数 $u_s(\boldsymbol{r})$ も基底関数にとる。このとき次式が成り立つ。

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U_{\text{lattice}} \right] u_s(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{\text{c}} u_s(\boldsymbol{r}), \tag{52}$$

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U_{\text{lattice}} \right] u_i(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{\text{v}} u_i(\boldsymbol{r}) \quad (i = x, y, z), \tag{53}$$

ここで、ε_{c} は伝導帯の底、ε_{v} は価電子帯の頂上のエネルギーである。$\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{0}$ での $u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ $(n = s, x, y, z)$ を次のように展開する。

$$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\ell = s,x,y,z} a_{n\ell}(\boldsymbol{k}) u_\ell(\boldsymbol{r}). \tag{54}$$

つまり、上記の 4 つの基底関数についてハミルトニアン

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U_{\text{lattice}} + H' + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{55}$$

のハミルトニアン行列を求め、そのハミルトニアン行列の対角化を行えば、伝導帯と価電子帯の 4 つのバンドのエネルギーバンド構造が求まる。

3.2 スピン軌道相互作用

電磁場がある場合のディラック方程式にパウリ近似を施すことにより、シュレーディンガー方程式に対する相対論的補正としてスピン軌道相互作用が加わり、次のハミルトニアンが得られる。ただし、スピンによらない項を無視し、磁場 $B = \boldsymbol{0}$、ベクトルポテンシャルも $A = \boldsymbol{0}$ としている。

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) + H_{\text{so}}, \tag{56}$$

$$H_{\text{so}} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot [(\boldsymbol{\nabla} U) \times \hat{\boldsymbol{p}}]. \tag{57}$$

ここで、$H_{\rm so}$ がスピン軌道相互作用項であり、U は静電ポテンシャルに電子の電荷をかけたもの、c は光速、$\boldsymbol{\sigma}$ はスピン演算子で $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ である。$H_{\rm so}$ は、スピン $\boldsymbol{\sigma}$ と軌道 $\hat{\boldsymbol{p}}$ が相互作用しているので、スピン軌道相互作用（SOI）という。$U(\boldsymbol{r})$ の勾配がゼロでないとき、つまり $\boldsymbol{\nabla} U \neq \boldsymbol{0}$ のとき、スピン軌道相互作用が働く。

次に原子におけるスピン軌道相互作用について 2 つのことを記す。その 1 つ目として、原子におけるスピン軌道相互作用の古典論的モデルを説明する。図 15 のように、電子が電荷 $+Ze$ の原子核から距離 r の円周上を速度 $\boldsymbol{v}$ で回っているとする。そのとき、電子が静止した座標系では、原子核が電子から距離 r の円周上を速度 $-\boldsymbol{v}$ で回っているように見える。このとき、原子核の運動による円形電流は電子の位置に磁場を作る。電子のスピンの持つ磁気モーメントはその磁場と相互作用し、電子はゼーマンエネルギーを持つ。これが原子におけるスピン軌道相互作用の古典論的理解である。

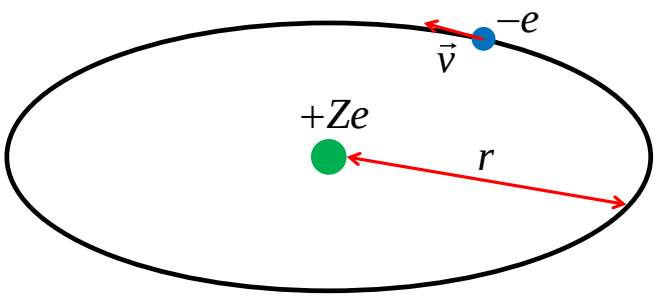


図 15: 原子におけるスピン軌道相互作用の古典論的モデル。

2 つ目として、スピン軌道相互作用による原子の p 軌道のエネルギーの分裂について説明する。今、軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}$ とスピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ の和 $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}$ も角運動量演算子の性質を満たすため、$\hat{\boldsymbol{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ とすると、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値は $j(j+1)\hbar^2 (|\ell - s| \leq j \leq \ell + s)$ であり、$\hat{J}_z$ の固有値は $j\hbar, (j-1)\hbar, \cdots, -j\hbar$ の $2j+1$ 個をとり得る。したがって、原子の p 軌道では $\ell = 1$ で $s = 1/2$ であるから j は $1/2$ と $3/2$ をとり得る。ここで、ポテンシャルが中心力ポテンシャル $U(\boldsymbol{r}) = U(r)$ の場合、スピン軌道相互作用項は $\boldsymbol{\nabla} U = \frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{dU}{dr}$ と $\hat{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ を用いて書き直すと

$$H_{\rm so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2r}\frac{dU}{dr}\frac{2}{\hbar}\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}} = \frac{1}{4m^2c^2r}\frac{dU}{dr}(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2). \tag{58}$$

となる。上式より、スピン軌道相互作用を考慮すると、6 重縮退していた p 軌道が $j = 3/2$ と $j = 1/2$ のそれぞれ 4 重と 2 重に分裂することが言える。このときのエネルギー差を $\Delta_{\rm so}$ とする。ここで、中心力ポテンシャルの場合、s 軌道 $(\ell = 0)$ の電子にはスピン軌道相互作用は働かない。

3.3 スピン軌道相互作用を考慮した $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論（Kane モデル）

スピン軌道相互作用を考慮したハミルトニアンは、次式のように書ける

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{\nabla}U)\times\hat{\boldsymbol{p}}]\,, \tag{59}$$

ここで、U は U_{lattice} の添え字を省略している。上式に次式のブロッホ関数の表式を代入すると、

$$\Psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}). \tag{60}$$

次式が得られる。

$$\begin{aligned}
&[\tilde{H} + W(\boldsymbol{k})]u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{n\boldsymbol{k}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \qquad (61)\\
&\tilde{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{\nabla}U)\times\hat{\boldsymbol{p}}]\,,\\
&W(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{\hbar}{4mc^2}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{U}\right) + \frac{\hbar^2k^2}{2m}.
\end{aligned}$$

ここからは 3.1 節と同様に、閃亜鉛鉱構造をとる物質に多く見られる、伝導帯の底が s 軌道、価電子帯の頂上が p 軌道からできていて、伝導帯の底も価電子帯の頂上も $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ にある場合を例に説明する。$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論では、次式の $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ でのシュレーディンガー方程式

$$\tilde{H}u_{\ell\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_{\ell\boldsymbol{0}}u_{\ell\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}). \tag{62}$$

の固有関数 $u_{\ell\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r})$（$\ell$ は、スピンも考慮して s 軌道の 2 つと p 軌道の $j=3/2$ の 4 つと $j=1/2$ の 2 つの 1 から 8 までの値をとる）を基底関数にして、$\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}$ での $u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ $(n=1,2,\cdots,8)$ を次のように展開する。

$$u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\ell=1}^{8} a_{n\ell}(\boldsymbol{k})u_{\ell\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}). \tag{63}$$

このように $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 理論では、伝導帯の波動関数に価電子帯の波動関数が混じる。そのために伝導帯の電子にもスピン軌道相互作用が働く。上記の 8 つの基底関数についてハミルトニアン $\tilde{H}+W(\boldsymbol{k})$ の行列を求め、そのハミルトニアン行列の対角化を行えば、スピン軌道相互作用も考慮した、伝導帯と価電子帯の 8 つのバンドのエネルギーバンド構造が求まる。

3.4 Kane モデルでの伝導帯と価電子帯の基底ケット

この節では、3.3 節で述べた 8 つの基底関数（基底ケット）を具体的に求める。$\boldsymbol{r}-$ 表示したものが 3.1 節で述べた $u_s(\boldsymbol{r})$、$u_x(\boldsymbol{r})$、$u_y(\boldsymbol{r})$、$u_z(\boldsymbol{r})$ になる、4 つのケット $|S\rangle$、$|X\rangle$、$|Y\rangle$、$|Z\rangle$ を導入する。すなわち

$$\langle\boldsymbol{r}|S\rangle = u_s(\boldsymbol{r}), \tag{64}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|X\rangle = u_x(\boldsymbol{r}), \tag{65}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|Y\rangle = u_y(\boldsymbol{r}), \tag{66}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|Z\rangle = u_z(\boldsymbol{r}). \tag{67}$$

以上の４つのケットからできた次の４つのケットを仮の基底ケットにとる。

$$i|S\rangle, \tag{68}$$
$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle + i|Y\rangle), \tag{69}$$
$$|Z\rangle, \tag{70}$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle - i|Y\rangle). \tag{71}$$

式 (62) を満たす、（基底ケットに用いる）固有ケットを得るために、ハミルトニアン $H(\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0})$ 中の $U(\boldsymbol{r})$ を $U(\boldsymbol{r}) = U(r)$ と近似したときの

$$\tilde{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(r) + \frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dU}{dr}\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}. \tag{72}$$

のハミルトニアン行列の対角化を行う（固有ケットを求める）。そのとき、スピンも考慮した仮の基底ケットとして式 (68) から (71) のそれぞれにアップスピン状態 $|\alpha\rangle$ またはダウンスピン状態 $|\beta\rangle$ をかけたものを用いる。対角化する行列は 2×2 の行列に減らせて、固有ケットとして次のものが得られる。

$\lvert j, j_z\rangle$	
$\lvert 1/2, +1/2\rangle$	$i\lvert S\rangle \otimes \lvert\alpha\rangle$
$\lvert 1/2, -1/2\rangle$	$i\lvert S\rangle \otimes \lvert\beta\rangle$
$\lvert 3/2, +3/2\rangle$	$-\sqrt{1/2}(\lvert X\rangle + i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert\alpha\rangle$
$\lvert 3/2, +1/2\rangle$	$-\sqrt{1/6}(\lvert X\rangle + i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert\beta\rangle + \sqrt{2/3}\lvert Z\rangle \otimes \lvert\alpha\rangle$
$\lvert 3/2, -1/2\rangle$	$+\sqrt{1/6}(\lvert X\rangle - i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert\alpha\rangle + \sqrt{2/3}\lvert Z\rangle \otimes \lvert\beta\rangle$
$\lvert 3/2, -3/2\rangle$	$+\sqrt{1/2}(\lvert X\rangle - i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert\beta\rangle$
$\lvert 1/2, +1/2\rangle$	$-\sqrt{1/3}(\lvert X\rangle + i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert\beta\rangle - \sqrt{1/3}\lvert Z\rangle \otimes \lvert\alpha\rangle$
$\lvert 1/2, -1/2\rangle$	$-\sqrt{1/3}(\lvert X\rangle - i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert\alpha\rangle + \sqrt{1/3}\lvert Z\rangle \otimes \lvert\beta\rangle$

3.5 Kane のハミルトニアン

前節に記した８つの基底ケットを用いた、III-V 族化合物半導体（閃亜鉛鉱構造をとる）について Kane により提出されたハミルトニアン行列 $\mathrm{H}_{8\times 8}$ を以下に記す [31]。

$$\mathrm{H}_{8\times 8} = \begin{pmatrix}
\frac{\hbar^2k^2}{2m} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \sqrt{\frac{1}{6}}Pk_- & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_- \\
0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \sqrt{\frac{1}{2}}Pk_- & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_+ & \sqrt{\frac{1}{3}}Pk_z \\
-\sqrt{\frac{1}{2}}Pk_- & 0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\varepsilon_g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & -\sqrt{\frac{1}{6}}Pk_- & 0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\varepsilon_g & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\sqrt{\frac{1}{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & 0 & 0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\varepsilon_g & 0 & 0 & 0 \\
0 & \sqrt{\frac{1}{2}}Pk_+ & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\varepsilon_g & 0 & 0 \\
-\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_- & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\varepsilon_g-\triangle_{\mathrm{so}} & 0 \\
-\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_+ & \sqrt{\frac{1}{3}}Pk_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2k^2}{2m}-\varepsilon_g-\triangle_{\mathrm{so}}
\end{pmatrix} \tag{73}$$

ここで、

$$P = -i\frac{\hbar}{m}\langle S|\hat{p}_x|X\rangle, \tag{74}$$

$$k_\pm = k_x \pm ik_y. \tag{75}$$

であり、P は Kane の行列要素と呼ぶ。ここで、閃亜鉛鉱構造をとる半導体の伝導帯、価電子帯のエネルギーバンド構造の概念図は図 16 の通りである。一方、Kane のハミルトニアンによるエネルギーバンド構造では、重い正孔バンドの有効質量が正になるなど価電子帯は正確ではないが、伝導帯は正しく記述できる。

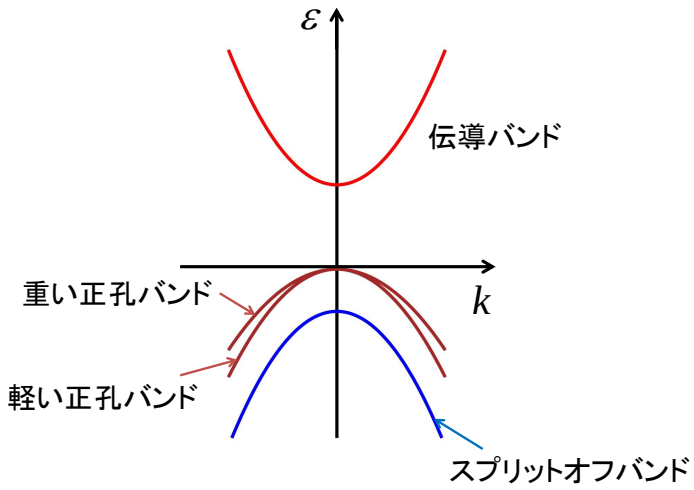


図 16: 閃亜鉛鉱構造の半導体の伝導帯、価電子帯の概念図。

上記の P について記す。伝導帯下端の有効質量は、式 (51) において n' として価電子帯の p 軌道のみをとると次のように書ける。

$$\frac{1}{m_c^*} \approx \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2}\frac{|\langle S|\hat{p}_x|X\rangle|^2}{\varepsilon_g} \tag{76}$$

$$= \frac{1}{m} + \frac{2}{\hbar^2}\frac{P^2}{\varepsilon_g}. \tag{77}$$

したがって、P は伝導帯下端の有効質量と関係している。しかし、実際には p 軌道よりもっと離れた軌道からの寄与もあるため、P と伝導帯下端の有効質量との関係は複雑になる。

4　半導体量子井戸構造のスピン軌道相互作用

まず、本研究の舞台である量子井戸構造について説明する。続いて、過去に論争のあった半導体量子井戸構造のスピン軌道相互作用について解説する。

4.1　量子井戸構造

量子井戸構造とは、z 方向に閉じ込められ、その方向には自由に動けない 2 次元電子ガスが現れる構造である。電子は、異なる半導体とのヘテロ界面での伝導帯の底のずれ（伝導帯のバンドオフセット）の障壁で閉じ込められ、障壁に垂直な方向（z 方向）は量子化され、障壁に平行な方向には自由に動ける 2 次元電子ガスを形成する。

異なる半導体との良質のヘテロ接合を得るには、接合させる 2 つの半導体の格子定数の違いが小さい、格子整合が必要である。例えば、GaAs と AlAs の格子定数はそれぞれ 5.653 Å、5.660 Å であり格子定数の違いが小さい。そのため、初期のヘテロ接合の研究では、GaAs と $Al_xGa_{1-x}As(x=0 \sim 1)$ を用いた構造が盛んに使用された。格子定数の違いが大きい半導体間では、3 元合金を用いて格子整合をとることができる。例えば、InGaAs（InAs の格子定数は 6.058 Å）と InP（格子定数は 5.869 Å）などの組み合わせで格子整合をとることが可能である。さらに 4 元合金を含めると組み合わせは非常に多くなる。

図 17 に示すように量子井戸にはタイプ I とタイプ II がある。タイプ I では伝導帯の底はバンドギャップの小さい半導体 B で極小となり、価電子帯の頂上も半導体 B で極大となるため、励起された電子と正孔はこの領域に存在する。一方、タイプ II では伝導帯の底は半導体 B で極小となり、価電子帯の頂上は半導体 A で極大となる。つまり、伝導帯が極小となる領域と価電子帯が極大となる領域が異なっている。ここで、伝導帯が極小となる領域を井戸層、伝導帯が極大となる領域を障壁層と呼ぶ。したがって、タイプ I とタイプ II の違いを、井戸層における価電子帯の電子に働くポテンシャルが凸か凹かと言うこともできる。障壁層が十分に厚いと、電子はこの障壁層により井戸層に閉じ込められ、ヘテロ界面に垂直な z 方向には量子化されてサブバンドを構成する。

量子井戸で 2 次元電子ガスを実現するには、例えばドナーをドープしなければならない。ドナーから励起した電子は、井戸層内で 2 次元電子ガスを形成する。移動度について考えると、井戸層にもドナーがドープされている場合は、2 次元電子ガスは井戸層のドナーによる不純物散乱の影響で、特に低温において移動度が低下する。そこで、障壁層のみにドナーをドープする、さらには障壁層の井戸層に近い領域にはドナーをドープしないスペーサー領域を設けることが行われている。

この節の最後に、量子井戸中の 2 次元電子ガスの波動関数、エネルギー固有値、そして状態密度について記す。障壁の高さは無限大、井戸層は $0 \leq z \leq L$ であるとすると、z 方向のシュレーディンガー方程式は次式の通りである。

$$\left[\frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + V(z)\right]|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle, \tag{78}$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| < L/2 \\ \infty & |z| \geq L/2. \end{cases} \tag{79}$$

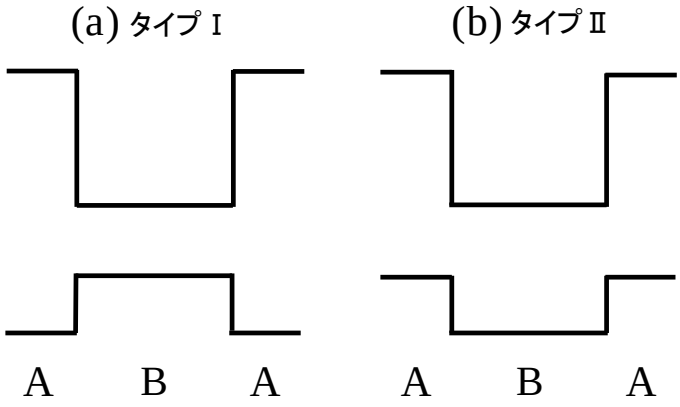


図 17: タイプ I とタイプ II 量子井戸。

ここで、m^* は有効質量であり、結晶ポテンシャルの影響はその中に入っている。この近似方法を有効質量近似と呼ぶ。x 方向、y 方向には周期 $\sqrt{S}$ の周期的境界条件を課すとすると、xy 方向も含めた波動関数 $\langle \boldsymbol{r}|n\boldsymbol{k}\rangle$（$\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$ は電子の xy 面内波数ベクトル）、エネルギー固有値 $\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}$、状態密度 $D(\varepsilon)$ は、次式の通りである（図 18 も参照）。

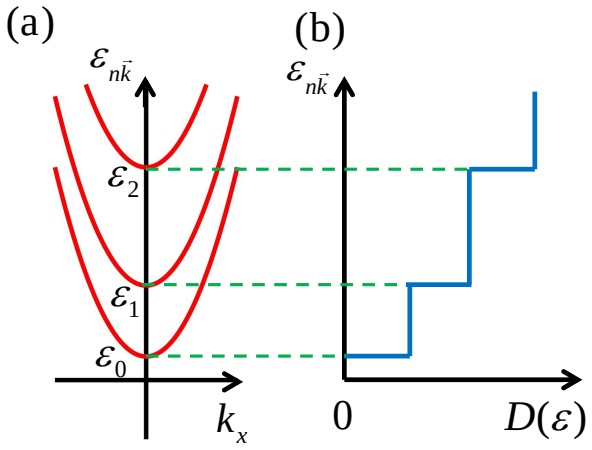


図 18: 量子井戸中の電子のエネルギー分散関係 ($k_y = 0$) と状態密度の概略図。

$$\langle \boldsymbol{r}|n-1\ \boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}}\exp\left[i(k_x x + k_y y)\right]\varphi_{n-1}(z), \tag{80}$$

$$\varphi_{n-1}(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi z}{L} & n\text{: positive odd number} \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi z}{L} & n\text{: positive even number.} \end{cases} \tag{81}$$

$$\varepsilon_{n\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2+k_y^2)+\varepsilon_{n-1}, \tag{82}$$

$$\varepsilon_{n-1} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi}{L}n\right)^2, \tag{83}$$

$$D(\varepsilon) = \frac{S}{2\pi}\frac{2m^*}{\hbar^2}\times(\text{サブバンドの数}). \tag{84}$$

ここで ε_{n-1} $(n=1,2,3,\cdots)$ は z 方向の量子化されたエネルギー固有値である。それぞれのバンドをサブバンドと呼ぶ。なお、Appendix E に左右の障壁の高さが有限で等しい場合と異なる場合のエネルギー固有値の解法を記した。

4.2 化合物半導体における有効磁場

波数が $\boldsymbol{k}$ で、パウリ行列 σ_z の固有値が σ である固有状態のエネルギー固有値を $\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}$ で表すとき、時間反転対称性がある場合 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}=\varepsilon_{-\boldsymbol{k}-\sigma}$ が成り立ち、空間反転対称性がある場合 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}=\varepsilon_{-\boldsymbol{k}\sigma}$ が成り立つ。この 2 つの等式の導出は Appendix F に記した。さらにこの 2 つの等式から、時間反転対称性と空間反転対称性がある場合は $\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}=\varepsilon_{\boldsymbol{k}-\sigma}$ が成り立ち、このときスピン縮退していると言う。また、時間反転対称性があっても空間反転対称性がない場合、一般に $\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}\neq\varepsilon_{\boldsymbol{k}-\sigma}$ であり、このときスピン分裂していると言う。スピン分裂は、スピンと磁場との相互作用を表す、ゼーマン項の形式で書くことができ、

$$H_{\rm so} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{85}$$

となり、$\boldsymbol{\Omega}(\hat{\boldsymbol{k}})$ を有効磁場と呼び、その向きと大きさは $\boldsymbol{k}$ に依存する。ここで、$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ では時間反転対称性より $\varepsilon_{\boldsymbol{0}\sigma}=\varepsilon_{-\boldsymbol{0}-\sigma}$ となり、スピン分裂しないので $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0})=\boldsymbol{0}$ となる。

次に、閃亜鉛鉱構造の III-V 族化合物半導体の Dresselhaus スピン軌道相互作用について記す。図 19 に示すように、III-V 族化合物半導体は最近接の III 族の原子と V 族の原子を結ぶ線分の中点において空間反転対称性がない。そのため有効磁場が働き、それを Dresselhaus スピン軌道相互作用（Dresselhaus SOI）と呼ぶ [32]。Dresselhaus SOI $H_{\rm so}^{\rm D}$ は次のように書ける。ただし、x、y、z 軸はそれぞれ [100]、[010]、[001] 方向にとっている。

$$H_{\rm so}^{\rm D} = \gamma\boldsymbol{\Omega}'_{\rm D}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{86}$$

$$\Omega'_{{\rm D},x} = k_x(k_y^2-k_z^2),\ \Omega'_{{\rm D},y}=k_y(k_z^2-k_x^2),\ \Omega'_{{\rm D},z}=k_z(k_x^2-k_y^2). \tag{87}$$

Dresselhaus SOI によるスピン分裂は、3 章で述べた 8 バンドモデルでは起こらず、14 バンドモデルでは起こる。ここで 14 バンドモデルとは、基底として 3 章の 8 バンドに伝導帯の 6 つの p バンドを加えたモデルである（図 20 参照）。その 14 バンドモデルではスピン分裂の大きさを表す γ は次のように書け

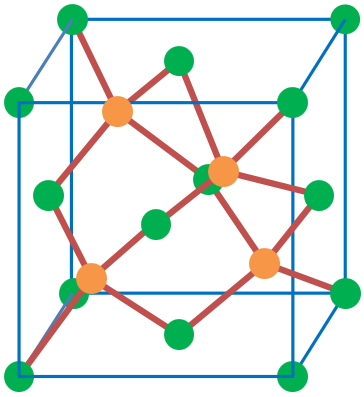


図 19: 閃亜鉛鉱構造の模式図。

る [33]。

$$\gamma = \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)}, \tag{88}$$

$$\gamma^{(0)} = \frac{4}{3} P_0 P_1 Q \frac{\varepsilon_{\rm g}^0 \varepsilon_{\rm g}^1 - \varepsilon_{\rm g}^{0\rm s} \varepsilon_{\rm g}^{1\rm s}}{\varepsilon_{\rm g}^0 \varepsilon_{\rm g}^1 \varepsilon_{\rm g}^{0\rm s} \varepsilon_{\rm g}^{1\rm s}}, \tag{89}$$

$$\gamma^{(1)} = -\frac{4}{9} \bar{\triangle} Q \frac{P_0^2 (2\varepsilon_{\rm g}^{1\rm s} + \varepsilon_{\rm g}^1) - P_1^2 [2(\varepsilon_{\rm g}^0 + \varepsilon_{\rm g}^1) + \varepsilon_{\rm g}^{0\rm s}]}{\varepsilon_{\rm g}^0 \varepsilon_{\rm g}^1 \varepsilon_{\rm g}^{0\rm s} \varepsilon_{\rm g}^{1\rm s}}, \tag{90}$$

ここで、$\varepsilon_{\rm g}^0$、$\varepsilon_{\rm g}^1$、$\varepsilon_{\rm g}^{0\rm s}$、$\varepsilon_{\rm g}^{1\rm s}$ は図 20 中に与えた。

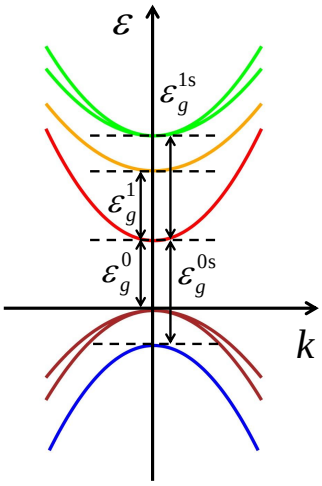


図 20: 閃亜鉛鉱構造の半導体の 14 バンドの模式図。

P_0、P_1、Q、$\bar{\Delta}$ の定義は次の通りである [34, 35]。

$$P_0 = -i\frac{\hbar}{m}\langle S|\hat{p}_x|X\rangle, \tag{91}$$

$$P_1 = -i\frac{\hbar}{m}\langle S|\hat{p}_x|X'\rangle, \tag{92}$$

$$Q = -i\frac{\hbar}{m}\langle X|\hat{p}_y|Z'\rangle, \tag{93}$$

$$\bar{\Delta} = -i\frac{3\hbar}{4m^2c^2}\langle X|\left(\frac{\partial U}{\partial z}\hat{p}_x - \frac{\partial U}{\partial x}\hat{p}_z\right)|Z'\rangle, \tag{94}$$

ここで、$|S\rangle$、$|X\rangle$ はそれぞれ式 (64)、(65) で与えたものと同じで、$|X'\rangle$、$|Z'\rangle$ はそれぞれ伝導帯における p 軌道の、式 (65) の $|X\rangle$、式 (67) の $|Z\rangle$ に対応するものである。

4.3 量子井戸における有効磁場

量子井戸に閃亜鉛鉱構造の半導体を用いた場合、Dresselhaus スピン軌道相互作用が働く。ここで注意すべきことは、（バルクの）$\boldsymbol{\Omega}'_{\rm D}$ を量子井戸の面直方向の束縛状態について期待値をとるため、量子井戸の面方位によって期待値 $\bar{\boldsymbol{\Omega}}'_{\rm D}$ の波数依存性が異なることである。

また、量子井戸の成長軸方向に電圧を印加することにより、空間反転対称性が破れて有効磁場が生じる。この有効磁場は Rashba 有効磁場と呼ばれている。Rashba 有効磁場を伝導帯の電子が静電ポテンシャル $U_{\rm es}(z)$(δ ドーピングにより生じる閉じ込めポテンシャルと電圧の印加により生じるポテンシャルの和) により量子井戸に閉じ込められている場合に対して議論する。このとき z 方向のシュレーディンガー方程式は次式のようになる。

$$\left[\frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + U_{\rm es}(z)\right]|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle, \tag{95}$$

ここで、$|n\rangle$ は固有ケットで ε_n $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ はエネルギー固有値である。$U_{\rm es}(z)$ によるスピン軌道相互作用は、η を有効結合定数として次式のようになる。

$$H_{\rm so} = -\frac{\eta}{\hbar}[(\boldsymbol{\nabla}U_{\rm es}(z)) \times \hat{\boldsymbol{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$$= \eta(\nabla_z U_{\rm es}(z))(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \tag{96}$$

$$\eta = \frac{P^2}{3}\left[\frac{1}{\varepsilon_g^2} - \frac{1}{(\varepsilon_g + \triangle_{\rm so})^2}\right]. \tag{97}$$

ここで、ε_g と $\triangle_{\rm so}$ はそれぞれ、図 16 において $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ での伝導バンドと重い正孔、軽い正孔とのエネルギーギャップ、$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ での重い正孔、軽い正孔とスプリットオフバンドのエネルギーギャップである。このとき、基底状態 $|0\rangle$ の η による変化を無視し、η の最低次で有効磁場 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})$ を求めると、

$$\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k}) = (2/\hbar)(\eta\langle 0|(\nabla_z U_{\rm es}(z))|0\rangle k_y, -\eta\langle 0|(\nabla_z U_{\rm es}(z))|0\rangle k_x, 0). \tag{98}$$

となる。ここで、式 (95) を満たす束縛固有状態 $|n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ に対して、$U_{\rm es}(z)$ が z について非対称であっても

$$\langle 0|(\nabla_z U_{\rm es}(z))|0\rangle = 0. \tag{99}$$

が成り立つ。なぜなら、束縛状態の電子に働く力はつり合っているはずだからである [1]。すると上式より、有効磁場 $\boldsymbol{\Omega}(\hat{\boldsymbol{k}})$ はゼロであることが導かれる [37, 38]。そこで次節では、バンドオフセットによって閉じ込められている場合を考える。

4.4 量子井戸における Rashba 有効磁場

この節では、Calsaverini et al. [39] の記述に沿って量子井戸構造における Rashba 有効磁場を導く。図 21(a) は閃亜鉛鉱構造をもつ半導体のバルクの 8 バンドの模式図であり、図 21(b) はタイプ I 量子井戸のバンドオフセットの模式図である。まず、3.5 節の式 (73) において次の置き換えをして、量子井戸構造

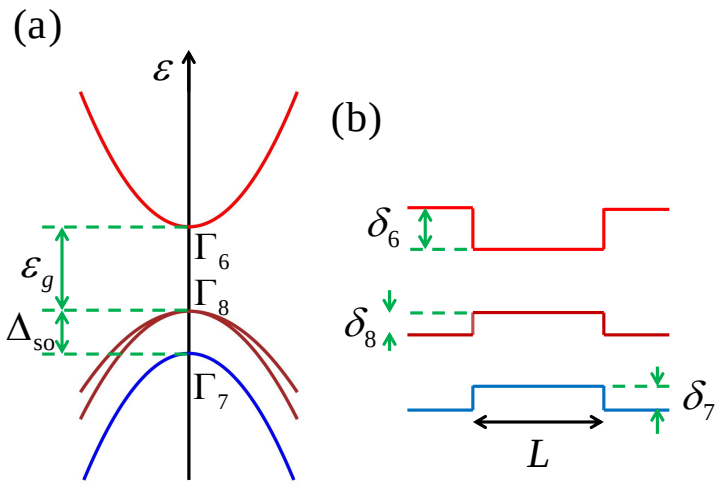


図 21: (a) 閃亜鉛鉱構造の半導体のバルクの 8 バンドの模式図（Γ_6 は伝導バンドの底の S 軌道、Γ_8 は重い正孔バンド、軽い正孔バンドの頂上の p 軌道、Γ_7 はスプリットオフバンドの頂上の p 軌道を表す）。(b) タイプ I 量子井戸のバンドオフセットの模式図。

の Kane モデル（ハミルトニアン行列）を得る。

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\rm es}(z) + h_6(z) \ \ (\equiv E_6), \tag{100}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_g \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\rm es}(z) + h_8(z) - \varepsilon_g \ \ (\equiv E_8), \tag{101}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_g - \triangle_{\rm so} \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\rm es}(z) + h_7(z) - \varepsilon_g - \triangle_{\rm so} \ \ (\equiv E_7), \tag{102}$$

ここで、$k^2 = k_{\parallel}^2 + k_z^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ であり、$V_{\rm es}(z)$ は静電ポテンシャル（Appendix G 参照）で、電子間の相互作用やゲート電圧によるポテンシャル、障壁層に変調ドープしイオン化したドナーによるポテンシャルを含んでいる。また $h_i(z)$ は

$$h_i(z) = \delta_i h(z), \ \ i = 6, 7, 8 \tag{103}$$

[1] 式 (95) のハミルトニアンを $\hat{H}$ とすると、$[\hat{p}_z, \hat{H}] = -i\hbar(\nabla_z U_{\rm es})$ が成り立つ。したがって、$\left\langle n|[\hat{p}_z, \hat{H}]|n\right\rangle = \langle n|\hat{p}_z|n\rangle\,(\varepsilon_n - \varepsilon_n) = 0$ より、$\langle n|\nabla_z U_{\rm es}|n\rangle = 0$ が得られる [36]。

であり、$h(z)$ は次元のない、幅が L で、深さが 1 である、井戸の形を表す関数である。δ_i $(i = 6, 7, 8)$ はバンドオフセットである（図 21(b) の場合 δ_7 と δ_8 は負）。

次に、上記の式 (100)、(101)、(102) の置き換えにより得られた 8×8 の行列を伝導帯の電子についての 2×2 の行列に folding down する。導出は Appendix H を参照のこと。得られた 2×2 のハミルトニアン行列は次の通りである。

$$
\begin{aligned}
H &= H_{\rm QW} I + \eta_{\rm w}(z)\,(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)\,, && (104)\\
H_{\rm QW} &= \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\rm sc}(z), && (105)\\
\frac{1}{m^*} &= \frac{1}{m} + \frac{2P^2}{3\hbar^2}\left(\frac{2}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_g + \triangle_{\rm so}}\right), && (106)\\
V_{\rm sc}(z) &= \delta_6 h(z) + V_{\rm es}, && (107)\\
\eta_{\rm w}(z) &= \eta_{\rm bo}\frac{dh(z)}{dz} + \eta\frac{dV_{\rm es}(z)}{dz}, && (108)\\
\eta_{\rm bo} &= \frac{P^2}{3}\left[\frac{\delta_8}{(\varepsilon_g)^2} - \frac{\delta_7}{(\varepsilon_g + \triangle_{\rm so})^2}\right], && (109)\\
\eta &= \frac{P^2}{3}\left[\frac{1}{(\varepsilon_g)^2} - \frac{1}{(\varepsilon_g + \triangle_{\rm so})^2}\right]. && (110)
\end{aligned}
$$

式 (108) の第 1 項は量子井戸のバンドオフセットによるスピン軌道相互作用を、第 2 項は静電ポテンシャルによるスピン軌道相互作用を与える。スピン軌道相互作用項に式 (104) のように $(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$ が現れるものを Rashba 型スピン軌道相互作用と言う。このとき、$|n\rangle$ を束縛状態として、次式で得られる α_n を Rashba 係数と呼ぶ。

$$\alpha_n = \langle n|\eta_{\rm w}(z)|n\rangle. \tag{111}$$

ハミルトニアンが次式で与えられる場合（ただし $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$）、

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \tag{112}$$

エネルギー固有値と固有状態は次の通りである。

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_\pm &= \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) \mp \alpha\sqrt{k_x^2 + k_y^2}, && (113)\\
|\psi_{\boldsymbol{k}}^+\rangle &= |\boldsymbol{k}\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ -ie^{i\theta_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix}, && (114)\\
|\psi_{\boldsymbol{k}}^-\rangle &= |\boldsymbol{k}\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -ie^{i\theta_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix}, && (115)
\end{aligned}
$$

ここで、$|\psi_{\boldsymbol{k}}^+\rangle$ と $|\psi_{\boldsymbol{k}}^-\rangle$ のプラスとマイナスは、$\varepsilon_\pm$ のプラスとマイナスに対応していて、$\theta_{\boldsymbol{k}}$ は $\boldsymbol{k}$ の k_x 軸との成す角である。また、$|\boldsymbol{k}\rangle$ は波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}(= (\hat{k}_x, \hat{k}_y) = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)/\hbar)$ の固有ケットである。スピン演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の $|\psi_{\boldsymbol{k}}^+\rangle$ や $|\psi_{\boldsymbol{k}}^-\rangle$ についての期待値は、次式のようになる。

$$
\begin{aligned}
\langle\psi_{\boldsymbol{k}}^+|\boldsymbol{\sigma}|\psi_{\boldsymbol{k}}^+\rangle &= (-\sin\theta_{\boldsymbol{k}}, \cos\theta_{\boldsymbol{k}}, 0) && (116)\\
\langle\psi_{\boldsymbol{k}}^-|\boldsymbol{\sigma}|\psi_{\boldsymbol{k}}^-\rangle &= (\sin\theta_{\boldsymbol{k}}, -\cos\theta_{\boldsymbol{k}}, 0) && (117)
\end{aligned}
$$

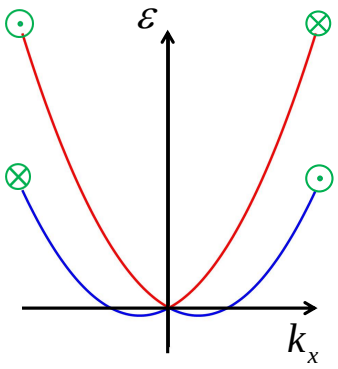


図 22: Rashba スピン軌道相互作用が働く 2 次元電子系のエネルギーバンド構造の模式図。向きを表す記号はスピンの期待値の向きを表す。青線と赤線はそれぞれ $|\psi_{\boldsymbol{k}}^{+}\rangle$ と $|\psi_{\boldsymbol{k}}^{-}\rangle$ を表す。

エネルギーバンド構造は次の図 22 の通りである。

この節では、8 バンドの Kane ハミルトニアンに $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 近似を施して、伝導帯の電子に働く Rashba 有効磁場を導出した。この $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 近似により得られるさまざまなヘテロ構造における Rashba 係数 α は、実験結果、強束縛のモデルによる計算結果と良く合うことがいくつかの論文 [16, 17, 40, 41, 42, 43, 44] において示されている。

5　スピンの歳差運動と緩和

Datta-Das のスピン FET やスピン緩和 FET において利用する、スピンの歳差運動と緩和について説明する。

5.1　スピンの歳差運動

磁場中にスピンがあるとき、スピンは歳差運動（首振り運動）をする。以下でハイゼンベルクの運動方程式を用いてスピンの歳差運動を導く。スピン演算子を $\hat{\boldsymbol{S}}$ とし、ハミルトニアンを $H = \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}$ とおく（ハミルトニアンの残りの項がスピン演算子と可換の場合、このようにおける。）。スピン演算子のハイゼンベルグ表示は次のようになる。

$$\hat{\boldsymbol{S}}(t) = e^{iHt/\hbar} \hat{\boldsymbol{S}} e^{-iHt/\hbar}. \tag{118}$$

ハイゼンベルクの運動方程式により、$\hat{\boldsymbol{S}}(t)$ の時間発展は次の方程式で記述される。

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{S}}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{S}}(t), H]. \tag{119}$$

ここで、スピン演算子の成分の交換関係より、次式が成り立つ。

$$[\hat{\boldsymbol{S}}(t), H] = e^{iHt/\hbar}[\hat{\boldsymbol{S}}, H]e^{-iHt/\hbar} = i\hbar e^{iHt/\hbar}(\boldsymbol{\Omega} \times \hat{\boldsymbol{S}})e^{-iHt/\hbar} = i\hbar \boldsymbol{\Omega} \times \hat{\boldsymbol{S}}(t). \tag{120}$$

したがって、式 (119) は次式のようになる。

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{S}}(t)}{dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \hat{\boldsymbol{S}}(t). \tag{121}$$

さらにスピン演算子の期待値の統計平均を $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ と表すと、次式が成り立つ。

$$\frac{d\langle \boldsymbol{S} \rangle}{dt} = \boldsymbol{\Omega} \times \langle \boldsymbol{S} \rangle . \tag{122}$$

つまり、$\langle \boldsymbol{S} \rangle$ は $\boldsymbol{\Omega}$ と $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ の両方に垂直な方向に運動する。すなわち歳差運動する。$\boldsymbol{\Omega}$ の向きに z 軸をとり $\boldsymbol{\Omega} = (0, 0, \Omega)$ とし、$t = 0$ で $\langle \boldsymbol{S} \rangle = (S_0, 0, S_{z0})$ とすると、時刻 t では

$$\langle S_x \rangle = S_0 \cos \Omega t, \ \langle S_y \rangle = S_0 \sin \Omega t, \ \langle S_z \rangle = S_{z0}. \tag{123}$$

となる（図 23 参照）。

5.2　スピン緩和の Dyakonov-Perel 機構

相互作用のない多電子系のスピンのダイナミクスを考える。$[\hat{\boldsymbol{S}}, H] = 0$ ($\boldsymbol{\Omega} = 0$) ならば

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{S}}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{S}}(t), H] = \boldsymbol{0}. \tag{124}$$

となり、$\boldsymbol{S}$ は保存し、スピンの情報が維持される、波数 $\boldsymbol{k}$ の向きにスピンの情報を伝達できる。$\boldsymbol{\Omega}$（外部磁場）がある場合も、前節に記したように $\boldsymbol{\Omega}$ の回りにスピンが歳差運動するだけで $t = 0$ でのスピン

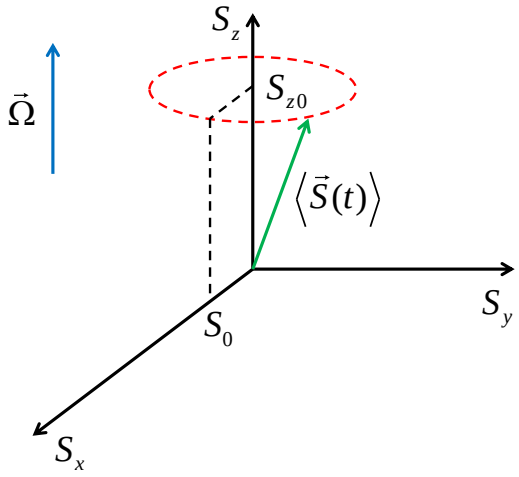


図 23: スピンの歳差運動の模式図。

の情報は失われない。波数 $\boldsymbol{k}$ に依存する $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})$（有効磁場）があり、不純物散乱（$\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}'$）があるときは、有効磁場が $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k}) \to \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k}')$ と変化するので $t = 0$ でのスピンの情報は失われていく。

1 章にも記した、スピン軌道相互作用に起因するスピン緩和の機構である、Dyakonov-Perel 機構と Elliott-Yafet 機構について記す。Dyakonov-Perel 機構 [1, 2, 45] とは、スピンが有効磁場の回りを微小な角度だけ歳差運動し、さらに不純物散乱を受けて有効磁場（の向き）が変わりその回りをスピンが微小な角度だけ歳差運動し、ということを繰り返してスピンが緩和する機構を言う（図 24 参照）。そのため、$\Omega\tau \ll 1$（Ω は有効磁場の大きさで、τ は運動量緩和時間）の場合に適用できる。一方、Elliott-Yafet 機構

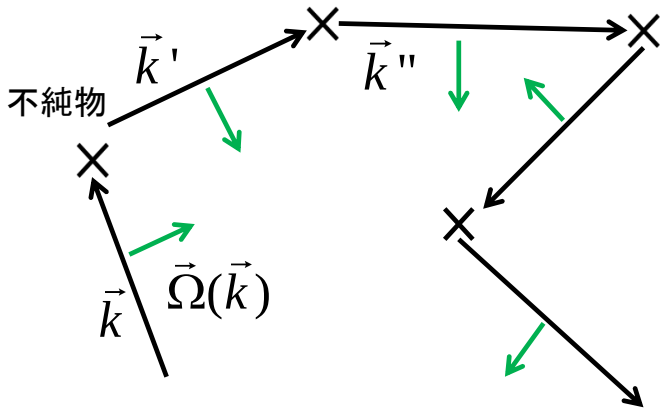


図 24: Dyakonov-Perel 機構 (有効磁場の不純物散乱による変化) の概略図（図 1 を再掲）

とは、$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 項により $\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{0}$ である伝導帯の電子の波動関数には（$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ である）価電子帯の電子の波動関

数が混じり、($\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ である) 価電子帯の電子の波動関数はスピン軌道相互作用によりアップスピン状態とダウンスピン状態が混じるため、$\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}$ である伝導帯の電子の波動関数には反対向きのスピンの成分が少し混じることになり、非磁性体の不純物による散乱によってスピンが反転する機構を言う [7, 8, 46, 47]。量子井戸におけるスピン緩和には、たくさんの理論的 [48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58]、実験的研究 [59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74] がある。電子をドープした量子井戸におけるスピン緩和の主要な機構は Dyakonov-Perel 機構である [75, 76]。

では、2 次元電子系に Rashba スピン軌道相互作用が働いていて不純物散乱がある場合の Dyakonov-Perel 機構によるスピン緩和を、2.3 節と同様に Kohn-Luttinger の密度行列 [30] を用いて導く。

ハミルトニアンを次のように仮定する。

$$
\begin{aligned}
H &= H_0 + V(t), && (125)\\
H_0 &= \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2+k_y^2) + H_{\rm so}, && (126)\\
H_{\rm so} &= \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma} = \alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), && (127)\\
V(t) &= \sum_{i=1}^{N_{\rm imp}} u(x-x_i, y-y_i)e^{\delta t}, && (128)
\end{aligned}
$$

ここで、α は Rashba 係数、$N_{\rm imp}$ は 2 次元電子系中の不純物の総数であり、$V(t)$ 中の δ は最後に $\delta\to+0$ とする。このとき、多電子系のスピンの z 成分の和の統計平均は次式のように書ける。

$$
\langle S_z\rangle = {\rm tr}(\rho S_z) = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\langle\boldsymbol{k}\sigma|\rho S_z|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\langle\boldsymbol{k}\sigma|\rho|\boldsymbol{k}\sigma\rangle\,\frac{\hbar}{2}\sigma. \qquad (129)
$$

ここで、ρ は Kohn-Luttinger の密度行列である。また $|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ は、波数が $\boldsymbol{k}$ でパウリ行列 σ_z の固有値が σ である基底ケットであり、H_0 中の $H_{\rm so}$ を無視したときの H_0 の固有ケットである。2.2 節の式 (21)、すなわち次式が ρ の時間発展を記述する方程式である。

$$
i\hbar\frac{d\rho}{dt} = [H,\rho]. \qquad (130)
$$

相互作用表示を用いる。すなわち、

$$
\begin{aligned}
\rho_I(t) &= U^\dagger(t)\rho(t)\,U(t), && (131)\\
V_I(t) &= U^\dagger(t)V(t)\,U(t), && (132)\\
U(t) &= \exp\left(\frac{H_0 t}{i\hbar}\right). && (133)
\end{aligned}
$$

式 (131) の両辺を t で微分し、式 (130) を用いると次式が得られる。

$$
i\hbar\frac{d\rho_I}{dt} = U^\dagger\left(i\hbar\frac{d\rho}{dt} - [H_0,\rho]\right)U = U^\dagger[V,\rho]U = [V_I,\rho_I] \qquad (134)
$$

上式を $-\infty$ から t まで積分すると次式が得られる。

$$
\rho_I(t) = \rho_I(-\infty) + \int_{-\infty}^{t} dt'\,\frac{1}{i\hbar}[V_I(t'),\rho_I(t')]. \qquad (135)
$$

次に上式を式 (134) に代入すると次式が得られる。

$$\frac{d\rho_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[V_I(t), \rho_I(-\infty)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{t} dt'[V_I(t), [V_I(t'), \rho_I(-\infty)]] + O(V_I^3). \tag{136}$$

ここで 2.3 節では、$\langle \boldsymbol{k}|d\rho_I/dt|\boldsymbol{k}\rangle = \langle \boldsymbol{k}|d\rho/dt|\boldsymbol{k}\rangle$ が成り立っているため、ρ_I の時間発展の方程式を用いて衝突項の導出を行った。しかし、ここでは $\langle \boldsymbol{k}|[H_0, \rho]|\boldsymbol{k}\rangle \neq 0$ のため、ρ の時間発展の方程式を用いて議論する。その ρ の時間発展の方程式とは、式 (134) と上式から得られる次式である。

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho] + U(t)\frac{d\rho_I}{dt}U^\dagger(t) = \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho] + C_1 + C_2, \tag{137}$$

$$C_1 = U\frac{1}{i\hbar}[V_I, \rho_I(-\infty)]U^\dagger, \tag{138}$$

$$C_2 = U\left(-\frac{1}{\hbar^2}\right)\int_{-\infty}^{t} dt'[V_I(t), [V_I(t'), \rho_I(-\infty)]]U^\dagger. \tag{139}$$

上式の両辺を $\langle \boldsymbol{k}|$ と $|\boldsymbol{k}\rangle$ で挟んで、ρ の時間発展の方程式から

$$f_{\boldsymbol{k}} \equiv \langle \boldsymbol{k}|\rho|\boldsymbol{k}\rangle\,. \tag{140}$$

についての時間発展の方程式を導く。ここで、次の 2 つの設定と 1 つの仮定をする。

設定 1 ：$\langle \boldsymbol{k}|V|\boldsymbol{k}\rangle = 0$, ポテンシャルを定数シフトすることで満たされる。

設定 2 ：Dyakonov − Perel の理論 [1, 2, 48] にしたがい、C_1、C_2において $H_{\rm so}$を無視する。

仮定 1 ：スピンダイナミクスは不純物配置に依存しないとし、不純物位置について平均をとる。

また、次のように表記する。

$$f_{\boldsymbol{k}} \equiv \langle \boldsymbol{k}|\rho|\boldsymbol{k}\rangle\,,\ (\because \langle \sigma'|f_{\boldsymbol{k}}|\sigma\rangle = \langle \boldsymbol{k}\sigma'|\rho|\boldsymbol{k}\sigma\rangle) \tag{141}$$

$$\langle \boldsymbol{k}|[H_0, \rho]|\boldsymbol{k}\rangle = \langle \boldsymbol{k}|[H_{\rm so}, \rho]|\boldsymbol{k}\rangle = [R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}], \tag{142}$$

$$R_{\boldsymbol{k}} \equiv \langle \boldsymbol{k}|H_{\rm so}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{143}$$

ここで、式 (142) において $H_{\rm so}$ は波数を変えないことを用いている。2.3 節や Appendix D と同様に評価すると、次式が得られる。

$$\frac{df_{\boldsymbol{k}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}] + \sum_{\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}\left(-f_{\boldsymbol{k}} + f_{\boldsymbol{k}'}\right), \tag{144}$$

$$W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} = \frac{2\pi}{\hbar}|\left\langle \boldsymbol{k}'\right|V(t=0)\left|\,\boldsymbol{k}\right\rangle|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}). \tag{145}$$

次に、式 (144) の $f_{\boldsymbol{k}}$ の時間発展方程式を用いて、Dyakonov-Perel スピン緩和機構のスピン緩和率を求める。スピン緩和率とはスピン緩和時間 τ_s の逆数で、次式により定義される。

$$\frac{d\left\langle S_z\right\rangle}{dt} = -\frac{\left\langle S_z\right\rangle}{\tau_s}. \tag{146}$$

式 (129)、(146) と次式を用い、

$$\frac{d\langle S_z\rangle}{dt} = \mathrm{tr}\left(\frac{d\rho}{dt}S_z\right) = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle \sigma \left| \frac{df_{\boldsymbol{k}}}{dt} \right| \sigma \right\rangle \frac{\hbar}{2}\sigma. \tag{147}$$

次の仮定をすると、

仮定 2 ：$W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}$は $\boldsymbol{k}'$の $\boldsymbol{k}$ から測った角度θの偶関数である。

$k_{\mathrm{B}}T \ll \varepsilon_F$（$\varepsilon_F$ はフェルミエネルギー）かつ $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \ll \varepsilon_F$ の場合、

$$\frac{1}{\tau_s} = \Omega_F^2 \tau_F. \tag{148}$$

となる（導出の詳細は Appendix I 参照)。つまり、歳差が速いとき、運動量緩和が遅いとき、スピン緩和は速くなる。

6 Rashba スピン軌道相互作用による Dyakonov-Perel スピン緩和のスイッチング

この章において、本論文の第 1 の目的である、Rashba スピン軌道相互作用による Dyakonov-Perel スピン緩和の on/off 比向上を目指した理論的研究について記す。

6.1 序論

スピントロニクスの分野において、多くのスピン FET が提案され探究されてきた [75, 77]。その中で Datta-Das により提案されたスピン FET [13]（図 25 参照）は、もっとも広範囲にわたって研究されてきた。ここで、Datta-Das スピン FET とは、2 次元電子系において Rashba スピン軌道相互作用 [3, 4, 5, 6]

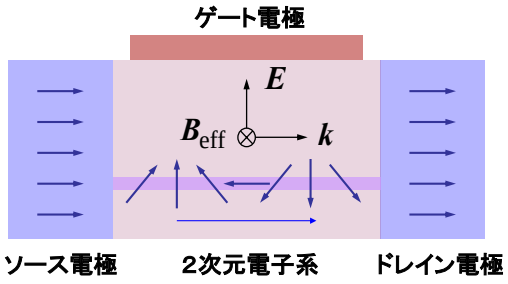


図 25: Datta-Das のスピン FET [13] （文献 [14] より転載。図 3 を再掲。）。

により誘発される有効磁場 $\boldsymbol{B}_{\rm eff}$ の回りの電子のスピンの歳差運動を利用するものである。Rashba スピン軌道相互作用は $\alpha(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x)$ と書ける。ここで、σ_x と σ_y はパウリ行列、k_x と k_y は波数、α は Rashba スピン軌道相互作用の強さを表す Rashba 係数である。このスピン FET の実現には、スピンの歳差運動を維持するために少なくとも 2 つの方向についてスピン緩和を抑制しなければならない。一方、スピン緩和 FET と呼ばれる、もう一つのスピン FET が幾つかの論文で提案されている [9, 10, 11, 12]（図 26 参照）。そのスピン緩和 FET は、Datta-Das スピン FET とは対照的に一つの方向（2 次元電子系が形成される平面に垂直な方向）のスピン偏極のみを用い、それゆえ一つの方向についてのみスピン緩和を抑制すれば良いという利点がある。

スピン緩和 FET は、スピン緩和率（スピン緩和時間の逆数）を高いレベルと低いレベルの間で切り替えることにより、電流を on/off する。スピン緩和率のスイッチングの方法は、単一で対称な量子井戸における Rashba 係数 α のゲート電圧依存性を利用している [9, 10, 11, 12]。それは実験的に実証されている [15, 16, 17]、ゲート電圧により生じる量子井戸に垂直な電場 E_z との $\alpha = a_{\rm so}E_z$ という関係である。ここで、$a_{\rm so}$ は井戸と障壁の半導体の構成に依存する比例係数である。Dyakonov-Perel 機構では、

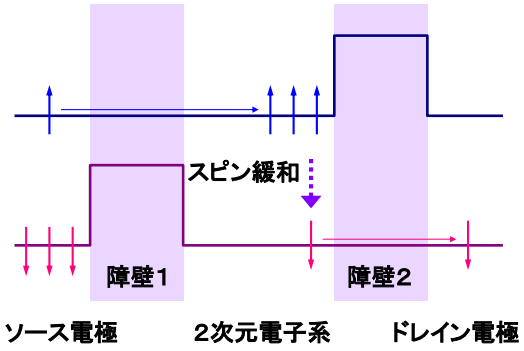


図 26: スピン緩和 FET [9, 10, 11, 12] （文献 [14] より転載。図 4 を再掲。）。

スピン緩和率 $1/\tau_s$ は $1/\tau_s = b\alpha^2$ (b: 比例係数) により与えられ [2]、結果として単一で対称な量子井戸では $1/\tau_s = b(a_{\rm so}E_z)^2$ となり、ゲート電圧を変えることによりスピン緩和率をスイッチングできることになる。もし、off 状態において E_z の値を無限小に維持することができれば、$1/\tau_s$ の on/off 比は任意に大きくできる。しかし、実際の試料では、例えばドナー密度のような構造の詳細は設計値からずれてしまうため、E_z がゼロになるゲート電圧の正確な値を知ることは難しい。そのため、理想的な構造において $E_z = 0$ を与えるゲート電圧の値のとき、個々の試料では避けられない E_z のゼロからのズレ ΔE_z が生じる。したがって、off のときのスピン緩和率は $b(a_{\rm so}\Delta E_z)^2$ になり十分に小さくできないという課題がある。

スピン緩和 FET における off のスピン緩和率のこのような限界を克服するために、本研究では α が無視できる井戸幅の大きい量子井戸と $|\alpha|$ が大きい井戸幅の小さい量子井戸とから成る量子井戸構造を提案する（図 27(a) 参照）。これらの量子井戸の間を厚い障壁層で隔てることにより、$E_z = 0$ の近傍では電子を井戸幅の大きい量子井戸に十分に局在させる。一方で、十分大きい電場 E_z を印加することにより井戸幅の小さい量子井戸へ移動させ、Rashba 係数とそれによって生じるスピン緩和率の E_z によるスイッチングを行う [3]。先行研究では、井戸層の半導体として $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ を用い、障壁層の半導体として $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ の Al の割合 x を $x = 0.3$ に近い値に調節したものを用いると量子井戸の Rashba 係数 $\alpha = a_{\rm so}E_z$ の比例係数 $a_{\rm so}$ をゼロにできることを見出した [18] [4] 本研究では、α（Rashba スピン軌道相互作用）が無視できる量子井戸の井戸層の半導体として W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ を、障壁層の半導体と

[2] 本論文の (110) 量子井戸に関する箇所では、(110) 面に垂直なスピン偏極に対する (110) 量子井戸における Dyakonov-Perel 機構を考える。この場合、Dresselhaus スピン軌道相互作用は (110) 面に垂直な有効磁場を生じるので、Dresselhaus スピン軌道相互作用はスピン緩和を起こさない。

[3] 山本と土家 [78] は、ゲート電圧による電場のほかに、量子井戸にアクセプターをドープして大きい内部電場を生じさせて、小さい外部電場により大きい Rashba 係数を得る研究を行った。他に変調ドープした量子井戸における Rashba スピン軌道相互作用に関する研究として、論文 [79, 80, 81, 82, 39] の研究がある。

[4] 江上と明楽 [83] は、量子井戸における Rashba スピン軌道相互作用を、半導体の組成を調節する代わりに、界面双極子 [84, 85] が作る対称ポテンシャルを加えて、タイプ I 量子井戸をタイプ II 量子井戸のようにして抑制する研究を行った。

して B=$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ($x = 0.3$) を用いた（対称量子井戸であり、量子井戸 B/W/B と呼ぶ。）。この量子井戸での Rashba スピン軌道相互作用は非零の E_z においても抑制されるので、スピン緩和 FET の off のスピン緩和率や off 電流は、E_z がゼロから ΔE_z だけずれたときにも小さくできる。次に、$|\alpha|$（Rashba スピン軌道相互作用）が大きい（左右の障壁層の半導体が異なる非対称）量子井戸の障壁層 A の半導体として A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ または $AlAs_ySb_{1-y}$ を、障壁層 B と井戸層 W の半導体として量子井戸 B/W/B と同じものを用い、その井戸幅を小さくした（量子井戸 A/W/B と呼ぶ。）。それは、井戸幅の小さい非対称量子井戸は、E_z がゼロのときでさえ大きな $|\alpha|$ を示すからであり [19]、スイッチングに必要な電場を小さくするのにも役立つと思われる。ここで、量子井戸 A/W/B と B/W/B のスイッチングを実現する最も単純な構造は非対称な 2 重量子井戸構造であるが、スピン緩和率のより単純な E_z 依存性を示す、量子井戸 A/W/B と B/W/B と B/W/A から成る対称な 3 重量子井戸構造（図 27 参照）を本研究で採用した。$E_z = 0$ のとき電子が中央の井戸に局在するように、中央の井戸幅を左右の井戸幅より大きくした場合、$E_z = 0$ 近傍でのスピン緩和率は十分抑制される（障壁の高さが無限大の量子井戸では、基底エネルギーは井戸幅が大きいほど小さい (式 (83) 参照)。）。単一量子井戸 A/W/A と比べた 3 重量子井戸のスピン緩和率の off 値の理論的見積もりについて記す。A=$AlAs_ySb_{1-y}$ と $In_{0.52}Al_{0.48}As$ の場合ともに、$(\alpha_{\rm triple}/\alpha_{\rm single})^2 = (a_{\rm so}^{\rm B/W/B}/a_{\rm so}^{\rm A/W/A})^2 \sim 10^{-3}$ であった。ここで、小さい E_z では $\alpha_{\rm triple} = \alpha_{\rm B/W/B}$ であると仮定し、$\alpha_{\rm triple}$ と $\alpha_{\rm single}$ を同じ $E_z = \Delta E_z$ で評価した。

提案した 3 重量子井戸構造の室温でのスピン緩和率の on/off 比を評価するには、スピン緩和率の Dyakonov-Perel 理論 [1, 2, 48] を拡張する必要がある。絶対零度で電子面密度 N_s が十分小さい場合は、電子は 3 重量子井戸構造の基底サブバンドのみを占有し、単一バンド（サブバンド）の Dyakonov-Perel 理論が適用でき、スピン緩和率は基底サブバンドの Rashba 係数 α_0 の 2 乗に比例する。しかし高温では電子は励起サブバンドも占有し、そこでは α_0 とは異なる Rashba 係数 α_n ($n \geq 1$) を持つ。例えば、提案した 3 重量子井戸構造において、印加電場が $E_z = 0$ の近傍のとき、第一励起状態の波動関数は左または右の量子井戸に広がっていて、$|\alpha_1|$ が大きい値になることが起こり得る。そのため、Rashba 係数が異なる複数のサブバンドが占有されている場合に適用できる [5]、スピン緩和率 $1/T_1$ を求める表式が必要となる。

本研究では、電子が単一サブバンドのみを占有する場合のスピン緩和の Dyakonov-Perel 理論をマルチサブバンドの場合に拡張し、励起サブバンドも電子が占有している場合に適用できるスピン緩和率の表式を得た。その表式を用いて、井戸幅、障壁幅や、半導体の種類が異なる 3 重量子井戸構造について、絶対零度から室温までのスピン緩和率の on/off 比を評価した。本章では、基底サブバンドと第一励起サブバンドのエネルギー差が大きい 3 重量子井戸構造では、室温でもスピン緩和率の on/off 比は 10^6 に達するということを示す。この 10^6 という on/off 比は、単一の非対称量子井戸 (A/W/B) における on/off 比 [19] や、スピン緩和 FET の提案で用いられた [9, 10, 11, 12] 単一の対称量子井戸 (A/W/A) の on/off 比よりもずっと大きいことを示す。

[5] 横緩和時間 T_2 については、Weng と Wu [86] が n 型 GaAs を用いた量子井戸について、励起サブバンドの役割を理論的に研究している。金子と越野と安藤 [87] は、電子が複数のサブバンドを占有した量子細線について、スピン緩和を数値的に研究している。

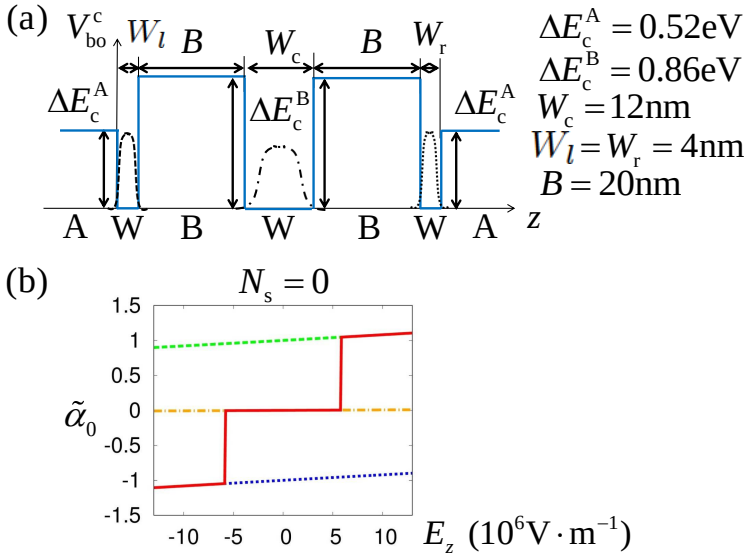


図 27: (a) 3 重量子井戸構造と伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{\rm bo}^{\rm c}(z)$. (b) 電子面密度 $N_s = 0$ での基底サブバンドの電子に対する規格化された Rashba 係数 $\tilde{\alpha}_0$ の量子井戸に垂直な印加電場 E_z 依存性。破線、一点鎖線、点線は、A/W/B (左)、B/W/B (中央)、B/W/A (右) の量子井戸の $\tilde{\alpha}_0$ を表している。ここで、A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$、B=$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ($x = 0.3$)、W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ である。3 重量子井戸構造では、電子が隣の量子井戸に移ったとき $\tilde{\alpha}_0$ (実線) は不連続的な変化を示している。$\tilde{\alpha}_0$ は、$E_z = 0$ で A/W/B について $\tilde{\alpha}_0 = 1$ となるよう規格化している（(a)(b) ともに文献 [20] より。図の転載は American Physical Society により許可されている。)。

6.2 モデルとハミルトニアン

(110) 量子井戸についての本研究では、図 27 に概略を示した、量子井戸 A/W/B (左) と B/W/B (中央) と B/W/A (右) から成る 3 重量子井戸構造を考える。ここで、A と B と W は閃亜鉛鉱構造の半導体である。本研究で井戸層の半導体として W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ を、内側の障壁層の半導体として B=$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ($x = 0.3$) を、外側の障壁層の半導体として A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ または $AlAs_ySb_{1-y}$ を採用した（As の割合 y は InP 基板と格子整合するように決められる。)。GaAs のバンドギャップは 1.52eV であるのに対し、W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ のバンドギャップは 0.816eV であり、式 (104)、(108)、(109) より後者は前者に比べてスピン軌道相互作用が大きいと期待される。B=$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ($x = 0.3$) は、上記のように B/W/B の $|\alpha|$ を小さくするために用いる。A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ は W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ と格子整合していて井戸層の半導体が W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ のとき障壁層として良く用いられる。A=$AlAs_ySb_{1-y}$ は W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ とのヘテロ接合の伝導帯のバンドオフセットが、$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ の中で最も大きい半導体である [19]。量子井戸 B/W/B の基底サブバンドの Rashba 係数 α_0 は、量子井戸に垂直な印加電場 E_z の関数として図 27(b) 中に一点鎖線で示されていて、その値はゼロに近い [18]。一方、A/W/B 量子井戸（破線）と B/W/A 量子井戸（点線）の $|\alpha|$ は $E_z = 0$ のときでも大きい [19]。3 重量子井戸構造では、電子に働く力 $F_z = -eE_z$ ($e > 0$) を負から正に変えると、電子は左の量子井戸から中

央の量子井戸へ、続いて右の量子井戸へ移動する。その結果、図 27(b) のように α_0 は不連続的な変化を示し、E_z によるスピン緩和率のスイッチングができる。本研究では、電子面密度 N_s や温度を上げて励起サブバンドが電子により占有される場合について、E_z の関数としてスピン緩和率を計算した。

3 重量子井戸構造に束縛された伝導帯の電子のハミルトニアンは次のように書ける。

$$H = H_{\rm QW} + H_{\rm W}^{\rm so} + V_{\rm imp}, \tag{149}$$

ここで、$H_{\rm QW}$ は 3 重量子井戸構造のポテンシャル $V_{\rm W}(z)$ の下での電子の運動を記述し、$H_{\rm W}^{\rm so}$ は $V_{\rm W}(z)$ により誘発された Rashba スピン軌道相互作用であり、$V_{\rm imp}$ は 3 重量子井戸構造中にランダムに分布した不純物によるポテンシャルである。3 重量子井戸構造のハミルトニアン $H_{\rm QW}$ は次式により与えられる。

$$H_{\rm QW} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m^*} + V_{\rm W}(z), \tag{150}$$

ここで、$\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} = -i\hbar(\nabla_x, \nabla_y, \nabla_z)$ であり、m^* は伝導帯下端の有効質量である。ポテンシャル $V_{\rm W}(z)$ は

$$V_{\rm W}(z) = V_{\rm bo}^{\rm c}(z) + V_{\rm es}(z). \tag{151}$$

である。ここで、$V_{\rm bo}^{\rm c}(z)$ は井戸層と障壁層の界面での伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャルであり、次式により与えられる。

$$V_{\rm bo}^{\rm c}(z) = \Delta E_{\rm c}^{\rm A} h_{\rm A}(z) + \Delta E_{\rm c}^{\rm B} h_{\rm B}(z), \tag{152}$$

ここで、

$$h_\ell(z) = \begin{cases} 1 & \text{for } z \text{ in barrier } \ell \ (\ell = \text{A, B}), \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{153}$$

であり、$E_{\rm c}$ ($E_{\rm c}^\ell$) を $\mathrm{In_{0.53}Ga_{0.47}As}$（障壁層の半導体 ℓ）の伝導帯の底のエネルギーとして、伝導帯のバンドオフセットは $\Delta E_{\rm c}^\ell = E_{\rm c}^\ell - E_{\rm c}$ により定義される。$V_{\rm W}(z)$ の第 2 項目のポテンシャル $V_{\rm es}(z)$ は、3 重量子井戸構造内部の電子とその外部のドナーによるポテンシャルと、印加電場による静電的なポテンシャルの和であり、$N_s \neq 0$ のとき 3 重量子井戸構造内部の電子によるポテンシャルはハートリー近似（Appendix G 参照）によりセルフコンシステントに計算する。3 重量子井戸構造には x、y 方向に周期的境界条件を課し、その場合 $H_{\rm QW}$ の固有状態は、xy 平面の波数ベクトル $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$、サブバンド指標 $n = 0, 1, 2, \cdots$ とスピンの z 成分 $\sigma = \pm 1$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) により区別される。その固有ケット $|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ は次式を満たす。

$$H_{\rm QW}|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \varepsilon_{n\boldsymbol{k}\sigma}|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle, \tag{154}$$

ここで、エネルギー固有値は

$$\varepsilon_{n\boldsymbol{k}\sigma} = \varepsilon_n + \hbar^2 k^2/2m^*, \tag{155}$$

である。ただし、$k = |\boldsymbol{k}|$ である。上式中の ε_n は次式で与えられる z 方向の運動を記述するシュレーディンガー方程式の固有値であり、

$$\left[\frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + V_{\rm W}(z)\right]|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle, \tag{156}$$

$|n\rangle$ はその固有値に属する固有ケットである。本研究では、上式の ε_n と $|n\rangle$ に対するシュレディンガー方程式と $V_{\rm es}(z)$ に対するポアッソン方程式をセルフコンシステントに解く。印加電場 E_z とドナーの電荷密度は、ポアッソン方程式の境界条件として考慮する。

スピン軌道相互作用 $H_{\rm W}^{\rm so}$ は、価電子帯のバンドオフセットと静電的なポテンシャル（静電ポテンシャルに電子の電荷 $(-e)$ をかけたもの）$V_{\rm es}(z)$ により誘発されるもの [88, 82, 39] であり、次式により与えられる。

$$H_{\rm W}^{\rm so} = a(z)\left(\sigma_x \hat{k}_y - \sigma_y \hat{k}_x\right), \tag{157}$$

ここで、$(\hat{k}_x, \hat{k}_y) = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)/\hbar$ であり、

$$\begin{aligned} a(z) = &\left(\eta_{\rm v}^{\rm A}\Delta E_{\rm v}^{\rm A} - \eta_{\rm s}^{\rm A}\Delta E_{\rm s}^{\rm A}\right)\nabla_z h_{\rm A} \\ &+ \left(\eta_{\rm v}^{\rm B}\Delta E_{\rm v}^{\rm B} - \eta_{\rm s}^{\rm B}\Delta E_{\rm s}^{\rm B}\right)\nabla_z h_{\rm B} + \eta\nabla_z V_{\rm es}. \end{aligned} \tag{158}$$

である。$H_{\rm W}^{\rm so}$ の期待値は Rashba スピン軌道相互作用の形をしている、すなわち

$$R_{n\boldsymbol{k}} \equiv \langle n\boldsymbol{k}|H_{\rm W}^{\rm so}|n\boldsymbol{k}\rangle = \alpha_n(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \tag{159}$$

ここで、α_n は次式により定義される、サブバンド依存の係数（Rashba 係数）である。

$$\alpha_n = \langle n|a(z)|n\rangle. \tag{160}$$

式 (158) 中の因子 $\eta_{\rm v}^{\ell}$、$\eta_{\rm s}^{\ell}$ (ℓ =A, B) と η は次式により与えられる（$\eta_{\rm v}^{\ell}$、$\eta_{\rm s}^{\ell}$ の導出は Appendix K 参照）。

$$\eta_{\rm v}^{\ell} = \frac{P^2}{3}\frac{1}{E_{\rm g}\left(E_{\rm g} - \Delta E_{\rm v}^{\ell}\right)}, \tag{161}$$

$$\eta_{\rm s}^{\ell} = \frac{P^2}{3}\frac{1}{E_{\rm g}^{\rm s}\left(E_{\rm g}^{\rm s} - \Delta E_{\rm s}^{\ell}\right)}, \tag{162}$$

$$\eta = \frac{P^2}{3}\left[\frac{1}{(E_{\rm g})^2} - \frac{1}{\left(E_{\rm g}^{\rm s}\right)^2}\right]. \tag{163}$$

ここで、$E_{\rm v}$ ($E_{\rm v}^{\ell}$) を井戸層の半導体（障壁層の半導体 ℓ）の価電子帯の頂上のエネルギー、$E_{\rm s}$ ($E_{\rm s}^{\ell}$) を同じく井戸層の半導体（障壁層の半導体 ℓ）のスプリットオフバンドの頂上のエネルギーとして、バンドギャップは $E_{\rm g} = E_{\rm c} - E_{\rm v}$ と $E_{\rm g}^{\rm s} = E_{\rm c} - E_{\rm s}$ により、価電子帯のバンドオフセットは $\Delta E_{\rm v}^{\ell} = E_{\rm v}^{\ell} - E_{\rm v}$ と $\Delta E_{\rm s}^{\ell} = E_{\rm s}^{\ell} - E_{\rm s}$ により定義される。また、P は Kane の行列要素である（3.5 節の式 (74) 参照）。

不純物ポテンシャル $V_{\rm imp}(\boldsymbol{r})$（$\boldsymbol{r} = (x, y, z)$）は、3 重量子井戸構造中に均一かつランダムに分布している不純物に由来するポテンシャルである。本研究では $\int V_{\rm imp}(\boldsymbol{r})dxdy = 0$ となるように $V_{\rm imp}(\boldsymbol{r})$ の基準点をとる。それゆえに $\boldsymbol{k}$ についての対角要素はゼロである。つまり、

$$\left\langle n'\boldsymbol{k}\sigma\left|V_{\rm imp}\right|n\boldsymbol{k}\sigma\right\rangle = 0. \tag{164}$$

さらに、$V_{\rm imp}(\boldsymbol{r})$ は各々の不純物によるポテンシャルの和として書けると仮定する。すなわち

$$V_{\rm imp}(\boldsymbol{r}) = \sum_i u(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i), \tag{165}$$

ここで、$\boldsymbol{r}_i$ は i 番目の不純物の位置ベクトルである。

6.3 スピン緩和率の表式

(110) 量子井戸についての本研究では、[110] 方向を z 軸にとり $S_x = S_y = 0$ で $S_z \neq 0$ と仮定して、z 軸方向に偏極したスピンの (110) 量子井戸における Dyakonov-Perel 機構によるスピン緩和を考える。そのとき S_z のスピン緩和は Rashba スピン軌道相互作用のみにより起こる。なぜなら Dresselhaus スピン軌道相互作用 [32] は、(110) 量子井戸の z 軸方向に有効磁場を生成する [48, 54, 89, 18] からである [6]。S_z のスピン緩和時間 τ_s またはスピン緩和率 τ_s^{-1} は次式により与えられる。

$$\frac{dS_z}{dt} = -\frac{S_z}{\tau_s}, \tag{166}$$

ここで S_z は、演算子 $s_z = (\hbar/2)\sigma_z$ の各電子についての期待値の和で定義され、1 電子状態の密度演算子 ρ を用いて次式のように書ける（2.2 節の式 (20) 参照）。

$$S_z = \mathrm{tr}(\rho s_z). \tag{167}$$

また、その時間微分 dS_z/dt は次式の ρ の運動方程式により評価される（2.2 節の式 (21) 参照）。

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]. \tag{168}$$

S_z と dS_z/dt を計算するために、次式のように非摂動ハミルトニアンとして H_0 を、摂動ハミルトニアンとして $\mathcal{V}$ をとる。

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \mathcal{V}, & (169)\\ H_0 &= H_{\mathrm{QW}} + H_{\mathrm{W}}^{\mathrm{so}}, & (170)\\ \mathcal{V} &= V_{\mathrm{imp}}. & (171) \end{aligned}$$

H_{QW} の固有ケット $|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ を基底ケットにとると、S_z は次のように表される。

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sum_{n\boldsymbol{k}\sigma}\langle n\boldsymbol{k}\sigma|\rho\sigma_z|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \frac{\hbar}{2}\sum_{n\boldsymbol{k}\sigma}\sigma\langle\sigma|f_{n\boldsymbol{k}}|\sigma\rangle, \tag{172}$$

ここで、スピン空間の演算子として次のものを導入した。

$$f_{n\boldsymbol{k}} = \langle n\boldsymbol{k}|\rho|n\boldsymbol{k}\rangle. \tag{173}$$

ここで、

$$\begin{aligned} \frac{dS_z}{dt} &= \mathrm{tr}\left(\frac{d\rho}{dt}s_z\right) = \sum_{n\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle n\boldsymbol{k}\sigma\left|\frac{d\rho}{dt}s_z\right|n\boldsymbol{k}\sigma\right\rangle \\ &= \sum_{n\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle\sigma\left|\left\langle n\boldsymbol{k}\left|\frac{d\rho}{dt}\right|n\boldsymbol{k}\right\rangle\right|\sigma\right\rangle\frac{\hbar}{2}\sigma = \sum_{n\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle\sigma\left|\frac{df_{n\boldsymbol{k}}}{dt}\right|\sigma\right\rangle\frac{\hbar}{2}\sigma. \end{aligned} \tag{174}$$

[6] (110) 量子井戸に Rashba スピン軌道相互作用と Dresselhaus スピン軌道相互作用が働いているとき、スピン緩和率テンソルの yz と zy 成分が現れテンソルの主軸は z 軸からずれる [21]。しかし、Rashba スピン軌道相互作用が Dresselhaus スピン軌道相互作用よりずっと小さいスピン緩和率 off のときや、逆に Rashba スピン軌道相互作用が Dresselhaus スピン軌道相互作用よりずっと大きいスピン緩和率 on のときには、主軸のずれは非常に小さい。

より、dS_z/dt の表式を得るために、$f_{n\boldsymbol{k}}$ の運動方程式を導く。ここで、2.3 節、5.2 節と同様に、次式のような相互作用描像を採用する。

$$\rho_I(t) = U^\dagger(t)\rho(t)\,U(t), \tag{175}$$

$$\mathcal{V}_I(t) = U^\dagger(t)\mathcal{V}(t)\,U(t), \tag{176}$$

$$U(t) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}H_0 t\right). \tag{177}$$

式 (168) より次式が得られる（5.2 節の式 (134) 参照)。

$$\frac{d\rho_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{V}_I, \rho_I]. \tag{178}$$

上式の両辺を t_0 から t まで積分すると次式を得る。

$$\rho_I(t) = \rho_I(t_0) + \int_{t_0}^{t} dt' \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{V}_I(t'), \rho_I(t')]. \tag{179}$$

上式を式 (178) に代入し、$\mathcal{V}$ の 2 次までとると次式を得る。

$$\frac{d\rho_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{V}_I(t), \rho_I(t_0)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} dt'[\mathcal{V}_I(t), [\mathcal{V}_I(t'), \rho_I(t)]]. \tag{180}$$

上式の左辺の $\rho_I(t)$ を $\rho(t)$ で書くと次式を得る。

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho] + \frac{1}{i\hbar}U(t)[\mathcal{V}_I(t), \rho_I(t_0)]U^\dagger(t) + J(t), \tag{181}$$

ここで

$$J(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^{t} dt' U(t)[\mathcal{V}_I(t), [\mathcal{V}_I(t'), \rho_I(t)]]U^\dagger(t). \tag{182}$$

である。$f_{n\boldsymbol{k}}$ の運動方程式を得るために、式 (181) の各項の対角行列要素 $\langle n\boldsymbol{k}|\cdots|n\boldsymbol{k}\rangle$ の評価をする。$\langle n\boldsymbol{k}|[H_{\rm W}^{\rm so}, \rho]|n\boldsymbol{k}\rangle$ を評価するために、次の近似を採用する。

$$\langle n'\boldsymbol{k}|\rho|n\boldsymbol{k}\rangle = 0, \quad (n \neq n'). \tag{183}$$

上式は、エネルギー差 $\varepsilon_{n'\boldsymbol{k},-\sigma} - \varepsilon_{n\boldsymbol{k}\sigma}$ が $\langle n'\boldsymbol{k}, -\sigma|H_{\rm W}^{\rm so}|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ の絶対値に比べて大きいとき妥当である（Appendix J 参照)。また式 (181) 中の $\mathcal{V}_I$ が現れる項を評価するために、不純物の位置の x、y 座標について平均をとり、式 (164) を用いると、次式が得られる（式 (181) の右辺第 2 項の対角行列要素がゼロであることは、2.3 節や Appendix D で $J_1 = 0$ を示したのと同様にして示せる。)。

$$\frac{df_{n\boldsymbol{k}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[R_{n\boldsymbol{k}}, f_{n\boldsymbol{k}}] + J_{n\boldsymbol{k}}, \tag{184}$$

ここで $J_{n\boldsymbol{k}} = \langle n\boldsymbol{k}|J(t)|n\boldsymbol{k}\rangle$ である。$J_{n\boldsymbol{k}}$ を評価するために Dyakonov-Perel 理論と同じく $H_{\rm W}^{\rm so}$ を無視し [2]、$t_0 \to -\infty$ の極限をとる。その結果 $J_{n\boldsymbol{k}}$ は次式のようになる（2.3 節、5.2 節、Appendix D 参照。また式 (183) を用いる。)。

$$J_{n\boldsymbol{k}} = \sum_{n'\boldsymbol{k}'}\left[-W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}}f_{n\boldsymbol{k}}(t) + W_{n\boldsymbol{k},n'\boldsymbol{k}'}f_{n'\boldsymbol{k}'}(t)\right], \tag{185}$$

ここで $W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}}$ は、状態 $n\boldsymbol{k}$ から状態 $n'\boldsymbol{k}'$ への単位時間当たりの遷移確率であり次式で与えられる。

$$W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\left\langle n'\boldsymbol{k}' \right| V_{\mathrm{imp}} \left| n\boldsymbol{k} \right\rangle|^2 \delta(\varepsilon_{n'\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{n\boldsymbol{k}}), \tag{186}$$

上式は、各々の不純物の x、y 座標について平均をとると、各々の不純物での単位時間当たりの遷移確率の和になるので、単位体積当たりの不純物数に比例する（2.3 節の式 (43) 参照）。

式 (174) より $df_{n\boldsymbol{k}}/dt$ は dS_z/dt を決定し、式 (184) において $f_{n\boldsymbol{k}}$ により与えられる。そこで、式 (184) を $f_{n\boldsymbol{k}}$ について $R_{n\boldsymbol{k}}$ の 1 次まで解く。$H_{\mathrm{W}}^{\mathrm{so}}$（式 (157)）と $R_{n\boldsymbol{k}} = \langle n\boldsymbol{k}|H_{\mathrm{W}}^{\mathrm{so}}|n\boldsymbol{k}\rangle$（式 (159)）を、次式のように有効磁場演算子 $\hat{\boldsymbol{\Omega}} = (\hat{\Omega}_x, \hat{\Omega}_y, 0)$ [2] とその期待値 $\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k}) \equiv \langle n\boldsymbol{k}|\hat{\boldsymbol{\Omega}}|n\boldsymbol{k}\rangle$ により表す。

$$H_{\mathrm{W}}^{\mathrm{so}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad R_{n\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \tag{187}$$

この場合、有効磁場の大きさは次式により定義され、

$$\Omega_n(k) = |\boldsymbol{\Omega}_n(\boldsymbol{k})|, \tag{188}$$

Rashba スピン軌道相互作用の場合は波数 $\boldsymbol{k}$ の向きに依らない。式 (184) の右辺の 2 つの項を見ると、それらの相対的な大きさは無次元の定数 $\Omega\tau$ で与えられることが分かる。ここで、Ω はサブバンド n の有効磁場の大きさ Ω_n の典型的な値で、τ は連続する不純物散乱の間の平均自由時間である。Dyakonov-Perel 理論と同じく、$f_{n\boldsymbol{k}}$ を $\Omega\tau$ について展開し 0 次と 1 次の項を残す。すなわち

$$f_{n\boldsymbol{k}} = f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)} + f_{n\boldsymbol{k}}^{(1)}. \tag{189}$$

である。さらに式 (184) の両辺に τ をかけた次式を考える。

$$\tau\frac{df_{n\boldsymbol{k}}}{dt} = \tau\frac{1}{i\hbar}[R_{n\boldsymbol{k}}, f_{n\boldsymbol{k}}] + \tau J_{n\boldsymbol{k}}. \tag{190}$$

左辺の $f_{n\boldsymbol{k}}$ は無次元の演算子なので、左辺は τ/τ_s(τ_s: スピン緩和時間) に比例する。さらに後で得られる $f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)}$ と $f_{n\boldsymbol{k}}^{(1)}$ を用いて示されるように、$\tau/\tau_s \sim \Omega^2\tau^2$ の関係がある。そのため、式 (190) は $\Omega\tau$ について 0 次では

$$\tau\sum_{n'\boldsymbol{k}'} W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}} \left(-f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)} + f_{n'\boldsymbol{k}'}^{(0)}\right) = 0. \tag{191}$$

となり（$W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}} = W_{n\boldsymbol{k},n'\boldsymbol{k}'}$ を用いた）、上式は $f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)}$ がエネルギー $\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}$ の関数ならば満たされる。そこで、$f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)}$ をスピン偏極のある熱平衡状態に選ぶ。すなわち

$$f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)} = \frac{1}{2}I\left[f_\uparrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}) + f_\downarrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})\right] + \frac{1}{2}\sigma_z f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}), \tag{192}$$

ここで I は単位行列であり、$f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})$ は次式のようにアップスピン電子とダウンスピン電子の分布の差である。

$$f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}) = f_\uparrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}) - f_\downarrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}), \tag{193}$$

ここで、$f_\sigma(\varepsilon)$ は次式のようにスピンに依存するフェルミ・ディラック分布関数である。

$$f_\sigma(\varepsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_\sigma}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]^{-1}. \tag{194}$$

スピンに依存する化学ポテンシャル μ_σ は、次式のようなスピン偏極を起こす。

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sum_{n\boldsymbol{k}\sigma}\sigma\left\langle\sigma\left|f^{(0)}_{n\boldsymbol{k}}\right|\sigma\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\sum_{n\boldsymbol{k}} f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}). \tag{195}$$

式 (190) は $\Omega\tau$ について 1 次では次式のようになり、

$$\tau\frac{1}{i\hbar}\left[R_{n\boldsymbol{k}}, f^{(0)}_{n\boldsymbol{k}}\right] + \tau\sum_{n'\boldsymbol{k}'} W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}}\left(-f^{(1)}_{n\boldsymbol{k}} + f^{(1)}_{n'\boldsymbol{k}'}\right) = 0, \tag{196}$$

この式は $f^{(1)}_{n\boldsymbol{k}}$ についての方程式である。式 (159) を用いると次式を得るので、

$$\left[R_{n\boldsymbol{k}}, f^{(0)}_{n\boldsymbol{k}}\right] = -i\alpha_n f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})(\sigma_x k_x + \sigma_y k_y). \tag{197}$$

式 (196) は次の形の解を持つ。

$$f^{(1)}_{n\boldsymbol{k}} = \frac{\tau_n(k)}{i\hbar}\left[R_{n\boldsymbol{k}}, f^{(0)}_{n\boldsymbol{k}}\right], \tag{198}$$

ただし、$\boldsymbol{k}$ に対する $\boldsymbol{k}'$ の角度を θ としたとき、$W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}}$ は θ の偶関数であると仮定している。ここで Appendix I の式 (374)、(375) とのアナロジーから、$\tau_n(k)$ はサブバンド n の運動量緩和時間の意味を持つと考えられる。式 (198) を式 (196) に代入すると次式が得られる。

$$P_n(\varepsilon)\tau_n(\varepsilon) - \sum_{n'} Q_{nn'}(\varepsilon)\tau_{n'}(\varepsilon)\frac{\alpha_{n'}k_{n'}(\varepsilon)}{\alpha_n k_n(\varepsilon)} = 1, \tag{199}$$

ここで

$$P_n(\varepsilon) = \sum_{n'\boldsymbol{k}'} W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}}, \quad Q_{nn'}(\varepsilon) = \sum_{\boldsymbol{k}'} W_{n'\boldsymbol{k}',n\boldsymbol{k}}\cos\theta, \tag{200}$$

であり、$k_n(\varepsilon)$ は $\varepsilon_{n\boldsymbol{k}} = \varepsilon$ を満たす $|\boldsymbol{k}|$ の値である。S_z の時間微分は式 (174)、(184) により求められる。式 (184) の衝突項 $J_{n\boldsymbol{k}}$ は $\sum_{n\boldsymbol{k}} J_{n\boldsymbol{k}} = 0$ を満たすため、dS_z/dt には寄与しない。また、$\sum_{\boldsymbol{k}}\left[R_{n\boldsymbol{k}}, f^{(0)}_{n\boldsymbol{k}}\right] = 0$、$\left[R_{n\boldsymbol{k}}, f^{(1)}_{n\boldsymbol{k}}\right] = -2i\hbar^{-1}\tau_n(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})\alpha_n^2 k^2\sigma_z f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})$ より、次式を得る。

$$\frac{dS_z}{dt} = -2\hbar^{-1}\sum_{n\boldsymbol{k}}\tau_n(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})\alpha_n^2 k^2 f_z(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}). \tag{201}$$

上式の dS_z/dt と式 (195) の S_z を式 (166) に代入すると、スピン緩和時間 τ_s が得られる。$|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \ll k_{\mathrm{B}}T$ のとき、スピン緩和率は $\mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ に依らず次式のようになる。

$$\frac{1}{\tau_s} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} f(\varepsilon_n)\right]^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\int_{\varepsilon_n}^{\infty} d\varepsilon\left(-\frac{df}{d\varepsilon}\right)\Omega_n^2(\varepsilon)\tau_n(\varepsilon), \tag{202}$$

ここで、$f(\varepsilon)$ はスピンに依存する化学ポテンシャルが $\mu = \mu_\uparrow = \mu_\downarrow$ であるときのフェルミ・ディラック分布関数である。また、基底サブバンドと第一励起サブバンドが占有されていて、$k_{\mathrm{B}}T \ll \varepsilon_F - \varepsilon_1$ (ε_F: フェルミエネルギー) で $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \ll \varepsilon_F - \varepsilon_1$ のとき、スピン緩和率は T や $\mu_\uparrow - \mu_\downarrow$ に依らず次式のようになる。

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{2}\sum_{n=0,1}\Omega_n^2(\varepsilon_F)\tau_n(\varepsilon_F). \tag{203}$$

図 27(b) が示すように、本研究で提案する 3 重量子井戸においては、基底サブバンドの有効磁場の大きさ $\Omega_0 = (2/\hbar)\alpha_0 k$ は、off 領域の $E_z = 0$ の近傍ではほとんどゼロである。そのため、off 領域のスピン緩和は式 (202) 中の $n \geq 1$ の励起サブバンドを占有する電子について起こる。励起サブバンドのこのような寄与を考慮することは、スピン緩和率を正確に評価するために必須である。

6.4　スピン緩和率の計算結果

6.4.1　スピン緩和率 on/off 比向上のためのガイドライン

本研究の目標は、絶対零度から室温までの温度の領域で、より高いスピン緩和率の on/off 比を実現できる量子井戸構造を提案することであった。この目標のために、Rashba スピン軌道相互作用が無視できる量子井戸（中央にある量子井戸 B/W/B）から Rashba スピン軌道相互作用が大きい量子井戸（左 (右) にある量子井戸 A/W/B (B/W/A)）へ、電場を印加して電子を移動させることを考えた。電子は、電場 $E_z \sim 0$ のときは中央の量子井戸 B/W/B に局在させ、$|E_z|$ を大きくして左の量子井戸 A/W/B や右の量子井戸 B/W/A へ移動させる。井戸層の半導体には $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ を、障壁層の半導体 A には $In_{0.52}Al_{0.48}As$ または $AlAs_ySb_{1-y}$ を、障壁層の半導体 B には $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ $(x = 0.3)$ を用いた。ここで、障壁層の半導体 B の Al の割合 x は、単一量子井戸 B/W/B の Rashba 係数の電場の比例係数 a_{so} が $a_{so} \approx 0$ となるよう調整した。また、量子井戸 A/W/B と B/W/A の Rashba スピン軌道相互作用を大きくするために、これら 2 つの量子井戸の井戸幅を小さくした [19]。

高温では電子は励起サブバンドを占有する。励起サブバンドの中には、$E_z = 0$ の近傍で左右の量子井戸に電子の存在確率が大きいものがあり、そのような励起サブバンドがスピン緩和率の off での値を引き上げる。例えば図 33 の 3 重量子井戸構造では、$E_z = 0$ での第 1 励起サブバンド中の電子は図 28 のように左右の量子井戸に大きな存在確率を持つ。したがって off 領域でのスピン緩和を抑制するためには、

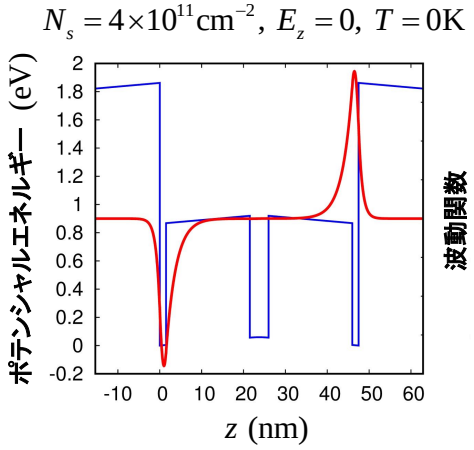


図 28: 3 重量子井戸構造の左右の量子井戸に電子の大きな存在確率がある励起サブバンド中の電子の波動関数の例。図 33 の 3 重量子井戸構造で、$N_s = 4 \times 10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$, $E_z = 0$, $T = 0\mathrm{K}$ のときの第 1 励起サブバンド中の電子の z 方向の波動関数。

基底と励起サブバンド間のエネルギー差を大きくして、励起サブバンドを占有する電子を減らす必要がある。このようなことは、中央の井戸幅を大きくし左右の井戸幅を小さくすると実現できる。

また、リーク電流が発生しないようにするため、中央の井戸から左右の井戸への移動が起こる電場の大きさ E_z^{trans} を減らす必要もある。E_z^{trans} の概算値は $eE_z^{\mathrm{trans}}\Delta z_{\mathrm{well}} = \Delta\varepsilon_{\mathrm{well}}$ から見積もられる。ここ

で、$\Delta z_{\rm well}$ は中央の井戸の中心と右または左の井戸の中心との距離であり、$\Delta\varepsilon_{\rm well}$ は $E_z = 0$ での中央の井戸と右または左の井戸それぞれの基底状態のエネルギーの差である。したがって、内側の障壁層の幅を大きくすることによって $E_z^{\rm trans}$ を減らすことができる。

6.4.2　外側の障壁層の半導体が $\mathbf{In_{0.52}Al_{0.48}As}$ である３重量子井戸構造

まず外側の障壁層の半導体として A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ を採用した。6.2 節に記したように、A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ は井戸層の半導体 W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ と格子整合していて、井戸層の半導体が W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ のとき障壁層の半導体として良く用いられる半導体である。図 29 に前節のガイドラインにより決めた 3 重量子井戸構造を示した。中央の井戸幅は左右の井戸幅の 3 倍にし、内側の障壁層の幅は 20nm にした。

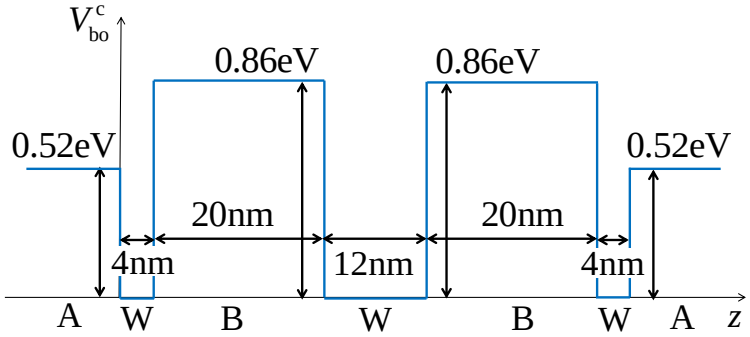


図 29:　3 重量子井戸構造と伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{\rm bo}^{\rm c}(z)$。障壁層の半導体 A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$, B=$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ($x = 0.3$), 井戸層の半導体 W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ [20]（図の転載は American Physical Society により許可されている）。

スピン緩和率の計算に当たり、不純物ポテンシャルが及ぶ距離はフェルミ波長より小さいと仮定し、次式の不純物ポテンシャルを用いた（近似の妥当性については Appendix L 参照）。

$$u(\boldsymbol{r}) = u_0\delta(\boldsymbol{r}). \tag{204}$$

運動量緩和時間とスピン緩和時間の単位として、不純物ポテンシャルの強さ u_0 を用いた、次式で与えられる τ_{p0} と τ_{s0} を使用する。スピン緩和時間は全て τ_{s0} で割って得られた無次元量で表す。

$$\frac{1}{\tau_{p0}} = n_{\rm imp}u_0^2\frac{m^*}{\hbar^3 a_B^*}, \tag{205}$$

$$\frac{1}{\tau_{s0}} = 10^6\frac{\eta^2({\rm Ry}^*)^2}{\hbar^2(a_B^*)^4}\tau_{p0} = 10^6\frac{\eta^2\hbar({\rm Ry}^*)^2}{n_{\rm imp}u_0^2 m^*(a_B^*)^3}, \tag{206}$$

ここで、$n_{\rm imp}$ は単位体積当たりの不純物数であり、η は伝導帯の電子に対するスピン軌道相互作用の有効結合定数である [18, 19, 20]。本論文中で用いた長さとエネルギーの単位はそれぞれ $a_B^* = \hbar^2\epsilon/(m^*e^2)$ と ${\rm Ry}^* = \hbar^2(a_B^*)^{-2}/(2m^*)$ であり、ϵ は静的誘電率である。$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ での値は、それぞれ $a_B^* = 17.1$nm、${\rm Ry}^* = 3.04$meV である。

図 30 には、図 29 に示した 3 重量子井戸の $T = 0$K における面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$ を、電子面密度 $N_s/(10^{11}\mathrm{cm}^{-2}) = 4, 5, 6$ の 3 つの場合について示した。N_s が非零のとき、

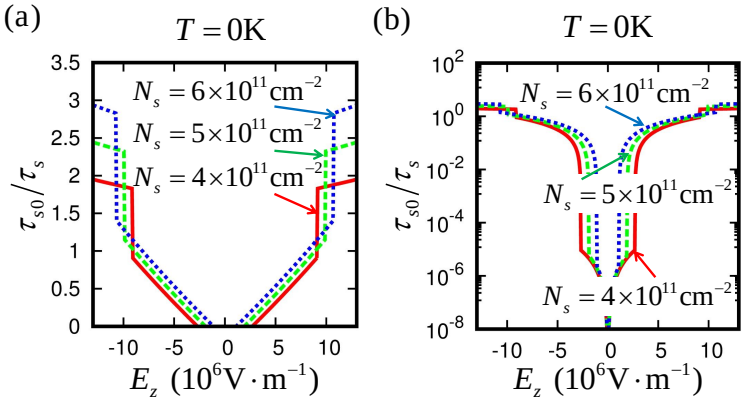


図 30: $T = 0$K での面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$ の電子面密度 N_s 依存性。外側の障壁層の半導体は A=$\mathrm{In}_{0.52}\mathrm{Al}_{0.48}\mathrm{As}$。(a) は線形目盛で (b) は片対数目盛でプロットした（(a)(b) ともに文献 [20] より。図の転載は American Physical Society により許可されている。）。

電子が中央の量子井戸から左または右の量子井戸へ移動し、スピン緩和率が off から on へ上昇するのは、N_s に比例する E_z の範囲で起こり（この理由の説明は Appendix M 参照）、E_z がある値（E_z^{on} と呼ぶ）で不連続的な上昇がある。その $E_z = E_z^{\mathrm{on}}$ での $1/\tau_s$ の大きい方の値をスピン緩和率 on の値とし、$E_z = E_z^{\mathrm{off}} = 0.1E_z^{\mathrm{on}}$ での $1/\tau_s$ の値をスピン緩和率 off の値とした。6.1 節に記したようにスピン緩和率 off の E_z はどうしても設計値とのずれが生じるからである。このときのスピン緩和率の on/off 比は 10^6 程度であり、N_s にはあまり依存しない。また、$|E_z| \geq E_z^{\mathrm{on}}$ では電子は基底サブバンドのみを占有し、$E_z \sim 0$ でも電子は基底サブバンドのみを占有する。スピン緩和率が off から on へ上昇する E_z 領域において $1/\tau_s$ が E_z の 1 次関数で変化するのは、次のようにして理解できる。第一励起サブバンドを占有する電子の数は E_z の 1 次関数であり（Appendix M 参照）、その電子数は $\varepsilon_F - \varepsilon_1 \propto k_1^2(\varepsilon_F)$ に比例し、また $\Omega_1^2(\varepsilon_F) \propto k_1^2(\varepsilon_F)$ であり、さらにスピン緩和率 $1/\tau_s \approx (1/2)\Omega_1^2(\varepsilon_F)\tau_n(\varepsilon_F)$ と近似できるからである。

次に図 31 に、$N_s = 4{\times}10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ で $T = 0$K の場合について、内側の障壁層の半導体 B=$\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ の Al の割合 x を $x = 0.28511$、0.29、0.3 と変えたときのスピン緩和率を示した。ここで、量子井戸 B/W/B が単独にあるとき、Rashba 係数中の a_{so} が正確に $a_{\mathrm{so}} = 0$ となる Al の割合 x_0 は $x_0 \approx 0.28511$ である。図 31 より、off でのスピン緩和率は x の x_0 からのずれに強く依存することが分かる。

この節の最後に、図 32 に $N_s = 4 \times 10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ のときのスピン緩和率の温度依存性を示す。スピン緩和率 off のときに電子が励起サブバンドを占有するために、室温ではスピン緩和率の on/off 比は 10^1 程度であった。図 32 は $x = 0.3$ のときのスピン緩和率であるが、$T \geq 100$K では $x = 0.28511$ のときのスピン緩和率との違いはほとんどなかった。

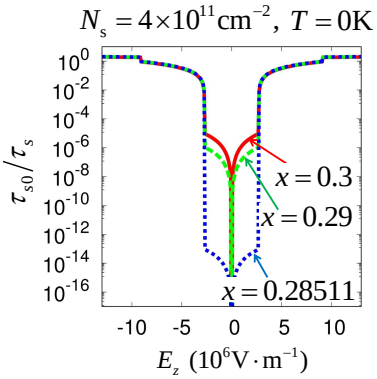


図 31: 障壁層 B の Al の割合 x が $x = 0.28511, 0.29, 0.3$ のときの 3 重量子井戸のスピン緩和率 $1/\tau_s$（片対数目盛でプロットした）。量子井戸 B/W/B が単独にあるとき, Rashba 係数中の a_{so} が正確に $a_{\mathrm{so}} = 0$ となる x_0 は、$x_0 \approx 0.28511$ である．外側の障壁層の半導体 A は $\mathrm{In}_{0.52}\mathrm{Al}_{0.48}\mathrm{As}$ である [20] （図の転載は American Physical Society により許可されている）。

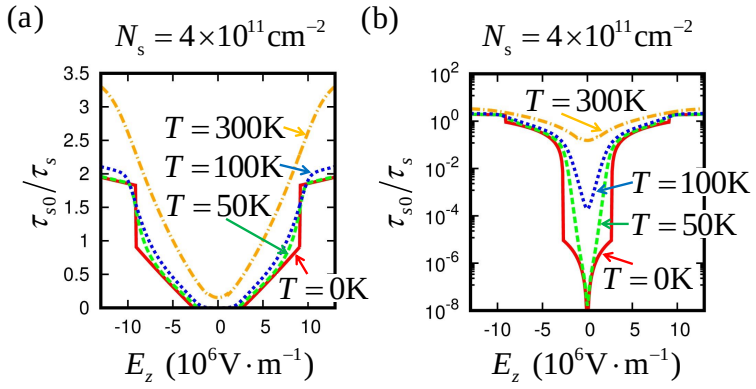


図 32: T[K] =0, 50, 100, 300 のときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$。障壁層 A は $\mathrm{In}_{0.52}\mathrm{Al}_{0.48}\mathrm{As}$ である．(a) は線形目盛で (b) は片対数目盛でプロットした（(a)(b) ともに文献 [20] より。図の転載は American Physical Society により許可されている。）。

6.4.3　外側の障壁層の半導体が $\mathbf{AlAs}_y\mathbf{Sb}_{1-y}$ である３重量子井戸構造

次に外側の障壁層の半導体として A=$AlAs_ySb_{1-y}$ を採用した。$AlAs_ySb_{1-y}$ では $In_{0.52}Al_{0.48}As$ に比べて 1.3eV 程度大きい伝導帯のバンドオフセットが W/A の界面に生じる。そのため量子井戸 B/W/A は、井戸幅をより小さくしてよりエネルギーの高い束縛状態を生じさせることができる。したがって $AlAs_ySb_{1-y}$ を用いることでスピン緩和が off の領域 $|E_z| \sim 0$ において励起サブバンドを占有する電子の数が少ない３重量子井戸構造を設計することができる。図 33 に、そのようにして設計した３重量子井戸構造を示す。A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ の３重量子井戸構造と、内側の障壁幅、左右の井戸幅と中央の井戸幅の比 (1:3) は同じである。

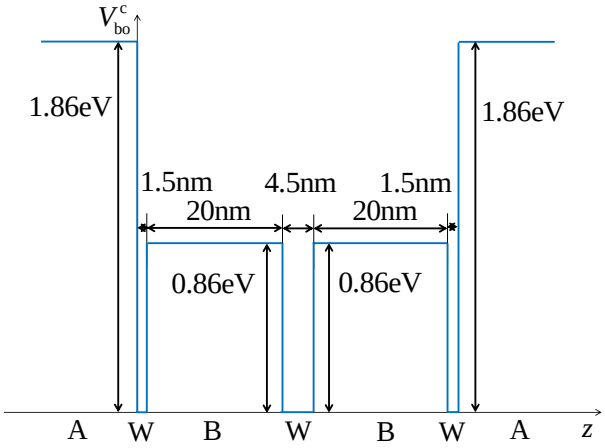


図 33:　３重量子井戸構造と伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V^c_{bo}(z)$。障壁層の半導体 A=$AlAs_ySb_{1-y}$, B=$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ $(x = 0.3)$, 井戸層の半導体 W=$In_{0.53}Ga_{0.47}As$ [20] （図の転載は American Physical Society により許可されている）。

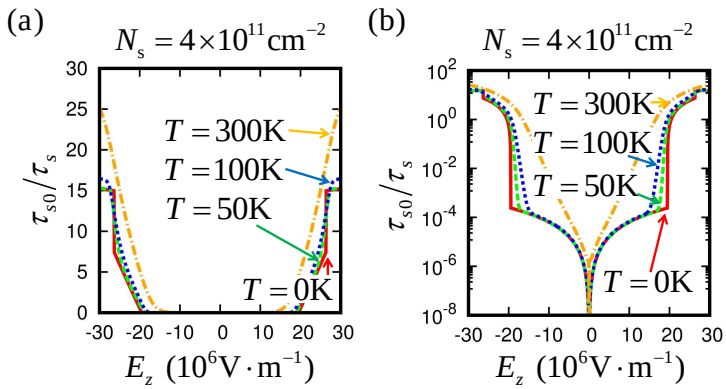


図 34: T[K] =0, 50, 100, 300 のときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$。外側の障壁層の半導体 A は $AlAs_ySb_{1-y}$ である．(a) は線形目盛で (b) は片対数目盛でプロットした（(a)(b) ともに文献 [20] より。図の転載は American Physical Society により許可されている。）。

図 34 に、図 33 に示した３重量子井戸構造の $N_s = 4 \times 10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ でのスピン緩和率の温度依存性を示した。スピン緩和が off の領域 $|E_z| \sim 0$ においてスピン緩和率への励起サブバンドの影響を低減できた

ことにより、室温でもスピン緩和率の on/off 比は 10^6 程度の高い値が得られた。

図 33 の 3 重量子井戸構造について左右の井戸幅、中央の井戸幅、内側の障壁幅を ±20 %変化させたときの 300K でのスピン緩和率 $1/\tau_s$ の計算結果を図 35 に示す。図 33 の 3 重量子井戸構造の左右の井戸幅、中央の井戸幅を ±20 %変化させたときのスピン緩和率 off の値の変化は、次のようにして理解できる。まず左右の井戸幅については、$E_z = 0$ での第 1 励起サブバンド端のエネルギー ε_1 と基底サブバンド端のエネルギー ε_0 の差 $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ は +20 %、±0 %、−20 %の順に大きくなる（この順に 0.369eV、0.456eV、0.507eV）。すなわち、左右の井戸幅が狭いほど電子は励起サブバンドを占有しにくくなり off の値が小さくなる。中央の井戸幅については、$E_z = 0$ での $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ （+20 %の場合は、$E_z = 0$ で第 1 励起サブバンドを占有する電子は中央の井戸に大きい存在確率を持つため、左右の井戸での存在確率が大きい第 2 励起サブバンドの下端のエネルギー ε_2 と基底サブバンド端のエネルギー ε_0 の差 $\varepsilon_2 - \varepsilon_0$ に置き換えた）は −20 %、±0 %、+20 %の順に大きくなる（この順に 0.392eV、0.456eV、0.499eV）。そのため、中央の井戸幅が広いほど電子は励起サブバンドを占有しにくくなり off の値が小さくなる。内側の障壁幅を ±20 %変化させたときは、スピン緩和率 on の値も off の値もほとんど変化していない（図 36 参照）。すなわち、on と off でのスピン緩和率の値は井戸幅によって決まっている。したがって、スピン緩和率の on/off 比は、左右の井戸幅を大きく（小さく）すると小さく（大きく）なり、中央の井戸幅を大きく（小さく）すると大きく（小さく）なり、内側の障壁幅を変化させても変わらない。

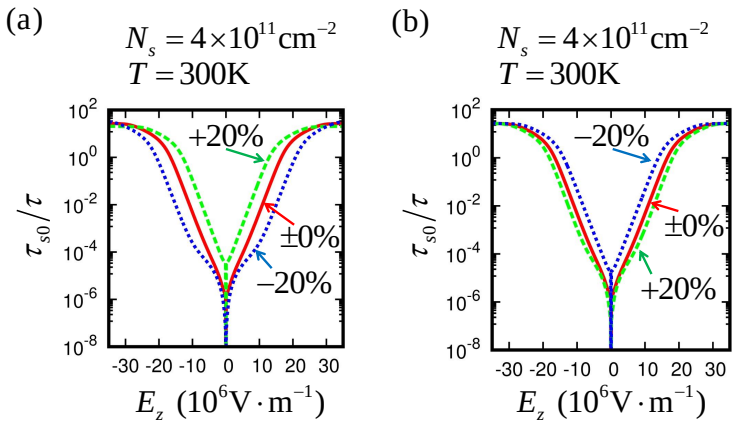


図 35: (a)$T = 300\mathrm{K}$ での、図 33 の 3 重量子井戸の左右の井戸幅を ±20 %変化させたときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$。(b)$T = 300\mathrm{K}$ での、図 33 の 3 重量子井戸の中央の井戸幅を ±20 %変化させたときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$。(a)(b) ともに比較のため図 33 の 3 重量子井戸の場合のグラフも示す (赤線). 片対数目盛でプロットした。外側の障壁層の半導体 A は $\mathrm{AlAs}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ である。

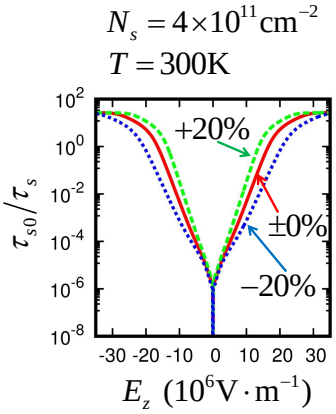


図 36: $T = 300\mathrm{K}$ での、図 33 の 3 重量子井戸の内側の障壁幅を ±20 %変化させたときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$。比較のために図 33 の 3 重量子井戸の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_s$ も示す (赤線)。片対数目盛でプロットした。外側の障壁層の半導体 A は $\mathrm{AlAs}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ である [20] 。

6.4.4　単一量子井戸との比較

図 37 に、$N_s = 4 \times 10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ で室温の場合について、3 重量子井戸構造（図 33 参照）と対称量子井戸 A/W/A、非対称量子井戸 A/W/B（半導体 A、B、W は 3 重量子井戸構造のものと同じ）のスピン緩和率の比較を示した。3 重量子井戸構造で達成した、室温での 10^6 というスピン緩和率の on/off 比は、単一量子井戸での値より数桁大きいことが分かる。その理由の一つは、6.1 節に記したように、3 重量子井戸構造のスピン緩和率 off の値を単一量子井戸 A/W/A に比べて著しく低減できたことである。6.1 節に記した見積もり通り 10^{-3} 程度になっている。さらに、3 重量子井戸構造のスピン緩和率 on の値も単一量子井戸 A/W/A、A/W/B に比べて明らかに増大している。これは、3 重量子井戸構造の左右の量子井戸を井戸幅の狭い非対称量子井戸にしたことによる。なお対称量子井戸では、井戸幅を変えても a_{so} は変わらない [19] ので、A/W/A の井戸幅依存性は無視できる。

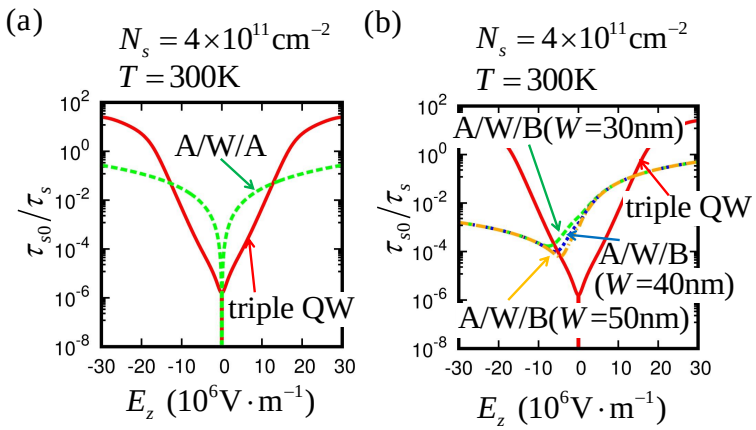


図 37: 面直方向の電場 E_z に対する室温でのスピン緩和率 $1/\tau_s$ (片対数目盛でプロットした)。外側の障壁層の半導体が $\mathrm{AlAs}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ である 3 重量子井戸構造 (図 33 参照) と (a) 単一量子井戸 A/W/A、(b)A/W/B との比較.。単一量子井戸の半導体 A、B、W は 3 重量子井戸構造のものと同じ。A/W/A の井戸幅 W は 4.5nm である (A/W/A の $1/\tau_s$ の on/off 比は W =4.5nm のものと W =50nm のものとでほとんど違いはなかった)。A/W/B の $1/\tau_s$ は 3 つの井戸幅について示した（(a)(b) ともに文献 [20] より。図の転載は American Physical Society により許可されている。)。

6.5　結論

この章では、Rashba スピン軌道相互作用が無視できる量子井戸と Rashba スピン軌道相互作用が大きいもう 1 つの量子井戸の間をゲート電圧によって電子を移動させることによるスピン緩和率のスイッチングを提案した。スピン緩和率の高い on/off 比を達成するように 3 重量子井戸構造を設計した結果、励起サブバンドの電子の占有数を減らすことにより、室温で 10^6 という on/off 比を達成した。この on/off

比の値は、単一量子井戸での値より数桁大きい。この研究では、スピン緩和率の計算を励起サブバンドの寄与も考慮して行うために、Dyakonov-Perel 理論をマルチサブバンドの場合に拡張した。

提案した量子井戸間の電子の移動によるスイッチングの性能の評価として、電子が量子井戸間を移動するのに必要な時間を見積もった。隣接する 2 つの量子井戸においてそれぞれの量子井戸の束縛状態から形成される、結合状態と反結合状態のエネルギー差 $E_{\mathrm{b-ab}}$ から $\hbar\omega_{\mathrm{tr}} = E_{\mathrm{b-ab}}$ により角振動数 ω_{tr} を見積もった結果、図 33 の 3 重量子井戸構造では ω_{tr} は 0.1 GHz のオーダーであった。

本論文では、Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率の評価のために、運動量緩和の機構として不純物散乱だけを考えた。しかし、室温ではフォノン散乱が運動量緩和に重要な寄与をすることが知られている。実際、以前の理論的研究 [90] では、運動量緩和の機構としてフォノン散乱も考慮に入れて Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率を計算している。しかし、スピン緩和率の on/off 比についてのこの章に記した評価結果は、不純物散乱の他にフォノン散乱による運動量緩和を考慮してもほとんど変わらないと予想される。なぜならスピン緩和率の on/off 比は、中央と左（右）の量子井戸の Rashba スピン軌道相互作用の大きさが桁違いに異なることと、それぞれの量子井戸に局在する電子の数の大きな違いから主に決まっているからである。

7 Rashba スピン軌道相互作用と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の釣り合いと Dyakonov-Perel スピン緩和のスイッチング

(111) 量子井戸における Rashba スピン軌道相互作用と運動量について 1 次の項のみ考慮した Dresselhaus スピン軌道相互作用の和の抑制と、(111) 2 重量子井戸構造におけるスピン緩和率の on/off 比の向上のための理論的研究結果について記す。

7.1 序論

スピントロニクスにおいてスピン軌道相互作用による有効磁場は、スピン偏極を生成したり操作するために用いられている [75, 77]。6.1 節に記したスピン緩和 FET は、有効磁場によるスピン偏極の操作の例とも言える。スピン偏極を生成したり操作するには大きなスピン軌道相互作用が好ましく、半導体量子井戸で実現されている [15, 16, 91]。一方で有効磁場は、非平衡なスピン偏極を弱める Dyakonov-Perel のスピン緩和機構（5.2 節参照）[1, 2, 48] の源である。したがって、スピン偏極を維持し運ぶには有効磁場を低減することが望まれる。この章では、(111) 量子井戸において Rashba スピン軌道相互作用 [3, 4, 5, 6] と運動量について 1 次の項のみ考慮した Dresselhaus スピン軌道相互作用 [48] （以下では 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用と呼ぶ）による有効磁場の和を抑制する方法を提案する。さらに、前章のようにゲート電圧により電子に 2 つの量子井戸間を移動させて、有効磁場と Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率を on/off する 2 重量子井戸を設計し、on/off 比を評価した結果についても記す。

(111) 量子井戸の面直方向（成長方向と同じであり z 軸方向とする）のゲート電圧による電場を調節することにより、Rashba スピン軌道相互作用と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の有効磁場の和とそれによる Dyakonov-Perel のスピン緩和機構のスピン緩和率を抑制する理論的提案がなされている [21, 22, 23]。この提案では、(111) 量子井戸において 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用が、面内の波数 k_x、k_y の関数として Rashba スピン軌道相互作用と同じ関数形であり係数のみが異なっていることを利用して、E_z に比例する Rashba 係数と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数がちょうど打ち消し合うように調節できることが示されている。この調節によるスピン緩和率の低減は、その後実験により実証されている [24, 25, 26, 27, 28]。スピン軌道相互作用の係数の和をゼロにするには次のように電場を調節する。まず、量子井戸が単一で対称である場合、Rashba 係数 α は $E_z = 0$ でゼロになり、非常に大きな $|E_z|$ を除いて $\alpha = a_{\rm so}E_z$ と書ける。一方、Dresselhaus スピン軌道相互作用は電場依存性が小さいので、その係数 β は定数であるとする。つまり、α と β は次式のように書ける。

$$\alpha = a_{\rm so}E_z,\ \beta = \beta^{(0)}. \tag{207}$$

このとき、

$$E_z = -\frac{\beta^{(0)}}{a_{\rm so}}. \tag{208}$$

では $\alpha + \beta = 0$ にできる。ここで強調すべきことは、(001) 量子井戸 [92, 93] や (110) 量子井戸 [48] の場合はただ 1 つの方向のスピン緩和が抑制されるだけであるが[7]、(111) 量子井戸の場合は 3 つの方向全て

[7] persistent spin helix（例えばレビュー論文 [94] 参照）は、Dyakonov-Perel のスピン緩和を抑制する条件と同じ条件で起こ

のスピン緩和が同時に抑制されるという利点を持っていることである。しかし、(001) や (110) 量子井戸とともに (111) 量子井戸も、スイッチングデバイスへの応用 [9, 10, 11, 12] という観点からすると、E_z を微調節しなければスピン緩和を抑制できないという点には課題がある。なぜなら、6.1 節に記したように、実際の試料では、例えばドナー密度のような量子井戸の構造の詳細は設計値からどうしてもずれてしまうため、Rashba 係数と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数が正確にキャンセルする E_z に調節することは難しいからである。さらに、E_z を調節して Rashba 係数を適する値にして有効磁場の和を抑制するには、ゲートに付随する電気容量の充電の時定数より長い時間がかかってしまうという問題も存在する。そのため、E_z の特別な 1 つの値で 2 つの係数をキャンセルするのではなく、広い範囲の E_z で有効磁場の和を抑制することが望ましい。

本研究では、以前の論文 [18] で提案された方法を 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用も働いている場合に拡張して、ゲートによる電場の広い範囲において Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による有効磁場の和を抑制する方法を提案する。1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による有効磁場の表式は、その係数を除いて Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場と同じであるが、1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による有効磁場は $E_z = 0$ でゼロでないため、2 つの有効磁場を $E_z = 0$ のまわりで打ち消すには、Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場は E_z の 0 次の項を持つ必要がある。そこで、2 つの有効磁場の和を電場の広い範囲で抑制するために次の方法を提案する。まず、(111) 量子井戸を非対称にする、つまり左右の障壁層に異なる半導体を配置することにより α に電場について 0 次の項を生じさせ、β の電場について 0 次の項を打ち消すように調節する。ただし、本研究では β の電場について 1 次の項も考慮して α、β、$\alpha+\beta$ を次式により表し、

$$\alpha = a_{\rm so}E_z + \alpha^{(0)},\ \beta = b_{\rm so}E_z + \beta^{(0)}, \tag{209}$$

$$\therefore\quad \alpha+\beta = (a_{\rm so}+b_{\rm so})E_z + (\alpha^{(0)}+\beta^{(0)}). \tag{210}$$

式 (210) の $a_{\rm so}+b_{\rm so}$ と $\alpha^{(0)}+\beta^{(0)}$ の 2 つをゼロにする。この研究で採用する量子井戸の障壁層の半導体 $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ の Al の割合を左右の障壁層で変えて、非対称な（異なる）x_1 と x_2 とすれば（図 38 参照）変数は 2 つになる。したがって、x_1 と x_2 を調節して $a_{\rm so}+b_{\rm so}$ と $\alpha^{(0)}+\beta^{(0)}$ をゼロにすることが可能である。

この研究ではさらに、6 章に記した Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場のスイッチング [20] を拡張して、上記 2 つの有効磁場が釣り合った非対称量子井戸と大きな有効磁場を持つ非対称量子井戸の間で電子を移動させることにより有効磁場をスイッチングすることを提案する。これら 2 つの非対称量子井戸からは対称な 3 重量子井戸構造を作れないため、この研究では 2 重量子井戸構造（図 40(a) 参照）を採用する。この章ではこの 2 重量子井戸構造において、Rashba スピン軌道相互作用と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率の on/off 比は、室温で 10^7 に達することを示す。スピン緩和率の計算には、単一バンド（サブバンド）の場合についての Dyakonov-Perel の表式を拡張して得られた、マルチサブバンドの場合についての表式（6.3 節の式 (202) 参照）を用いた。最後に、Dresselhaus スピン軌道相互作用の考慮しなかった項（運動量について 3 次の項）によるスピン緩

る。すなわち (001) 量子井戸では $\alpha_0 = \pm\beta_0$ のとき [92, 94]（α_0 と β_0 は基底サブバンドの Rashba 係数と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数である）、(110) 量子井戸では $\alpha_0 = 0$ のとき [48, 94] に起こる。

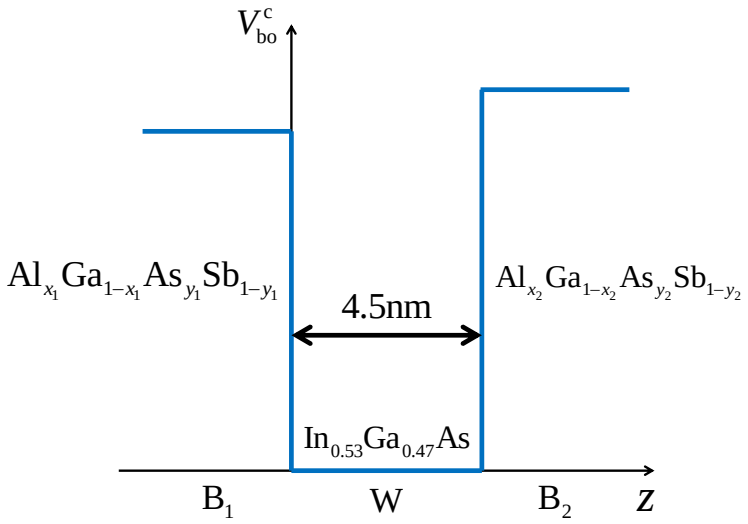


図 38: 障壁層の半導体 $\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ の Al の割合が左右の障壁層で異なる (111) 量子井戸. $V^{\mathrm{c}}_{\mathrm{bo}}(z)$ は伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル. 井戸層の半導体は $\mathrm{In}_{0.53}\mathrm{Ga}_{0.47}\mathrm{As}$ である.

和率への影響について議論する。

7.2 モデルとハミルトニアン

量子井戸構造に束縛された伝導帯の電子のハミルトニアンは 6 章の式 (149) から (153) と同様であるが、スピン軌道相互作用に Rashba スピン軌道相互作用（式 (157) 参照）の他に結晶中の空間反転対称性の破れに起因する Dresselhaus スピン軌道相互作用（4.2 節参照）が加わっている。電子面密度 $N_s \neq 0$ のとき量子井戸構造内部の電子によるポテンシャルは 6 章と同様のハートリー近似により計算し、量子井戸構造には 6 章と同様に x、y 方向に周期的境界条件を課す。本研究では、式 (156) と同じく電子の z 方向の運動を記述するシュレディンガー方程式と $V_{\mathrm{es}}(z)$ に対するポアッソン方程式を 6 章と同様に計算する。

運動量について 1 次の項のみ考慮した Dresselhaus スピン軌道相互作用 $H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{D}}$ は、次式により与えられる（導出は Appendix N 参照）。

$$H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{D}} = \hat{b}\left(\sigma_x \hat{k}_y - \sigma_y \hat{k}_x\right), \tag{211}$$

ここで、$(\hat{k}_x, \hat{k}_y) = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)/\hbar$、$\sigma_x$ と σ_y はパウリのスピン演算子であり、

$$\hat{b} = \frac{2}{\sqrt{3}}\gamma \hat{k}_z^2, \tag{212}$$

ただし $\hat{k}_z = \hat{p}_z/\hbar$ であり、γ は 4.2 節の式 (88)、(89)、(90) に記した。$H^{\mathrm{so}}(= H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}} + H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{D}})$ の期待値は Rashba スピン軌道相互作用の形をしている、すなわち

$$\langle n\boldsymbol{k}|(H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}} + H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{D}})|n\boldsymbol{k}\rangle = (\alpha_n + \beta_n)(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \tag{213}$$

ここで、β_n は（1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用）$H_{\rm D}^{\rm so}$ に由来する、次式により定義されるサブバンド依存の係数である（α_n については式 (160) 参照）。

$$\beta_n = \langle n|\hat{b}|n\rangle. \tag{214}$$

ここで、上式中の γ は井戸層と障壁層との差を無視し井戸層の $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ の値を用いた。評価したところ、γ の井戸層と障壁層との差は 2 倍程度であった。

不純物ポテンシャル $V_{\rm imp}(\boldsymbol{r})$（$\boldsymbol{r} = (x, y, z)$）の基準点の設定、各々の不純物によるポテンシャルの和として書けるという仮定、短距離モデルを仮定したことは 6 章と同じである。式 (213) のスピン軌道相互作用は、次式のスピン緩和を誘発する [48]。

$$\frac{dS_\nu}{dt} = -\sum_\lambda \frac{S_\lambda}{\tau_{\nu\lambda}} \quad (\nu, \lambda = x, y, z), \tag{215}$$

$$1/\tau_{xx} = 1/\tau_{yy} = 1/(2\tau_{zz}),\ 1/\tau_{ij} = 0\ (i \neq j) \tag{216}$$

ここで $\tau_{\nu\nu}$ は、ν 方向のスピン偏極 S_ν のスピン緩和時間である。スピン緩和率テンソル $1/\tau_{\nu\lambda}$ の関係式 (216) は、式 (192) を次式のように変更して、式 (215) を用いると求められる（6.3 節参照）。

$$f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)} = \frac{1}{2} I \left[f_\uparrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}) + f_\downarrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})\right] + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{s} f_\triangle(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}), \tag{217}$$

ここで I は単位行列であり、$\boldsymbol{s}$ はスピン偏極の向きの単位ベクトルである。また、$f_\triangle(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})$ は次式のように $\boldsymbol{s}$ に対して上向きのスピンの電子と下向きのスピンの電子の分布の差である。

$$f_\triangle(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}) = f_\uparrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}) - f_\downarrow(\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}), \tag{218}$$

$f_\sigma(\varepsilon)$ は、式 (194) と同様にスピンの向きに依存するフェルミ・ディラック分布関数である。τ_{zz} の表式は、マルチサブバンドの場合に導出した式 (202)（上向きのスピンの電子と下向きのスピンの電子の化学ポテンシャルの差の絶対値 $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow|$ が $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \ll k_{\rm B}T$ のとき）と (203)（基底サブバンドと第一励起サブバンドが占有されていて、$k_{\rm B}T \ll \varepsilon_F - \varepsilon_1$ (ε_F: フェルミエネルギー) で $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \ll \varepsilon_F - \varepsilon_1$ のとき）の τ_s と同じである。ここで、表式の導出のために採用した近似を記す。(1) $\langle n'\boldsymbol{k}|\rho|n\boldsymbol{k}\rangle = 0$（$n$ と n' はサブバンド指標で $n \neq n'$ である）(2) $V_{\rm imp}(\boldsymbol{r})$ の 2 次の項まで考慮する。(3) 各々の不純物の x と y 座標について平均をとる。(4) Dyakonov-Perel 理論 [1, 2, 48] に基づき、分布関数に対応する $f_{n\boldsymbol{k}}$（式 (173) 参照）の運動学的方程式（6 章では式 (184)）の衝突項の導出においてはスピン軌道相互作用を無視し、その運動学的方程式を解くときは $\Omega_n\tau_n$ の 1 次の項まで考慮した。ここで、$\Omega_n\tau_n$ の 0 次に対応する $f_{n\boldsymbol{k}}$ は式 (217) の $f_{n\boldsymbol{k}}^{(0)}$ である。(5) τ_{zz} に対する表式を得るために、最後に $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \to 0$ の極限をとった。スピン緩和率を無次元化するための運動量緩和時間とスピン緩和時間の単位として使用する τ_{p0} と τ_{s0} の定義は、式 (205) と (206) と同じである。

7.3 計算結果

7.3.1 (111) 単一量子井戸における有効磁場の釣り合い

Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による有効磁場の和を抑制した結果について記す（図 39 参照）。井戸層の半導体 W は $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ であり、障壁層の半

導体については、B_1 は Al の割合 x が $x_1 = 0.253$ である $Al_{x_1}Ga_{1-x_1}As_{y_1}Sb_{1-y_1}$ であり、B_2 は $x_2 = 0.323$ の $Al_{x_2}Ga_{1-x_2}As_{y_2}Sb_{1-y_2}$ である。井戸層の半導体 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ と障壁層の半導体 $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ の間の伝導帯のバンドオフセット CBO は、線形補間の下では次式で与えられる Al の割合 x の 1 次関数である。

$$\mathrm{CBO} = 0.436 + 1.43x. \tag{219}$$

x_1 と x_2 の値は、電子面密度 $N_s = 0$ において、基底サブバンドの Rashba 係数 α_0 と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数 β_0 の和の、印加電場 E_z について 0 次の項と 1 次の項の係数がゼロになるように決めた。一方、2 つの障壁層の半導体それぞれの As の割合 y は、それらの半導体が井戸層の半導体および基板 InP に格子整合するように設定することができる。図 39(b) に示したように、$\alpha_0 + \beta_0$ は E_z の広い範囲において β_0 よりずっと小さい値になっている。

7.3.2 (111) 2 重量子井戸構造における Dyakonov-Perel スピン緩和のスイッチング

次に、有効磁場が抑制された量子井戸と、$E_z = 0$ でも Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場が大きくなるように非対称で（左側の障壁層の半導体 B_3 は $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ で Al の割合は $x_3 = 1$）井戸幅を狭くしたもう 1 つの量子井戸から成る 2 重量子井戸構造について考える（図 40(a) 参照）。その 2 つの量子井戸の間の厚い障壁層は、スピン緩和が on または off である E_z において、2 つの量子井戸に局在する状態が互いに混成しないようにする。図 40(b) に E_z による $\alpha_0 + \beta_0$ のスイッチングの様子を示した。有効磁場が抑制された右の量子井戸に電子が局在する $E_z \sim 0$ の off 状態では、$\alpha_0 + \beta_0$ は無視できるほど小さく、Rashba スピン軌道相互作用の大きい左の量子井戸へ電子が移動した大きな E_z での on 状態では、$\alpha_0 + \beta_0$ は大きな値になる。$E_z = 20 \times 10^6$ V$\cdot$ m^{-1} の近傍で $\alpha_0 + \beta_0$ は不連続的に増加している。

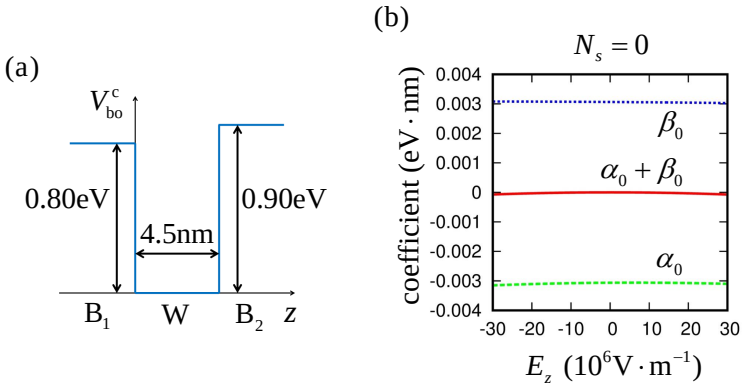


図 39: (a) 障壁層の半導体 $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ の Al の割合が左右の障壁層で非対称な (111) 量子井戸における伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V^{c}_{bo}(z)$。　井戸層の半導体は $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ である。障壁層 B_1 (B_2) の半導体の Al の割合 x は、$x_1 = 0.253$ ($x_2 = 0.323$) である。(b) 基底サブバンドの電子の Rashba スピン軌道相互作用の係数 α_0 (破線)。 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数 β_0 (点線)、$\alpha_0 + \beta_0$ (実線) を、面直方向の印加電場 E_z の関数としてプロットしたもの。添え字 “0” は基底サブバンドを表す。電子面密度は $N_s = 0$ （(a)(b) ともに文献 [29] より。図の転載は IOP Publishing により許可されている。)。

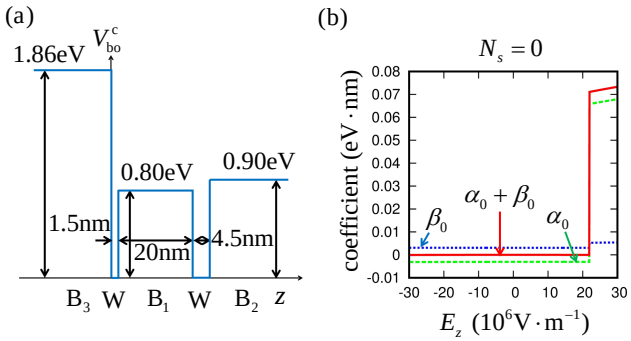


図 40: (a) 図 39 (b) に示した有効磁場が抑制された量子井戸（右）と有効磁場が大きい量子井戸（左）から構成された (111) 2 重量子井戸構造の伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V^{c}_{bo}(z)$。半導体 W, B_1, B_2 は図 39 と同じ。障壁層の半導体 B_3 は $AlAs_ySb_{1-y}$ である。(b) 図 39 (b) と同じ係数が 2 重量子井戸構造についてプロットされている。和 $\alpha_0 + \beta_0$ は $E_z = 20 \times 10^6$ V·m^{-1} の近傍で不連続的に増加している（(a)(b) ともに文献 [29] より。図の転載は IOP Publishing により許可されている。)。

図 41 に、2 重量子井戸構造の $N_s = 4 \times 10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ での電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の温度依存性を示した。図 41 (a) は線形目盛りで、図 41 (b) は片対数目盛でプロットした。図 41 (b) より E_z が $0 < E_z/(10^6\ \mathrm{V\cdot m}^{-1}) < 20$ の範囲で、温度が絶対零度から室温まで上がると $1/\tau_{zz}$ は数桁大きくなることが分かる。この理由は、温度が上がると励起サブバンド $(n = 1)$ を占有する電子が増え、その波動関数 φ_n の大きな振幅が左の量子井戸にあるため、その電子によりスピン緩和が発生するからである。しかし、$1/\tau_{zz}$ が on、off となる E_z をそれぞれ $E_z/(10^6\ \mathrm{V\cdot m}^{-1}) = 30$ と-5 にとったとき、$1/\tau_{zz}$ の on/off 比は絶対零度から室温まで 10^7 のオーダーに達する。この理由は、左の量子井戸の井戸幅を右の量子井戸の井戸幅より小さくすることにより、基底サブバンドと励起サブバンドのエネルギー差を大きくすることができ、励起サブバンドを占有する電子の数を小さくできたからである。図 42 には、2 重量子井戸構造の室温でのスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の電子面密度 N_s 依存性を示した。図より N_s 依存性は強くないことが分かる。

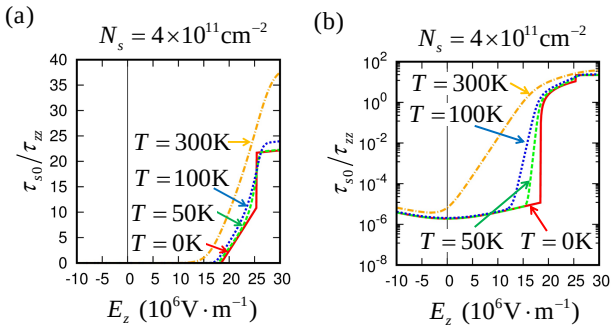


図 41: 図 40(a) に示した 2 重量子井戸構造の面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の温度依存性。N_s は電子面密度。(a) は線形目盛りで (b) は片対数目盛でプロットした（(a)(b) ともに文献 [29] より。図の転載は IOP Publishing により許可されている。）。

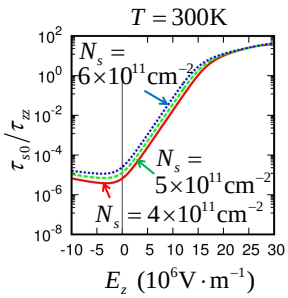


図 42: 図 40(a) に示した 2 重量子井戸構造の面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の $T = 300\mathrm{K}$ での電子面密度 N_s 依存性。片対数目盛でプロットした [29]。図の転載は IOP Publishing により許可されている。

6.4.3 節と同様にして、図 40 の 2 重量子井戸構造について左右の井戸幅、それら 2 つの井戸間の障壁幅を ±20 %変化させたときのスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の 300K での計算結果を示す。図 40 の 2 重量子井戸構造について、スピン緩和率の左の井戸幅依存性（図 43(a) 参照）は、次のようにして理解できる。左の井戸幅を小さく（大きく）すると、左の井戸の束縛状態の基底エネルギーが高く（低く）なり、$E_z = 0$ での第 1 励起サブバンド端のエネルギー ε_1 と基底サブバンド端のエネルギー ε_0 の差 $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ は+20 %、0 %、-20 %の順に大きくなる。そのため、左の井戸幅が狭いほど電子は励起サブバンドを占有しにくくなるためである。スピン緩和率の右の（有効磁場が抑制された）量子井戸の井戸幅依存性（図 43(b) 参照）は、井戸幅を ±20 %変化させたことにより $\alpha_0 + \beta_0$ の値がゼロからずれることから理解できる。スピン緩和率 off のときの値が、−20 %変化させたたときの方が +20 %変化させたときに比べて大きいのは、$|\alpha_0 + \beta_0|$ の値が前者の方が大きいためである。内側の障壁幅依存性（図 44 参照）については、内側の障壁幅を ±20 %変化させても、スピン緩和率 on の値も off の値もほとんど変化していない。on/off 比の観点で言うと、左の井戸幅を大きく（小さく）すると on/off 比は小さく（大きく）なり、右の井戸幅を変化させると on/off 比は小さくなる。

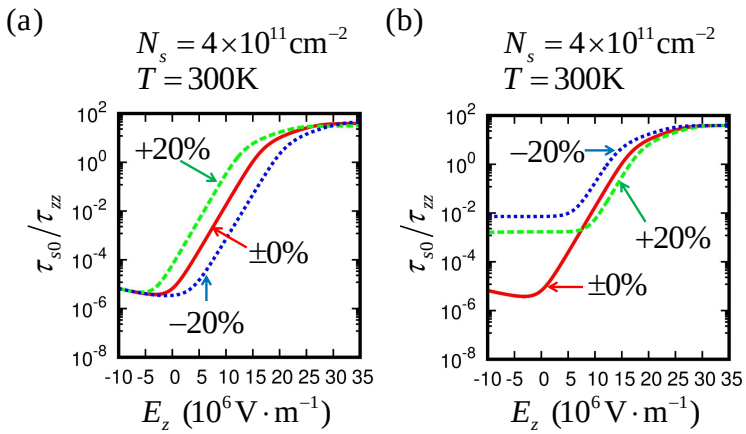


図 43: (a)$T = 300\mathrm{K}$ での、図 40 の 2 重量子井戸の左の井戸幅を ±20 %変化させたときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$。(b)$T = 300\mathrm{K}$ での、図 40 の 2 重量子井戸の右の井戸幅を ±20 %変化させたときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$。(a)(b) ともに比較のため図 40 の 2 重量子井戸の場合のグラフも示す (赤線)。片対数目盛でプロットした。井戸層の半導体 W と障壁層の半導体 B_1,B_2,B_3 は図 40 と同じ（(a)(b) ともに文献 [29] より。図の転載は IOP Publishing により許可されている。)。

図 45 には、半導体 B_3 を用いた障壁層が右側にあるもう 1 つの 2 重量子井戸構造の $N_s = 4\times10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ でのスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の温度依存性を示した。この 2 重量子井戸構造では、スピン緩和率 on のときの α_0 と β_0 の符号が異なるため、on のときの $1/\tau_{zz}$ は半導体 B_3 を用いた障壁層が左側にある 2 重量子井戸構造よりも小さい。しかし、その on/off 比は 2 つの 2 重量子井戸構造で同じオーダーであった。

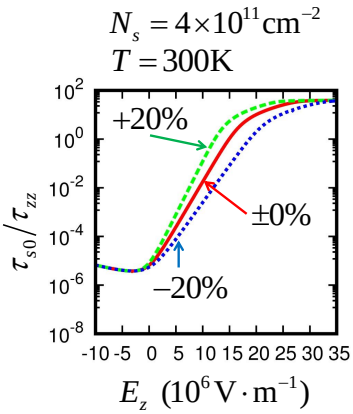


図 44: $T = 300$K での、図 40 の 2 重量子井戸の 2 つの井戸間の障壁幅を ±20 %変化させたときの面直方向の電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$。比較のため図 40 の 2 重量子井戸の場合のグラフも示す (赤線)。片対数目盛でプロットした。井戸層の半導体 W と障壁層の半導体 B_1,B_2,B_3 は図 40 と同じ。[29]。図の転載は IOP Publishing により許可されている。

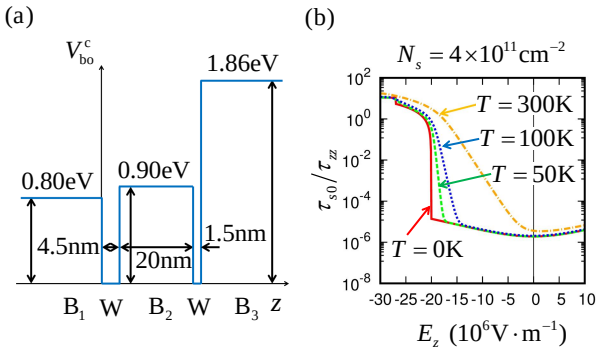


図 45: (a) 図 40(a) に示したものと半導体 B_3 を用いた障壁層 の位置が異なる 2 重量子井戸構造の伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V^c_{bo}(z)$。(b) 電場 E_z に対するスピン緩和率 $1/\tau_{zz}$ の温度依存性。N_s は電子面密度。片対数目盛でプロットした（(a)(b) ともに文献 [29] より。図の転載は IOP Publishing により許可されている。)。

最後に、本章の以上の計算に取り入れなかった 3 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用 [21, 89] の影響を議論する。3 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用は面内の波数 $k = |\boldsymbol{k}|$ について 3 次なので、1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用より $(kd/\pi)^2$ 倍程度小さい。ここで d は井戸幅であり、障壁の高さが無限大の単一量子井戸の基底サブバンドを占有する電子では $\left\langle \hat{k}_z^2 \right\rangle = (\pi/d)^2$ である。そのため、井戸幅の狭い量子井戸に関する多くの研究では考慮されなかった。しかし、先行研究 [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28] や本研究では、1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用と Rashba スピン軌道相互作用はキャンセルしあう。そのため、Rashba スピン軌道相互作用の大きい on 状態では 3 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用は無視できるが、off 状態ではそれは支配的になる。図. 40(a) と 45(a) の 2 重量子井戸構造で $N_s = 4 \times 10^{11}\mathrm{cm}^{-2}$ の場合について、3 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用によるスピン緩和率 off の値を見積もった結果、スピン緩和率の on/off 比は絶対零度では 10^5 に、室温では 10^4 に減少した。

7.4 結論

本研究では、(111) 面上に成長させた InGaAs/AlGaAsSb 量子井戸において、Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用による有効磁場は、左右の障壁層に用いる $\mathrm{Al}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}_y\mathrm{Sb}_{1-y}$ の Al の割合を調節することにより、ゲートにより印加する電場の 0 次と 1 次において互いにキャンセルできることを示した。また、上記のように有効磁場を抑制した量子井戸と大きな Rashba スピン軌道相互作用を持つ量子井戸から成る 2 重量子井戸構造では、ゲートにより印加する電場を変えることにより Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率を、室温でも高い on/off 比でスイッチングできることを示した。

8 総括

本博士論文の研究では、スピン緩和の on/off により電流の on/off を行うスピン緩和 FET の性能向上を一つの動機として、半導体量子井戸構造において Dyakonov-Perel 機構に基づくスピン緩和率の on/off 比を大きくする方法を探求した。スピン緩和率を大きく変える方法はスピン緩和 FET 以外にも有用であると期待される。本論文では、スピン緩和を on/off する方法として、有効磁場の大きい量子井戸と（電場の広い範囲で）有効磁場を抑制した量子井戸の間をゲート電圧により電子に移動させて有効磁場を on/off することによりスピン緩和を on/off する方法を提案した。この方法の長所は、ゲート電圧が多少ずれてもスピン緩和率の on/off 比が大きく減少することを回避できるとともに、スピン緩和の on/off に必要なゲート電圧の増減幅も小さくできることである。

本研究では、面方位が (110) の 3 重量子井戸構造と (111) の 2 重量子井戸構造について、室温でのスピン緩和率の on/off 比が大きくなる構造を探求した。(110) 3 重量子井戸構造では、Dresselhaus 有効磁場がスピン緩和に寄与しない面直方向のスピン偏極についてのみ、スピン緩和を on/off できる。一方 (111) 2 重量子井戸構造では、あらゆる方向のスピン偏極についてスピン緩和を on/off できる。スピン緩和 FET に応用する際、ソース電極から 2 次元チャネルに入射する電子が正確に面直方向にスピン偏極している場合は (110) 3 重量子井戸構造を用いることで大きいスピン緩和率 on/off 比が得られるが、スピン偏極の向きが面直方向でない場合は (111) 2 重量子井戸構造を用いることによりはじめてスピン緩和率 on/off 比を大きくできる。

高温において電子占有率が増す励起サブバンドがスピン緩和率にもたらす影響を評価するために、基底サブバンドのみを考慮した Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率の表式 [1, 2] を励起サブバンドも考慮した表式に拡張し、その拡張した表式を用いてスピン緩和率を計算した。スピン緩和率の off での値を抑制し on/off 比を大きくするためには励起サブバンドと基底サブバンドの間のエネルギー差を大きくする必要がある。そのための方針として、有効磁場を抑制する量子井戸を広くし有効磁場を大きくする量子井戸を狭くするガイドラインを立てた。このガイドラインに基づき設計した (110) 3 重量子井戸構造について次の 3 つの計算結果が得られた。

(1) 外側の障壁層の半導体 A として $In_{0.52}Al_{0.48}As$ を用いた 3 重量子井戸構造（図 46）において、絶対零度でのスピン緩和率の on/off 比は 10^6 に達したが、室温 (300K) では、励起サブバンドを占める電子がスピン緩和率の off での値を引き上げるため、スピン緩和率の on/off 比は 10^1 にまで減少した。

(2) スピン緩和 off のときの励起サブバンドの影響を低減するために、半導体 A として伝導帯のバンドオフセットが大きい $AlAs_ySb_{1-y}$ を用いて障壁を高くし、左右の井戸をさらに狭くできるようにした（図 47）。この図 47 の構造では、図 46 の構造に比べて、電場がゼロのときの基底サブバンド端と第 1 励起サブバンド端の間のエネルギー差が 0.36 eV 増加した。その結果スピン緩和 off の電場領域において励起サブバンドの影響を低減することができ、スピン緩和率の on/off 比は室温でも 10^6 に達した。

(3) この構造（図 47）における室温でのスピン緩和率は、単一量子井戸構造 A/W/A に比べて、off での値が 10^{-3} 程度になり on での値も増大して on/off 比は数桁上がった。

(111) 2 重量子井戸構造では、Rashba 係数 α と 1 次の Dresselhaus スピン軌道相互作用の係数 β とが打ち消し合い（あらゆる方向のスピン偏極に対して）スピン緩和が抑制されるように左右の障壁層の半

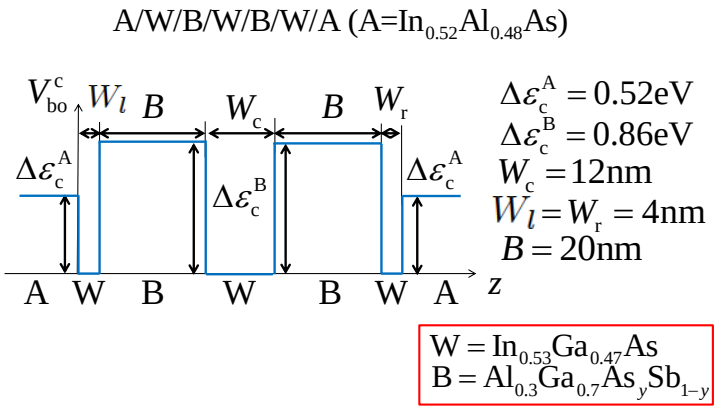


図 46: 外側の障壁層の半導体 A が $In_{0.52}Al_{0.48}As$ である 3 重量子井戸構造の伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{bo}^{c}(z)$ [20]（図の転載は American Physical Society により許可されている）。

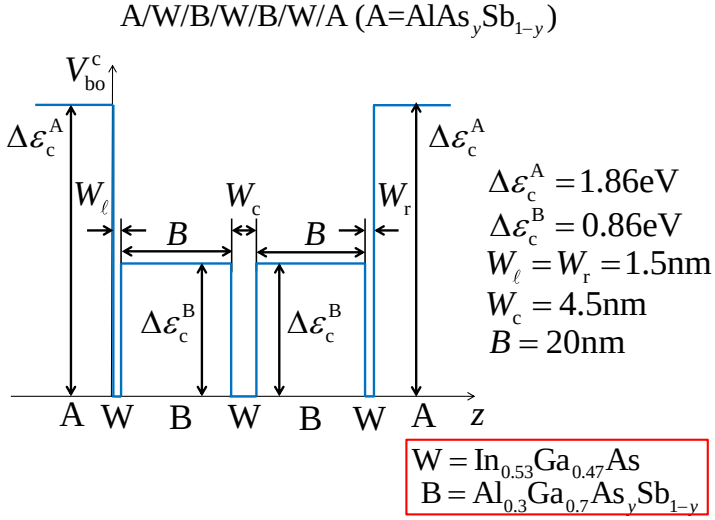


図 47: 外側の障壁層の半導体 A が $AlAs_ySb_{1-y}$ である 3 重量子井戸構造の伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{bo}^{c}(z)$ [20]（図の転載は American Physical Society により許可されている）。

導体の Al の割合 x_1, x_2 を調節した非対称量子井戸を導入し、次の 2 つの計算結果を得た。
(1) $\alpha+\beta$ の電場について 0 次と 1 次の項の係数がゼロになるように、$x_1 = 0.253$、$x_2 = 0.323$ と決定した。この非対称量子井戸において、電子面密度がゼロで印加電場の大きさ $|E_z|$ が $|E_z| \leq 3\times10^7$ $(\mathrm{V{\cdot}m^{-1}})$ のとき、基底サブバンドの $\alpha+\beta$ は $|(\alpha_0+\beta_0)/\beta_0| < 10^{-4}$ （0 は基底サブバンドを表す）に低減できた。
(2) この量子井戸と $|\alpha_0+\beta_0|$ の大きい量子井戸からなる 2 重量子井戸構造（図 48）において、あらゆる方向のスピン偏極に対して、室温でのスピン緩和率の on/off 比が 10^7 に達した。

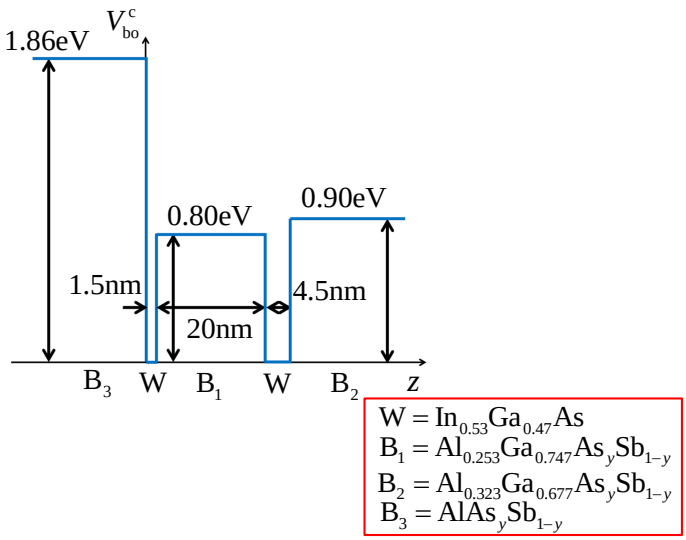


図 48: 2 重量子井戸構造の伝導帯のバンドオフセットによるポテンシャル $V_{\mathrm{bo}}^{\mathrm{c}}(z)$ [29]（図の転載は IOP Publishing により許可されている）。

A　ボルツマンの輸送方程式

本研究では、スピン緩和を定式化しスピン緩和率を計算するために、量子 Liouville 方程式を用いる。不純物密度が非常に小さいという仮定の下では、量子 Liouville 方程式からボルツマンの輸送方程式を導出できる [30]。そこで、輸送現象を取り扱う代表的手法であるボルツマンの輸送方程式について説明する。

A.1　波束による電子の運動の記述

ブロッホの定理より、電子は結晶中で波として振る舞う。$U_{\rm lattice}$ を結晶ポテンシャルとすると、結晶中の電子のハミルトニアン

$$H_0 = \hat{\boldsymbol{p}}^2/2m + U_{\rm lattice}. \tag{220}$$

の固有関数は、ブロッホ関数

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k}\rangle = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}). \tag{221}$$

により表すことができる。ここで、$\hbar\boldsymbol{k}$ は結晶運動量である。

電場等の外場が加わっている場合を考えるには、そのポテンシャルの空間変動スケールを λ として、Δr（波束の広がり）$\ll \lambda$ となる波束の運動を考えるのが便利である。ただし、Δr（波束の広がり）$\gg R$（不純物ポテンシャルの及ぶ距離）とする。

次に、波束による自由電子の運動の記述について記す。式 (220) 中の $U_{\rm lattice}$ を無視する。そのとき固有関数と固有エネルギーは次の 2 式のようになる。

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k}\rangle &= V^{-1/2}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}), & (222)\\ \varepsilon_{\boldsymbol{k}} &= \hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m. & (223) \end{aligned}$$

また、時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k},t\rangle = \langle \boldsymbol{r}\,|H_0|\,\boldsymbol{k},t\rangle\,. \tag{224}$$

の解は、

$$\psi(\boldsymbol{k}) \equiv \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k},t\rangle = V^{-1/2}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - i\varepsilon(\boldsymbol{k})t/\hbar). \tag{225}$$

となる。したがって、波数 $\boldsymbol{k}_0$ の近傍の波数 $\boldsymbol{k}$ ($|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0| \le \Delta k$) を持つ固有関数を重ね合わせた波束（wave packet）は

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi_{\rm wp}\rangle = \int d\boldsymbol{k} f(\boldsymbol{k})\psi(\boldsymbol{k}) = A(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{k}_0). \tag{226}$$

と書ける。ここで、$f(\boldsymbol{k}) = 0$ ($|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0| > \Delta k$) であり、

$$\begin{aligned} A(\boldsymbol{r}) &= \int d\boldsymbol{k} f(\boldsymbol{k})\exp(i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r} - i[\varepsilon(\boldsymbol{k})-\varepsilon(\boldsymbol{k}_0)]t/\hbar)\\ &\approx \int d\boldsymbol{k} f(\boldsymbol{k})\exp(i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot[\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}_0)t]), & (227) \end{aligned}$$

ただし、$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}) = \hbar^{-1}\partial\varepsilon/\partial\boldsymbol{k} = \hbar\boldsymbol{k}/m$ は群速度である。上式より、波束は $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}_0)$ で移動することが分かり、$\Delta r\Delta k \sim 1$ を満たす広がり Δr を持つ。

本節の最後に、ポテンシャル中の電子の波束による記述について記す。波束を $|\psi\rangle$ で表し、

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}), \tag{228}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle. \tag{229}$$

であるとする。ここで、ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ は緩やか、すなわち $\lambda \gg \Delta r$ であるとし、波束は規格化されているとする。また、波束の実空間、波数空間の広がりを、それぞれ Δr、Δk とする。このとき、ポテンシャル勾配は Δr 内で一定であり、$\langle\boldsymbol{p}\rangle = \hbar\boldsymbol{k}_0$，$\langle\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}_0$ とおく。次の 2 式を用いると（$\nabla_x = (i/\hbar)\hat{p}_x$）、

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi\,|[\hat{p}_x, H]|\,\psi\rangle = \langle\psi|(-\nabla_x V)|\psi\rangle\,, \tag{230}$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi\,|[\hat{x}, H]|\,\psi\rangle = \frac{1}{m}\langle\psi|\hat{p}_x|\psi\rangle\,. \tag{231}$$

次の 2 式が得られる。

$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}}_0 = -\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{r}_0), \tag{232}$$

$$\dot{\boldsymbol{r}}_0 = \frac{\hbar\boldsymbol{k}_0}{m} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}_0). \tag{233}$$

A.2　分布関数とボルツマンの輸送方程式

本節の前半で分布関数について、後半でボルツマンの輸送方程式について記す。

波束の実空間での広がりを Δr とし、その中心を $\boldsymbol{r}$ とする。そのとき、波数空間での広がりは $\Delta k \sim 1/\Delta r$ となる。その中心の波数を $\boldsymbol{k}$ とする。次の 2 つの要請を行う。

$$\Delta r \ll \lambda\,（ポテンシャルの変動スケール）, \tag{234}$$

$$\Delta k \ll 系を特徴づける波数＝フェルミ波数. \tag{235}$$

このとき、

$$\lambda_F（フェルミ波長）\ll \Delta r \ll \lambda. \tag{236}$$

となる。今考えているゆるやかなポテンシャル（λ が大）の場合、式 (236) を満たすように Δr を設定できる。

ここで、量子力学的状態 $\boldsymbol{k}$ の占有確率を与える分布関数 $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)$ を導入する。$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)$ とは、位置 $\boldsymbol{r}$、時刻 t において波数 $\boldsymbol{k}$ の状態を電子が占有する確率のことであり、Fermi 統計より $0 \le f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) \le 1$ となる。また、統計力学より

$$量子力学的状態の数 = dxdydzdp_xdp_ydp_z/h^3 = dxdydzdk_xdk_ydk_z/(2\pi)^3. \tag{237}$$

である。ここで、周期境界条件を長さ L の系に課すと波数の間隔は $2\pi/L$ となる。また、式 (237) より、$\Delta r \Delta k \sim 1$ であるから $\Delta r \Delta k$ に状態がおよそ 1 個あることになる。また、同じく式 (237) より、

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) dx dy dz dk_x dk_y dk_z / (2\pi)^3 = \text{電子数}, \tag{238}$$

$$\int f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) dx dy dz dk_x dk_y dk_z / (2\pi)^3 = N \text{（総電子数）}. \tag{239}$$

である。さらに、平衡状態（電流＝０）では、分布関数は Fermi 分布関数に等しくなり、

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) = f_0(\varepsilon_k) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{k_B T}\right) + 1}. \tag{240}$$

である。最後に分布関数を用いて研究を行う立場について記す。それは、N 個（総電子数）の電子それぞれの配置を求めることは不可能である。そこで電子数の平均、すなわち分布関数を求める。分布関数より電流密度を求めることができる。

A.1 節より、波束の運動は $\dot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{v_k}$ と $\hbar \dot{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{F} = -\boldsymbol{\nabla} V(\boldsymbol{r})$ により記述できる。時刻 t に $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k})$ にあった電子は $t + dt$ には $(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{v_k} dt, \boldsymbol{k} + \hbar^{-1} \boldsymbol{F} dt)$ にくる（図 49 参照）。

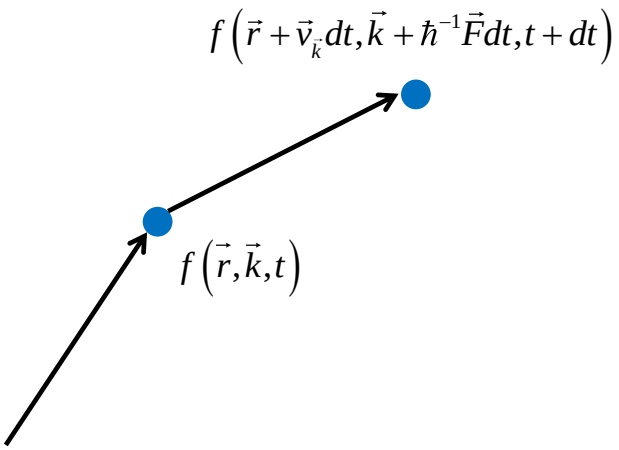


図 49: 電子の流れと分布関数の変化。時刻 t で $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)$ であったものは dt 後には他の状態に変化する。

電子数保存より次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} &f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) d\boldsymbol{r}(t) d\boldsymbol{k}(t) / (2\pi)^3 \\ &= f(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{v_k} dt, \boldsymbol{k} + \hbar^{-1} \boldsymbol{F} dt, t + dt) d\boldsymbol{r}(t + dt) d\boldsymbol{k}(t + dt) / (2\pi)^3. \end{aligned} \tag{241}$$

上式と Liouville の定理 $d\boldsymbol{r}(t) d\boldsymbol{k}(t) = d\boldsymbol{r}(t + dt) d\boldsymbol{k}(t + dt)$ より

$$f(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{v_k} dt, \boldsymbol{k} + \hbar^{-1} \boldsymbol{F} dt, t + dt) = f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t). \tag{242}$$

が成り立つ。

次に不純物との衝突を考慮する。流れ（ドリフト）による分布関数 f の時間的変化を $(\partial f/\partial t)_{\rm d}$（ドリフト項）とし、衝突による分布関数 f の時間的変化を $(\partial f/\partial t)_{\rm c}$（衝突項）とすると、次の関係が成り立つ。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm d} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm c} = 0, \tag{243}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm d} dt = -[f(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} dt, \boldsymbol{k} + \hbar^{-1}\boldsymbol{F} dt, t + dt) - f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)], \tag{244}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm c} dt = \sum_{\boldsymbol{k}'}[-W_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} dt\ f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) + W_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} dt\ f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t)]. \tag{245}$$

ただし、$W_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}$ は波数 $\boldsymbol{k}$ の状態から波数 $\boldsymbol{k}'$ の状態への単位時間あたりの遷移確率である。ここで、フォノン散乱の場合の衝突項は次式のようになる。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\rm c}^{\rm ph} dt = \sum_{\boldsymbol{k}'}[-W^{\rm ph}_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} dt\ f(\boldsymbol{k})(1 - f(\boldsymbol{k}')) + W^{\rm ph}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} dt\ f(\boldsymbol{k}')(1 - f(\boldsymbol{k}))]. \tag{246}$$

なお、不純物散乱の場合の衝突項（式 (245)）の導出は、2.3 節と Appendix D で述べる。上の式 (243)、(244)、(245) から次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} & f(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} dt, \boldsymbol{k} + \hbar^{-1}\boldsymbol{F} dt, t + dt) - f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) \\ & = \sum_{\boldsymbol{k}'}[-W_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} dt\ f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) + W_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} dt\ f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t)], \end{aligned} \tag{247}$$

$$\begin{aligned} \therefore \quad & \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \hbar^{-1}\boldsymbol{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{k}} \\ & = \sum_{\boldsymbol{k}'}\left[-W_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) + W_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t)\right]. \end{aligned} \tag{248}$$

式 (248) をボルツマン方程式と呼ぶ。

B　量子 Liouville 方程式の導出

状態ケットに対するシュレーディンガー方程式は次式の通りである。

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle. \tag{249}$$

その状態ケットを基底ケット $|\nu\rangle$ で展開する。すなわち

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu} c_\nu(t)|\nu\rangle. \tag{250}$$

とする。式 (249) に式 (250) を代入すると、

$$i\hbar\sum_{\nu}\frac{dc_\nu}{dt}|\nu\rangle = \sum_{\nu} c_\nu H|\nu\rangle. \tag{251}$$

となる。左から $\langle\nu'|$ を掛けて内積をとると、次式が得られる。

$$i\hbar\frac{dc_{\nu'}}{dt} = \sum_{\nu} H_{\nu'\nu}c_\nu, \tag{252}$$

ここで、$H_{\nu'\nu} = \langle\nu'|H|\nu\rangle$ である。

続いて密度行列の定義式 $\rho^{\rm one}_{\nu\nu'} = \left\langle c_\nu(t)c^*_{\nu'}(t)\right\rangle$ を、取り得る量子状態 $|\psi^{(i)}\rangle$ の基底ケット $|\nu\rangle$ $(\nu = 1,2,\cdots)$ による展開係数 $c^{(i)}_\nu(t)$ $(\nu = 1,2,\cdots)$ とその量子状態が見い出される確率 $w^{(i)}$ を用いて、次のように書き直す。

$$\rho^{\rm one}_{\nu\nu'} = \langle c_\nu(t)c^*_{\nu'}(t)\rangle = \sum_i w^{(i)}c^{(i)}_\nu(t)c^{(i)*}_{\nu'}(t). \tag{253}$$

上式の両辺を t で微分したものは、式 (252) より次のようになる。

$$\begin{aligned}\frac{d\rho^{\rm one}_{\nu\nu'}}{dt} &= \sum_i w^{(i)}\left[\frac{dc^{(i)}_\nu}{dt}c^{(i)*}_{\nu'} + c^{(i)}_\nu\frac{dc^{(i)*}_{\nu'}}{dt}\right]\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(\sum_\mu H_{\nu\mu}\rho^{\rm one}_{\mu\nu'} - \sum_\mu \rho^{\rm one}_{\nu\mu}H_{\mu\nu'}\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(H\rho^{\rm one} - \rho^{\rm one}H\right)_{\nu\nu'},\end{aligned} \tag{254}$$

ここで、$H_{\mu\nu'} = H^*_{\nu'\mu}$ の関係を用いた。ゆえに、

$$i\hbar\frac{d\rho^{\rm one}}{dt} = \left[H,\rho^{\rm one}\right]. \tag{255}$$

である。

C Kohn-Luttinger の密度行列に関する導出

2.2 節の式 (20)、(21)、(22) を順番に示す。まず、1 電子に働く演算子の和で表される多電子系の演算子 $\tilde{A}$ は第二量子化の形式で次のように書ける。

$$\tilde{A} = \sum_{\nu,\nu'} A_{\nu'\nu} a^\dagger_{\nu'} a_\nu, \tag{256}$$

$$A_{\nu'\nu} = \langle \nu' | A | \nu \rangle, \tag{257}$$

ここで、A は 1 電子に働く演算子であり、$|\nu\rangle$、$|\nu'\rangle$ は 1 電子系の基底ケットである。このとき、式 (13)、(19)、(256) より

$$\begin{aligned}
\left\langle \left\langle \Psi \left| \tilde{A} \right| \Psi \right\rangle \right\rangle &= \mathrm{Tr}(\tilde{\rho}\tilde{A}) \\
&= \sum_{\nu,\nu'} \mathrm{Tr}(\tilde{\rho} a^\dagger_{\nu'} a_\nu) A_{\nu'\nu} \\
&= \sum_{\nu,\nu'} \rho_{\nu\nu'} A_{\nu'\nu} \\
&= \mathrm{tr}(\rho A).
\end{aligned} \tag{258}$$

であり、式 (20) が成り立つことが言える。ただし、$\mathrm{tr}(\rho A)$ は 1 電子系の基底ケット $|\nu\rangle$ での演算 $\sum_\nu \langle \nu | \rho A | \nu \rangle$ である。

次に、多電子系の密度演算子 $\tilde{\rho}$ とハミルトニアン $\tilde{H}$ は式 (14) を満たす。その式に $a^\dagger_{\nu'} a_\nu$ を掛けて N 電子系の基底ケット $|\boldsymbol{n}\rangle$ で $\mathrm{Tr}(\cdots) = \sum_{\boldsymbol{n}} \langle \boldsymbol{n} | \cdots | \boldsymbol{n} \rangle$ をとると、次式のようになる。

$$i\hbar \frac{d\mathrm{Tr}\left(\tilde{\rho} a^\dagger_{\nu'} a_\nu\right)}{dt} = \mathrm{Tr}\left(a^\dagger_{\nu'} a_\nu [\tilde{H}, \tilde{\rho}]\right). \tag{259}$$

上式の左辺は式 (19) より $i\hbar(d\rho_{\nu\nu'}/dt)$ である。一方、上式の右辺は次式のようになる。

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\left(a^\dagger_{\nu'} a_\nu [\tilde{H}, \tilde{\rho}]\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(a^\dagger_{\nu'} a_\nu \tilde{H} \tilde{\rho}\right) - \mathrm{Tr}\left(a^\dagger_{\nu'} a_\nu \tilde{\rho} \tilde{H}\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left(a^\dagger_{\nu'} a_\nu \tilde{H} \tilde{\rho}\right) - \mathrm{Tr}\left(\tilde{H} a^\dagger_{\nu'} a_\nu \tilde{\rho}\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left([a^\dagger_{\nu'} a_\nu, \tilde{H}] \tilde{\rho}\right) \\
&= \mathrm{Tr}\left[\sum_{\nu''} (a^\dagger_{\nu'} a_{\nu''} H_{\nu\nu''} - a^\dagger_{\nu''} a_\nu H_{\nu''\nu'}) \tilde{\rho}\right] \\
&= \sum_{\nu''} [H_{\nu\nu''} \rho_{\nu''\nu'} - \rho_{\nu\nu''} H_{\nu''\nu'}] \\
&= (H\rho - \rho H)_{\nu\nu'},
\end{aligned} \tag{260}$$

ここで、$(\cdots)_{\nu\nu'}$ は括弧内の行列の (ν, ν') 成分を表し、導出には式 (16) と、消滅演算子と生成演算子の間の反交換関係を用いた。上記の結果を演算子の形式で書くと、式 (21) と同じ

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]. \tag{261}$$

となる。

最後に、式 (15) を用いると、

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\rho) &= \sum_{\nu} \rho_{\nu\nu} \\
&= \mathrm{Tr}(\tilde{\rho} \sum_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}) \\
&= \sum_{\boldsymbol{n}} \left\langle \boldsymbol{n} \left| \tilde{\rho} \sum_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} \right| \boldsymbol{n} \right\rangle \\
&= N \sum_{\boldsymbol{n}} \langle \boldsymbol{n} | \tilde{\rho} | \boldsymbol{n} \rangle \\
&= N. \qquad (262)
\end{aligned}$$

となり、式 (22) が得られる。

D　衝突項の導出の詳細

2.3 節の式 (34) の J_1 と式 (35) の J_2 の評価を詳細に記す。まず、式 (34) 中の $\langle \boldsymbol{k}'|V_I(t)|\boldsymbol{k}\rangle$ がゼロであることについて記す。$U^\dagger(t)$、$U(t)$ をそれぞれブラ、ケットに作用させた結果かかる t や t' の指数関数については考えない。

$$\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{k}'|V(t)|\boldsymbol{k}\rangle \\
=\ & \frac{1}{V}\sum_i^{N_{\rm imp}} \int_V d\boldsymbol{r} e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)e^{\delta t} \\
=\ & \frac{1}{V}\sum_i^{N_{\rm imp}} e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_i} \int_V d\boldsymbol{r}' e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}'} u(\boldsymbol{r}')e^{\delta t} \\
=\ & \frac{1}{V}\sum_i^{N_{\rm imp}} \exp[-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_i] u_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}} e^{\delta t}
\end{aligned} \tag{263}$$

ここで、6 行目では $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{r}'$ とし $u(\boldsymbol{r}')$ が短距離力のポテンシャルであることを用いている。さらに、$\boldsymbol{k}'\neq\boldsymbol{k}$ であるため、$\exp[-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_i]$ を $\boldsymbol{r}_i$ について平均するとゼロになる。すなわち、

$$\frac{1}{V}\int_V d\boldsymbol{r}_i e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_i}=0 \tag{264}$$

であり、$J_1=0$ となる。

次に、式 (35) の評価について記す。積分する各項を次のようにおく。

$$A \equiv \langle \boldsymbol{k}|V_I(t)V_I(t')\rho_I|\boldsymbol{k}\rangle, \tag{265}$$

$$B \equiv \langle \boldsymbol{k}|V_I(t)\rho_I V_I(t')|\boldsymbol{k}\rangle, \tag{266}$$

$$C \equiv \langle \boldsymbol{k}|V_I(t')\rho_I V_I(t)|\boldsymbol{k}\rangle, \tag{267}$$

$$D \equiv \langle \boldsymbol{k}|\rho_I V_I(t')V_I(t)|\boldsymbol{k}\rangle \tag{268}$$

A の評価は次のようになる。式 (37) は上記の式 (263) と同様にして得られる。その式 (37) の右辺は、$i=j$ の項の $\boldsymbol{k}''=\boldsymbol{k}$ のときのみゼロでない値になる。A の評価をしてゆくと次のようになる。

$$A = \sum_{\boldsymbol{k}'}\langle \boldsymbol{k}|V_I(t)|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|V_I(t')|\boldsymbol{k}\rangle\langle \boldsymbol{k}|\rho_I|\boldsymbol{k}\rangle \tag{269}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}'}\langle \boldsymbol{k}|V_I(t)|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|V_I(t')|\boldsymbol{k}\rangle\langle \boldsymbol{k}|\rho_I(t)|\boldsymbol{k}\rangle \tag{270}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \exp\left[\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{i\hbar}(t-t')\right] f(\boldsymbol{k},t) \tag{271}$$

ここで、式 (28) より $V(t)$ の 0 次の近似で成り立つ式 $\rho_I(t)=\rho_I(-\infty)$ を用いた。同様にして

$$B = \sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}|V(t=0)|\boldsymbol{k}'\rangle|^2 \exp\left[\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}}{i\hbar}(t'-t)\right] f(\boldsymbol{k}',t), \tag{272}$$

$$C = \sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}|V(t=0)|\boldsymbol{k}'\rangle|^2 \exp\left[-\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}}{i\hbar}(t'-t)\right] f(\boldsymbol{k}',t), \tag{273}$$

$$D = \sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \exp\left[\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{i\hbar}(t'-t)\right] f(\boldsymbol{k},t). \tag{274}$$

が得られる。したがって、

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{t} dt'(A+D) \\ = & -\frac{1}{\hbar^2}\sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2\int_{-\infty}^{\infty} dT e^{i(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})T/\hbar} f(\boldsymbol{k},t) \\ = & -\sum_{\boldsymbol{k}'}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle \boldsymbol{k}'|V(t=0)|\boldsymbol{k}\rangle|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f(\boldsymbol{k},t). \end{aligned} \tag{275}$$

と、同様にして

$$\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{t} dt'(B+C) = \sum_{\boldsymbol{k}'}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle \boldsymbol{k}|V(t=0)|\boldsymbol{k}'\rangle|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}'})f(\boldsymbol{k}',t). \tag{276}$$

が得られ、最終的に

$$J_2 = \sum_{\boldsymbol{k}'}\left[-W_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}}f(\boldsymbol{k},t)+W_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}f(\boldsymbol{k}',t)\right], \tag{277}$$

$$W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} = \frac{2\pi}{\hbar}|\left\langle \boldsymbol{k}'\right|V(t=0)|\left.\boldsymbol{k}\right\rangle|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}). \tag{278}$$

が得られる。

E　1 次元井戸型ポテンシャルの問題の解法

E.1　左右の障壁の高さが有限で等しい場合

図 50 の 1 次元井戸型ポテンシャルの問題を考える。次節の左右の障壁の高さが有限で異なる場合の解法の導入のため、あまり一般的ではない解法を説明する。このときシュレーディンガー方程式は次のよ

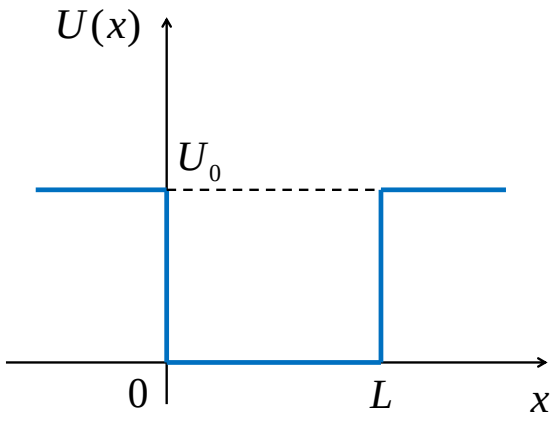


図 50: 左右の障壁の高さが有限で等しい 1 次元井戸型ポテンシャルの問題

うになる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right]\varphi(x)=\varepsilon\varphi(x) \tag{279}$$

$$U(x)=\begin{cases}0, & 0<x<L,\\ U_0, & x\le 0, x\ge L,\end{cases} \tag{280}$$

$$\therefore\quad \left[\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon-U(x)\right)\right]\varphi(x)=0. \tag{281}$$

定常状態（束縛状態）のエネルギー固有値 ε は $0<\varepsilon<U_0$ であり、

$$k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \tag{282}$$

$$\gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0-\varepsilon). \tag{283}$$

とすると、3 つの区域での式 (281) の一般解は

$$\varphi(x)=\begin{cases}A_0\mathrm{e}^{-\gamma x}+B_0\mathrm{e}^{\gamma x}, & x\le 0\\ A\sin(kx+\delta), & 0<x<L\\ A_1\mathrm{e}^{-\gamma x}+B_1\mathrm{e}^{\gamma x}, & x\ge L\end{cases}$$

と表される。$x \to \pm\infty$ で波動関数 $\varphi(x)$ がゼロであるためには、$A_0 = B_1 = 0$ でなければならない。$x = 0$ と $x = L$ で $\varphi(x)$ と $d\varphi/dx$ が連続である条件から、次の 4 つの方程式が得られる。

$$B_0 = A\sin\delta, \tag{284}$$

$$\gamma B_0 = kA\cos\delta, \tag{285}$$

$$A_1 e^{-\gamma L} = A\sin(kL+\delta), \tag{286}$$

$$-\gamma A_1 e^{-\gamma L} = kA\cos(kL+\delta). \tag{287}$$

式 (284) と式 (285) より

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{1}{k}\tan\delta. \tag{288}$$

が、式 (286) と式 (287) より次式が得られる。

$$-\frac{1}{\gamma} = \frac{1}{k}\tan(kL+\delta). \tag{289}$$

上の 2 式と $k/\gamma = \sqrt{\varepsilon/(U_0-\varepsilon)}$ より次式が得られる。

$$kL = \tan^{-1}\left(-\sqrt{\frac{\varepsilon}{U_0-\varepsilon}}\right) - \tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{U_0-\varepsilon}}\right). \tag{290}$$

ここで、任意の整数 n に対して $\tan(n\pi-\theta) = -\tan\theta$ となるので、$\xi \equiv \tan\theta$ とおくと

$$\tan(n\pi-\theta) = -\xi \tag{291}$$

$$\therefore \quad \tan^{-1}(-\xi) = n\pi - \tan^{-1}\xi \quad (n:\text{integer}). \tag{292}$$

を得る。上式を用いると式 (290) は次式のようになる。

$$kL = n\pi - 2\tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{U_0-\varepsilon}}\right). \tag{293}$$

さらに $\zeta \equiv \sin\theta$ とおくと、

$$\tan\theta = \sqrt{\frac{\sin^2\theta}{1-\sin^2\theta}} = \sqrt{\frac{\zeta^2}{1-\zeta^2}}. \tag{294}$$

$$\therefore \quad \tan^{-1}\sqrt{\frac{\zeta^2}{1-\zeta^2}} = \sin^{-1}\zeta. \tag{295}$$

と書けるので、式 (293) は次式のようになる。

$$kL = n\pi - 2\sin^{-1}\sqrt{\frac{\varepsilon}{U_0}}, \quad (n = 1,2,3,\cdots). \tag{296}$$

この式は、波数 k つまりエネルギー固有値の可能な値を決める超越方程式である。$n = 1,2,3,\cdots$ に対して式 (296) を満足する k_n の値は、$y = kL$ と単調に減少する曲線

$$\zeta_n(k) = n\pi - 2\sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}. \tag{297}$$

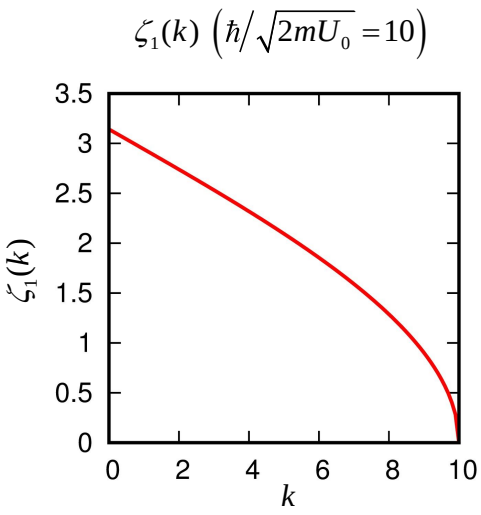


図 51: $\zeta_1(k)$ の様子

との交点の k の値に対応する（図 51 参照）。ここで、$\sin^{-1}$ の引数は 1 を越えないから、k の値は $0 \leq k \leq \sqrt{2mU_0}/\hbar$ の範囲に限ることができ、

$$0 \leq \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} \leq \frac{\pi}{2}. \tag{298}$$

とすることができる。また $\zeta_n(k)$ は単調減少する関数のため、trivial でない解 k_n になるには n は正の整数しか許されない。このようにして、対称的な 1 次元井戸型ポテンシャル中の電子の固有エネルギーは $\varepsilon_n = \hbar^2 k_n^2/2m$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ で与えられる。

次に、束縛状態の数について述べる。$y = kL$ は単調増加、$y = \zeta_n(k)$ は単調減少するから 2 つのグラフが交わるための条件は、$k = \sqrt{2mU_0}/\hbar$ のとき $kL - \zeta_n(k) > 0$、つまり

$$L\sqrt{2mU_0} > \pi\hbar(n-1). \tag{299}$$

となる。この条件は $n = 1$ のとき必ず満足される。したがって、対称な 1 次元井戸型ポテンシャルでは、L と U_0 の値の如何にかかわらず、少なくとも 1 つ束縛状態ができる。井戸の中にできる束縛状態の数は、不等式 (299) を満たす整数 n の最大値で与えられる。

この節の最後に、6 章で議論した Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場を抑制した、量子井戸 B/W/B における束縛状態のエネルギー固有値の分布を図 52 に示す。障壁の高さは 0.86eV である。井戸幅 $L \to \infty$ の極限では束縛状態は 8 つあるが、エネルギー固有値の小さいものから 4 つ示した。6.4.2 節の場合は、L=12nm であり束縛状態は 5 つある。6.4.3 節の場合は、L=4.5nm であり束縛状態は 2 つある。上記のように L をいくら小さくしても少なくとも 1 つ束縛状態がある。

E.2　左右の障壁の高さが有限で異なる場合

図 53、式 (300) のような非対称のポテンシャルの場合を考える。

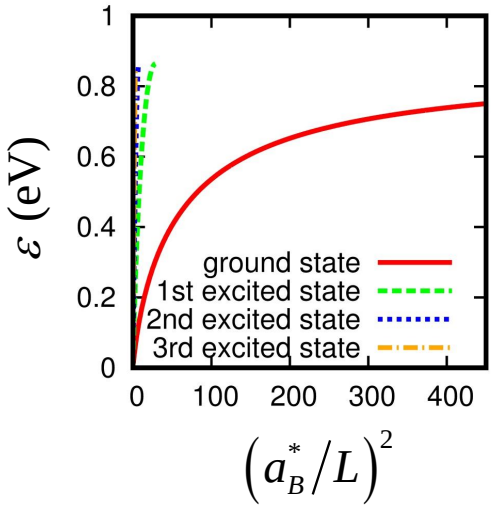


図 52: 6 章の Rashba スピン軌道相互作用による有効磁場を抑制した、量子井戸 B/W/B における束縛状態のエネルギー固有値の分布。 障壁の高さは 0.86eV である。井戸幅 $L \to \infty$ の極限では束縛状態は８つあるが、エネルギー固有値の小さいものから４つ示した。6.4.2 節の場合は、L=12nm であり束縛状態は５つある。6.4.3 節の場合は、L=4.5nm であり束縛状態は２つある。$a_B^* = 17.1$nm である。

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < L \\ U_1, & x \geq L \end{cases} \tag{300}$$

このときのシュレーディンガー方程式は次式で与えられる。

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon - U(x)\right)\right]\varphi(x) = 0. \tag{301}$$

束縛状態のエネルギー固有値 ε は $0 < \varepsilon < U_0$ であり、

$$k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \tag{302}$$

$$\gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - \varepsilon), \tag{303}$$

$$\gamma_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_1 - \varepsilon). \tag{304}$$

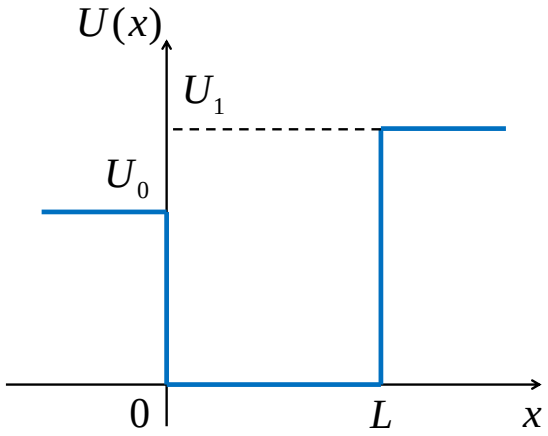


図 53: 左右の障壁の高さが有限で異なる 1 次元井戸型ポテンシャルの問題

とすると、3 つの区域での式 (301) の解は

$$\varphi(x) = \begin{cases} B_0 \mathrm{e}^{\gamma x}, & x \leq 0 \\ A\sin(kx+\delta), & 0 < x < L \\ A_1 \mathrm{e}^{-\gamma_1 x}, & x \geq L \end{cases}$$

と表される。エネルギー固有値だけを問題にする場合には、$x = 0$ と $x = L$ で対数微分 $(1/\varphi)(d\varphi/dx)$ の連続性を条件にすれば良い。そのようにして、2 つの方程式

$$\frac{k}{\gamma} = \tan\delta, \tag{305}$$

$$-\frac{k}{\gamma_1} = \tan(kL+\delta). \tag{306}$$

を得る。さらに区間 $(-\pi/2, \pi/2)$ の中に $kL+\delta$ をとることにより、上の 2 式から次式が得られる。

$$\delta = \tan^{-1}\frac{k}{\gamma}, \tag{307}$$

$$\delta = -kL - \tan^{-1}\frac{k}{\gamma_1} + n\pi, \quad (n : \text{integer}). \tag{308}$$

式 (302)、(303)、(304)、(295) を用いて δ を消去し、$\tan^{-1}$ を $\sin^{-1}$ で書き表すと、k を定める次の超越方程式が得られる。

$$n\pi - kL = \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} + \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_1}}, \quad (n = 1, 2, 3, \cdots). \tag{309}$$

ここで、$\sin^{-1}$ の引数は 1 を越えないから、k の値は $0 \leq k \leq \sqrt{2mU_0}/\hbar$ $(U_0 < U_1)$ の範囲に限ることができる。また、$n\pi - kL$ は k について単調減少する関数のため、trivial でない解 k_n になるには n は正の整数しか許されない。

次に、この節でも束縛状態の数について述べる。上式の右辺は $k=\sqrt{2mU_0}/\hbar$ のとき最大になるから、$k=\sqrt{2mU_0}/\hbar$ として $n\pi-kL$ が上式の右辺より小さい場合、すなわち

$$\frac{L}{\hbar}\sqrt{2mU_0}>\pi\left(n-\frac{1}{2}\right)-\sin^{-1}\sqrt{\frac{U_0}{U_1}}. \tag{310}$$

の条件が満たされるとき、井戸型ポテンシャル中の束縛状態は n 個存在する。しかし、$L\sqrt{U_0}$ が非常に小さいときは、束縛状態は一つも存在しない。

この節の最後に、6.4.2 節と 6.4.3 節で議論した大きな Rashba スピン軌道相互作用を持つ非対称量子井戸 A/W/B、B/W/A における束縛状態のエネルギー固有値の分布を図 54 に示す。図 54(a) は A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ の場合であり、その障壁の高さは 0.52eV である。図 54(b) は A=$AlAs_ySb_{1-y}$ の場合であり、その障壁の高さは 1.86eV である。井戸幅 $L\to\infty$ の極限では、前者は束縛状態が 6 つあり後者は束縛状態が 8 つあるが、エネルギー固有値の小さいものから 4 つ示した。(a) の A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ の場合、6.4.2 節の L=4nm では束縛状態は 1 つ存在し、$L\leq 0.885$nm では束縛状態は 1 つも存在しない。また、(b) の A=$AlAs_ySb_{1-y}$ の場合、6.4.3 節の L=1.5nm では束縛状態は 1 つ存在し、$L\leq 0.833$nm では束縛状態は 1 つも存在しない。

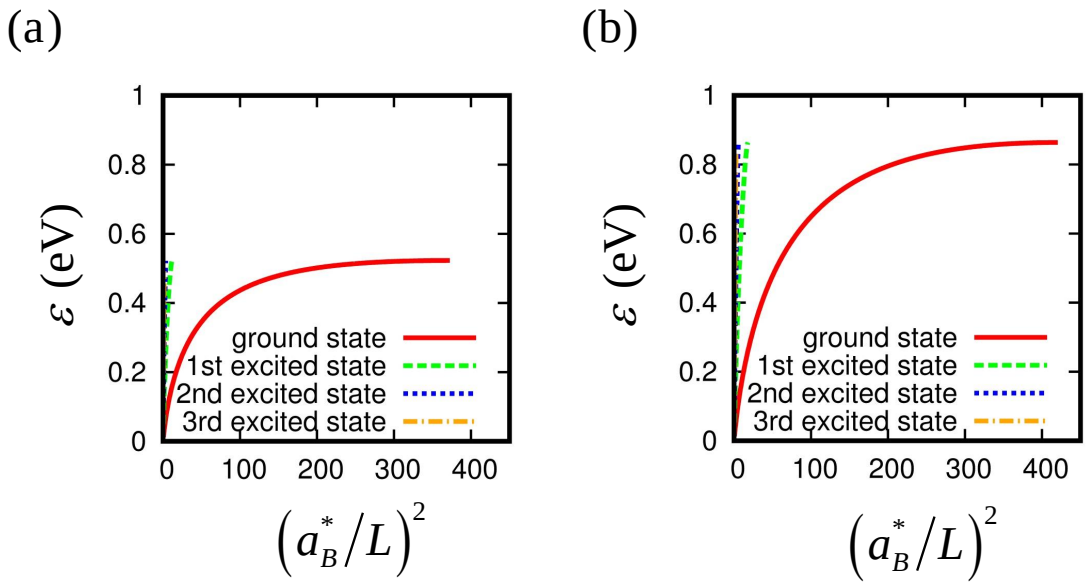


図 54: 6.4.2 節と 6.4.3 節で議論した大きな Rashba スピン軌道相互作用を持つ非対称量子井戸 A/W/B、B/W/A における束縛状態のエネルギー固有値の分布。(a)A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ の場合であり、その障壁の高さは 0.52eV。(b)A=$AlAs_ySb_{1-y}$ の場合であり、その障壁の高さは 1.86eV。井戸幅 $L \to \infty$ の極限では、(a) の A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ の場合は束縛状態が 6 つあり、(b) の A=$AlAs_ySb_{1-y}$ の場合は束縛状態が 8 つあるが、エネルギー固有値の小さいものから 4 つ示した。(a) の A=$In_{0.52}Al_{0.48}As$ の場合、6.4.2 節の L=4nm では束縛状態は 1 つ存在し、$L \leq 0.885$nm では束縛状態は 1 つも存在しない。また、(b) の A=$AlAs_ySb_{1-y}$ の場合、6.4.3 節の L=1.5nm では束縛状態は 1 つ存在し、$L \leq 0.833$nm では束縛状態は 1 つも存在しない。$a_B^* = 17.1$nm である。

F　時間反転対称性や空間反転対称性があるときのエネルギー固有値がもつ関係の導出

スピン軌道相互作用も含むハミルトニアンは、次式のように書ける。

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{\nabla}U)\times\hat{\boldsymbol{p}}], \tag{311}$$

U は $U_{\rm lattice}$ の添え字を省略している。$\boldsymbol{r}-$ 表示したものがブロッホ関数になる、ハミルトニアン H の固有ケットを $|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ と表す。ここで σ はパウリ行列 σ_z の固有値を表している[8]。基本並進ベクトル $\boldsymbol{a}$ だけ考えている系を平行移動させる演算子 $e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}$ を用いて、$e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ であり、また $H|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ である。

まず、結晶に空間反転対称性があるときのエネルギー固有値がもつ関係を導出する。空間反転演算子を I_S とすると、I_S と位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$、運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$、スピン演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の間には次の関係がある。

$$I_S^{-1}\hat{\boldsymbol{r}}I_S = -\hat{\boldsymbol{r}}, \tag{312}$$

$$I_S^{-1}\hat{\boldsymbol{p}}I_S = -\hat{\boldsymbol{p}}, \tag{313}$$

$$I_S^{-1}\boldsymbol{\sigma}I_S = \boldsymbol{\sigma}, \tag{314}$$

ここで、$I_S^{-1} = I_S^\dagger$ である。このとき $I_S^{-1}U(\hat{\boldsymbol{r}})I_S = U(-\hat{\boldsymbol{r}}) = U(\hat{\boldsymbol{r}})$ であるから、

$$I_S^{-1}HI_S = H, \tag{315}$$

$$\therefore\quad HI_S = I_SH. \tag{316}$$

が成り立つ。したがって

$$HI_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_SH|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle. \tag{317}$$

となり、$I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ は $|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ と同じエネルギー固有値 $\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}$ をもつ。さらに、平行移動の演算子 $e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}$ において $\boldsymbol{a}$ が基本並進ベクトルのとき、ブロッホの定理より

$$e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_SI_S^{-1}e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_Se^{i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot(-\boldsymbol{a})}I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle. \tag{318}$$

となり、$I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ の波数は $-\boldsymbol{k}$ であることが言える。また、

$$\sigma_zI_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_SI_S^{-1}\sigma_zI_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_S\sigma_z|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \sigma I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle. \tag{319}$$

より、$I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ の σ_z の固有値は σ のままであることが言える。したがって、

$$I_S|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = |-\boldsymbol{k}\sigma\rangle, \tag{320}$$

$$\therefore\quad \varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} = \varepsilon_{-\boldsymbol{k}\sigma}, \tag{321}$$

となる。ここで、式 (317) を用いている。

[8] スピン軌道相互作用が働いているとき、ブロッホ関数はアップスピン状態とダウンスピン状態が混じる。しかし大抵の場合、それぞれの係数の絶対値は、どちらかが 1 に近くもう一方は 1 よりずっと小さい。1 に近い方についてのパウリ行列 σ_z の固有値を σ とする。

次に、考えている系に時間反転対称性があるときのエネルギー固有値がもつ関係を導出する。時間反転演算子を I_T とすると、

$$I_T\hat{\boldsymbol{r}}I_T^{-1} = \hat{\boldsymbol{r}}, \tag{322}$$

$$I_T\hat{\boldsymbol{p}}I_T^{-1} = -\hat{\boldsymbol{p}}, \tag{323}$$

$$I_T\boldsymbol{\sigma}I_T^{-1} = -\boldsymbol{\sigma}. \tag{324}$$

の関係がある。したがって、

$$I_T H I_T^{-1} = H, \tag{325}$$

$$\therefore \quad I_T H = H I_T. \tag{326}$$

が成り立つ。上式より、

$$H I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_T H|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = \varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle. \tag{327}$$

となり、ここで、

$$e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar} I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_T I_T^{-1} e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar} I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_T e^{i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot(-\boldsymbol{a})} I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle. \tag{328}$$

$$\sigma_z I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_T I_T^{-1}\sigma_z I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = I_T(-\sigma_z)|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = -\sigma I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle. \tag{329}$$

より、$I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ は波数、σ_z の固有値がそれぞれ $-\boldsymbol{k}$、$-\sigma$ に変化することが言える。したがって、

$$I_T|\boldsymbol{k}\sigma\rangle = |-\boldsymbol{k}-\sigma\rangle, \tag{330}$$

$$\therefore \quad \varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} = \varepsilon_{-\boldsymbol{k}-\sigma}. \tag{331}$$

となる。ここで、式 (327) を用いている。

G Hartree 近似

まずハートリー近似について一般的に記し、その後で量子井戸の場合の他の電子の電子密度をどう書くかについて簡単に記す。N 電子系のシュレーディンガー方程式とハミルトニアンは次式のように書ける。

$$H\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=E\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N), \tag{332}$$

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2+\nabla_2^2+\cdots+\nabla_N^2\right)+V(\boldsymbol{r}_1)+V(\boldsymbol{r}_2)+\cdots+V(\boldsymbol{r}_N) \tag{333}$$

$$+\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{e^2}{r_{12}}+\frac{e^2}{r_{13}}+\cdots+\frac{e^2}{r_{N-1\ N}}\right)\quad(r_{ij}=|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|) \tag{334}$$

$$=\sum_{j=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2+V(\boldsymbol{r}_j)\right]+\sum_{i<j}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}. \tag{335}$$

次の形の波動関数を仮定する。

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\varphi_a(\boldsymbol{r}_1)\varphi_b(\boldsymbol{r}_2)\cdots\varphi_n(\boldsymbol{r}_N). \tag{336}$$

変分原理より、シュレーディンガー方程式 $H\Phi=E\Phi$ の解 Φ は、$(\Phi,\Phi)=1$ を満たし、積分

$$I\equiv\int d\boldsymbol{r}\Phi H\Phi. \tag{337}$$

に停留値（極大、極小、または鞍点値）をとらせるものであり、その停留値がシュレーディンガー方程式のエネルギー固有値 E である。そこで、次式に停留値をとらせる Φ を探す。

$$\int\cdots\int\Phi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)H\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2\cdots d\boldsymbol{r}_N. \tag{338}$$

上式に式 (336) を代入すると

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &\equiv \int\cdots\int\Phi^*H\Phi d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2\cdots d\boldsymbol{r}_N\\
&= \int\varphi_a^*(\boldsymbol{r}_1)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2+V(\boldsymbol{r}_1)\right]\varphi_a(\boldsymbol{r}_1)d\boldsymbol{r}_1\\
&\quad+\int\varphi_b^*(\boldsymbol{r}_2)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2+V(\boldsymbol{r}_2)\right]\varphi_b(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_2+\cdots\\
&\quad\cdots+\int\varphi_n^*(\boldsymbol{r}_N)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_N^2+V(\boldsymbol{r}_N)\right]\varphi_n(\boldsymbol{r}_N)d\boldsymbol{r}_N\\
&\quad+\int\int\varphi_a^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_b^*(\boldsymbol{r}_2)\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}\varphi_a(\boldsymbol{r}_1)\varphi_b(\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2\\
&\quad+\int\int\varphi_a^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_c^*(\boldsymbol{r}_3)\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{13}}\varphi_a(\boldsymbol{r}_1)\varphi_c(\boldsymbol{r}_3)d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_3+\cdots.
\end{aligned} \tag{339}$$

となる。今、N 個の関数 $\varphi_a,\varphi_b,\cdots,\varphi_n$ を一度に考える代わりに、一つずつ求めることを考える。例えば $\varphi_a(\boldsymbol{r}_1)$ を求めるときに、仮に $\varphi_b,\varphi_c,\cdots,\varphi_n$ は求められていると考える。式 (339) のうちで φ_a を含む項だけを集め、積分が定積分であることを考慮して変数を $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ に直すと

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int\varphi_a^*(\boldsymbol{r})[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})+\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}(|\varphi_b(\boldsymbol{r}')|^2\\
&\quad+|\varphi_c(\boldsymbol{r}')|^2+\cdots+|\varphi_n(\boldsymbol{r}')|^2)d\boldsymbol{r}']\varphi_a(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}+(\varphi_a\text{に無関係な項}),\\
&= \int\varphi_a^*(\boldsymbol{r})H_a\varphi_a(\boldsymbol{r})+(\text{定数}),\\
H_a &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})+\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left(|\varphi_b(\boldsymbol{r}')|^2+|\varphi_c(\boldsymbol{r}')|^2+\cdots+|\varphi_n(\boldsymbol{r}')|^2\right)d\boldsymbol{r}'.
\end{aligned} \tag{340}$$

となる。そこで問題は、

$$\int \varphi_a^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = 1. \tag{341}$$

の下で式 (340) の右辺に停留値をとらせる $\varphi_a(\boldsymbol{r})$ を求める問題に帰着した。変分原理から、この場合 $\varphi_a(\boldsymbol{r})$ は 1 電子のシュレーディンガー方程式と同じ形をした

$$H_a\varphi_a(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\varphi_a(\boldsymbol{r}). \tag{342}$$

の解でなくてはならない。H_a のポテンシャルについて考える。

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}|\varphi_b(\boldsymbol{r}')|^2 d\boldsymbol{r}'. \tag{343}$$

は、軌道 φ_b を運動している電子がその確率分布 $|\varphi_b|^2$ に従って空間全体に分布していると考えたときに $\boldsymbol{r}$ にいる電子に及ぼすポテンシャルの形をしている。

このような取り扱いをハートリー近似と呼び、方程式 (342) をハートリーの方程式と呼ぶ。この近似による波動関数の計算は self-consistent な計算と呼ばれ、ポテンシャル $V_a(\boldsymbol{r})$ を次式のように定義すると、

$$V_a(\boldsymbol{r}) \equiv V(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left(|\varphi_b(\boldsymbol{r}')|^2 + |\varphi_c(\boldsymbol{r}')|^2 + \cdots + |\varphi_n(\boldsymbol{r}')|^2\right) d\boldsymbol{r}'.$$

次の図 55 のようにして行われる。ここで、上から 3 つ目のステップで初回のイテレーションのときに仮

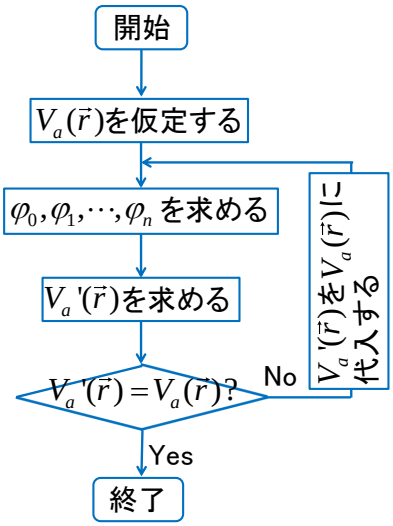


図 55: ハートリー近似による self-consistent な計算の流れ図

定したポテンシャル、または前回のイテレーションで求めたポテンシャルを用いてシュレーディンガー方程式を解いて波動関数、すなわち電子密度を求めている。上から 4 つ目のステップでは、その電子密度からポアッソン方程式を解いてポテンシャル $V_a'(\boldsymbol{r})$ を求めている。上から 5 つ目のステップでは、空間内のいくつかの点で $V_a'(\boldsymbol{r})$ と $V_a(\boldsymbol{r})$ を比較し、差が十分小さければ計算を終了する。

では、量子井戸の場合の他の電子の電子密度をどう書くかについて簡単に記す。T=0K で基底サブバンドのみ考慮する。$z = z'$ における、単位体積当たりの電子密度 $\rho(z')$ は

$$\rho(z') = -eN_s|\varphi_0(z')|^2, \tag{344}$$

であるとする。ここで、N_s は電子面密度（量子井戸の成長方向に垂直な単位面積当たりの電子密度）である。

H　半導体量子井戸の Rashba 型スピン軌道相互作用の導出

8 バンドのシュレーディンガー方程式の行列表示を次のように書く（4.4 参照）。

$$\begin{pmatrix} H_{\rm c} & H_{\rm cv} \\ H_{\rm cv}^{\dagger} & H_{\rm v} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{\rm c} \\ \varphi_{\rm v} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \varphi_{\rm c} \\ \varphi_{\rm v} \end{pmatrix}. \tag{345}$$

$$\tag{346}$$

ここで、$H_{\rm c}$ は 2×2 行列で伝導帯の 2 つのバンドのハミルトニアン行列であり、$H_{\rm v}$ は 6×6 行列で価電子帯の 6 つのバンドのハミルトニアン行列である。また、$H_{\rm cv}$ は 2×6 行列、$H_{\rm cv}^{\dagger}$ は 6×2 行列である。式 (345) の両辺の (3,1) 成分から (8,1) 成分を書きだすと次のようになる。

$$H_{\rm cv}^{\dagger}\varphi_{\rm c} + H_{\rm v}\varphi_{\rm v} = \varepsilon\varphi_{\rm v}. \tag{347}$$

$\varepsilon \neq E_7$ かつ $\varepsilon \neq E_8$ のときは行列 $(\varepsilon I - H_{\rm v})$ の逆行列が存在し、$\varphi_{\rm v}$ は

$$\varphi_{\rm v} = (\varepsilon I - H_{\rm v})^{-1} H_{\rm cv}^{\dagger}\varphi_{\rm c}. \tag{348}$$

と書ける。上式を式 (345) に代入し、両辺の (1,1) 成分と (2,1) 成分を書きだすと次のようになる。

$$H(\varepsilon)\tilde{\varphi}_{\rm c} = \varepsilon\tilde{\varphi}_{\rm c}, \tag{349}$$

$$H(\varepsilon) = H_{\rm c} + H_{\rm cv}(\varepsilon I - H_{\rm v})^{-1} H_{\rm cv}^{\dagger}. \tag{350}$$

式 (349) を有効方程式と呼び、$\tilde{\varphi}_{\rm c}$ は式 (345) から求めたものと異なるので、チルダを付けてある。$H(\varepsilon)$ の行列要素は

$$H(\varepsilon)_{11} = H(\varepsilon)_{22} = E_6 + \frac{P^2}{3}(k_{\parallel}^2\gamma_1 + k_z\gamma_1 k_z), \tag{351}$$

$$H(\varepsilon)_{12} = H(\varepsilon)_{21}^{\dagger} = -\frac{P^2}{3}k_{-}(k_z\gamma_2). \tag{352}$$

である。ここで、$k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$、$k_z = -id/dz$ であり、また

$$\gamma_1(z) = \left(\frac{2}{\varepsilon - E_8} + \frac{1}{\varepsilon - E_7}\right), \tag{353}$$

$$\gamma_2(z) = \left(\frac{1}{\varepsilon - E_8} - \frac{1}{\varepsilon - E_7}\right). \tag{354}$$

である。ここで、$H(\varepsilon)$ はエネルギー固有値 ε に依存するため、式 (349) は固有値問題の方程式ではない。

そこで、$H(\varepsilon)$ をエネルギー固有値 ε に依存しないようにするため、以下のことを行う。ε_g、$\varepsilon_g + \triangle_{\rm so}$ は、今考えている系で最も大きなエネルギースケールなので、微小で z に依存する、次の 2 つの量 χ_8、χ_7 を導入する。

$$\chi_8 = \frac{\varepsilon - \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\rm es}(z) + h_8(z)\right]}{\varepsilon_g} \ll 1, \tag{355}$$

$$\chi_7 = \frac{\varepsilon - \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_{\rm es}(z) + h_7(z)\right]}{\varepsilon_g + \triangle_{\rm so}} \ll 1. \tag{356}$$

この χ_8、χ_7 を用いると、γ_1、γ_2 は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \frac{2}{\varepsilon_g(1+\chi_8)} + \frac{1}{(\varepsilon_g+\triangle_{\rm so})(1+\chi_7)} \\
&\approx \frac{2}{\varepsilon_g}(1-\chi_8+\cdots) + \frac{1}{\varepsilon_g+\triangle_{\rm so}}(1-\chi_7+\cdots), \qquad (357)\\
\gamma_2 &= \frac{1}{\varepsilon_g(1+\chi_8)} - \frac{1}{(\varepsilon_g+\triangle_{\rm so})(1+\chi_7)} \\
&\approx \frac{1}{\varepsilon_g}(1-\chi_8+\cdots) - \frac{1}{\varepsilon_g+\triangle_{\rm so}}(1-\chi_7+\cdots). \qquad (358)
\end{aligned}$$

そこで、$H(\varepsilon)$ の対角要素 $H(\varepsilon)_{11}$ と $H(\varepsilon)_{22}$ については、γ_1 の χ_8、χ_7 についての 0 次の項のみとる。一方、非対角要素 $H(\varepsilon)_{12}$ と $H(\varepsilon)_{21} = H(\varepsilon)_{12}^{\dagger}$ については、γ_2 の χ_8、χ_7 についての 1 次の項までとる。なぜなら、γ_2 を z で微分すると z によらない 0 次の項は消えるからである。計算してゆくと 2×2 行列のハミルトニアンとして次式のものが得られる。

$$\begin{aligned}
H &= H_{\rm QW} I + \eta_{\rm w}(z) \begin{pmatrix} 0 & i(k_x - ik_y) \\ -i(k_x+ik_y) & 0 \end{pmatrix} \qquad (359)\\
&= H_{\rm QW} I + \eta_{\rm w}(z)\left(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x\right), \qquad (360)\\
H_{\rm QW} &= \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\rm sc}(z), \qquad (361)\\
\frac{1}{m^*} &= \frac{1}{m} + \frac{2P^2}{3\hbar^2}\left(\frac{2}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_g+\triangle_{\rm so}}\right), \qquad (362)\\
V_{\rm sc}(z) &= \delta_6 h(z) + V_{\rm es}, \qquad (363)\\
\eta_{\rm w}(z) &= \eta_{\rm bo}\frac{dh(z)}{dz} + \eta\frac{dV_{\rm es}(z)}{dz}, \qquad (364)\\
\eta_{\rm bo} &= \frac{P^2}{3}\left[\frac{\delta_8}{(\varepsilon_g)^2} - \frac{\delta_7}{(\varepsilon_g+\triangle_{\rm so})^2}\right], \qquad (365)\\
\eta &= \frac{P^2}{3}\left[\frac{1}{(\varepsilon_g)^2} - \frac{1}{(\varepsilon_g+\triangle_{\rm so})^2}\right]. \qquad (366)
\end{aligned}$$

I Dyakonov-Perel 機構のスピン緩和率の導出

5.2 節の式 (144)、すなわち

$$\frac{df_{\boldsymbol{k}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}] + \sum_{\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \left(-f_{\boldsymbol{k}} + f_{\boldsymbol{k}'}\right). \tag{367}$$

から出発する。Ω を有効磁場の大きさ、τ を運動量緩和時間として、さらに $\Omega\tau \ll 1$ として $f_{\boldsymbol{k}}$ を $\Omega\tau$ の 1 次まで展開する。すなわち

$$f_{\boldsymbol{k}} = f_{\boldsymbol{k}}^{(0)} + f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}, \tag{368}$$

ここで、$f_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ が $\Omega\tau$ の 0 次の項で、$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}$ が 1 次の項である。また、式 (367) の両辺に τ をかけて次式を得る。

$$\tau\frac{df_{\boldsymbol{k}}}{dt} = \tau\frac{1}{i\hbar}[R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}] + \tau\sum_{\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \left(-f_{\boldsymbol{k}} + f_{\boldsymbol{k}'}\right). \tag{369}$$

左辺は $\Omega\tau$ の 2 次なので、次式のような $\Omega\tau$ について 0 次と 1 次の関係式が得られる。

$$\sum_{\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \left(-f_{\boldsymbol{k}}^{(0)} + f_{\boldsymbol{k}'}^{(0)}\right) = 0, \tag{370}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}^{(0)}] + \sum_{\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \left(-f_{\boldsymbol{k}}^{(1)} + f_{\boldsymbol{k}'}^{(1)}\right) = 0. \tag{371}$$

ここで、$f_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$、$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}$ を次のようにおく。

$$f_{\boldsymbol{k}}^{(0)} = \frac{1+\sigma_z}{2} f_\uparrow(\varepsilon_k) + \frac{1-\sigma_z}{2} f_\downarrow(\varepsilon_k) = \begin{pmatrix} f_\uparrow(\varepsilon_k) & 0 \\ 0 & f_\downarrow(\varepsilon_k) \end{pmatrix}, \tag{372}$$

$$f_\sigma(\varepsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_\sigma}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]^{-1}, \tag{373}$$

$$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)} = \frac{\tau}{i\hbar}[R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}^{(0)}]. \tag{374}$$

このとき、式 (372) は 2.2 節の式 (22) の Kohn-Luttinger の密度行列の規格化条件を満たしている。式 (371) に式 (372)、(374) を代入し、$R_{\boldsymbol{k}}$ の表式を与える 5.2 節の式 (127) と (143) を用い、5.2 節の仮定 2（$W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}$ は $\boldsymbol{k}'$ の $\boldsymbol{k}$ から測った角度 θ の偶関数である。）と τ は $|\boldsymbol{k}|$ の関数であると仮定して解いたとき、

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}(1 - \cos\theta). \tag{375}$$

が得られる。τ は確かに $|\boldsymbol{k}|$ の関数で、運動量緩和時間の正しい表式である。また、5.2 節の式 (129) と (147)、すなわち

$$\langle S_z \rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \langle \sigma | f_{\boldsymbol{k}} | \sigma \rangle \frac{\hbar}{2}\sigma, \tag{376}$$

$$\frac{d\langle S_z \rangle}{dt} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \left\langle \sigma \left| \frac{df_{\boldsymbol{k}}}{dt} \right| \sigma \right\rangle \frac{\hbar}{2}\sigma. \tag{377}$$

の第 1 式の $f_{\boldsymbol{k}}$ として $\Omega\tau$ の 0 次の $f_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ を用い、第 2 式の $f_{\boldsymbol{k}}$ として $\Omega\tau$ の 1 次の $f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}$ を用いると（0 次の $f_{\boldsymbol{k}}^{(0)}$ を用いると $d\langle S_z\rangle/dt = 0$ となる）、次の 2 式が得られる。

$$\langle S_z\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle \sigma \left| f_{\boldsymbol{k}}^{(0)} \right| \sigma \right\rangle \frac{\hbar}{2}\sigma = \frac{\hbar}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}[f_\uparrow(\varepsilon_k) - f_\downarrow(\varepsilon_k)], \tag{378}$$

$$\frac{d\langle S_z\rangle}{dt} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle \sigma \left| \frac{1}{i\hbar}[R_{\boldsymbol{k}}, f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}] \right| \sigma \right\rangle \frac{\hbar}{2}\sigma = -2\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\tau(\varepsilon_k)\frac{\alpha^2 k^2}{\hbar}[f_\uparrow(\varepsilon_k) - f_\downarrow(\varepsilon_k)]. \tag{379}$$

ここで、式 (367)、$R_{\boldsymbol{k}}$ の表式を与える 5.2 節の式 (127) と (143)、$\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} W_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}(-f_{\boldsymbol{k}} + f_{\boldsymbol{k}'}) = 0$ を用いている。上の 2 式から、$k_{\mathrm{B}}T \ll \varepsilon_F$（$\varepsilon_F$ はフェルミエネルギー）かつ $|\mu_\uparrow - \mu_\downarrow| \ll \varepsilon_F$ の場合、

$$\frac{1}{\tau_s} = \Omega_F^2\tau_F. \tag{380}$$

が得られる。

J　分布関数の運動方程式の導出の際の評価方法

スピンも考慮に入れて $\langle n\boldsymbol{k}\sigma|[H_{\rm W}^{\rm so},\rho]|n\boldsymbol{k}\sigma'\rangle$ の評価を行う。

$$\begin{aligned}
&\langle n\boldsymbol{k}\sigma|[H_{\rm W}^{\rm so},\rho]|n\boldsymbol{k}\sigma'\rangle \\
&=\sum_{n'}[\langle n\boldsymbol{k}\sigma|H_{\rm W}^{\rm so}|n'\boldsymbol{k}-\sigma\rangle\langle n'\boldsymbol{k}-\sigma|\rho|n\boldsymbol{k}\sigma'\rangle \\
&\quad -\langle n\boldsymbol{k}\sigma|\rho|n'\boldsymbol{k}-\sigma'\rangle\langle n'\boldsymbol{k}-\sigma'|H_{\rm W}^{\rm so}|n\boldsymbol{k}\sigma'\rangle]. \qquad (381)
\end{aligned}$$

である。ここで、$H_{\rm W}^{\rm so}$ は波数を変えないこと、スピンを反転させることを用いている。$n=0$ のときの $n'=1$ の影響を考えるために、上式において $n=0$ で $n'=0,1$ とする。そのとき上式は次式のようになる。

$$\begin{aligned}
&\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|[H_{\rm W}^{\rm so},\rho]|0\boldsymbol{k}\sigma'\rangle \\
&=\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|H_{\rm W}^{\rm so}|0\boldsymbol{k}-\sigma\rangle\langle 0\boldsymbol{k}-\sigma|\rho|0\boldsymbol{k}\sigma'\rangle \\
&\quad -\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|\rho|0\boldsymbol{k}-\sigma'\rangle\langle 0\boldsymbol{k}-\sigma'|H_{\rm W}^{\rm so}|0\boldsymbol{k}\sigma'\rangle \\
&\quad +\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|H_{\rm W}^{\rm so}|1\boldsymbol{k}-\sigma\rangle\langle 1\boldsymbol{k}-\sigma|\rho|0\boldsymbol{k}\sigma'\rangle \\
&\quad -\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|\rho|1\boldsymbol{k}-\sigma'\rangle\langle 1\boldsymbol{k}-\sigma'|H_{\rm W}^{\rm so}|0\boldsymbol{k}\sigma'\rangle. \qquad (382)
\end{aligned}$$

次式のハミルトニアンについて、時間に依存する摂動論により考える。

$$\begin{aligned}
H &= H_0+H_1, &(383)\\
H_0 &= H_{\rm QW}, &(384)\\
H_1 &= H_{\rm W}^{\rm so}. &(385)
\end{aligned}$$

H_0 の固有値、固有ケットをそれぞれ $\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}$、$|n\boldsymbol{k}\sigma\rangle$ とし、H をハミルトニアンとするシュレーディンガー方程式の状態ケット $|\Psi\rangle$ を次のように近似する。

$$|\Psi\rangle=\sum_{n''=0,1}\sum_{\boldsymbol{k}''}\sum_{\sigma''}C_{n'',\boldsymbol{k}'',\sigma''}(t)\exp[-i\varepsilon_{n''\boldsymbol{k}''}t/\hbar]|n''\boldsymbol{k}''\sigma''\rangle. \qquad (386)$$

ここで、時刻 $t=0$ での状態ケットの係数の値を次のように仮定し、

$$\begin{cases} C_{0,\boldsymbol{k},-\sigma}(0)=1, \\ C_{1,\boldsymbol{k},+1}(0)=C_{1,\boldsymbol{k},-1}(0)=0. \end{cases} \qquad (387)$$

さらに $t>0$ でも状態ケットの係数は式 (387) とあまり違わないとすると、係数 $C_{n'',\boldsymbol{k},\sigma}(t)$ について次式が成り立つ。

$$i\hbar\frac{dC_{n'',\boldsymbol{k},\sigma}}{dt}\approx\exp[i(\varepsilon_{n''\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}})t/\hbar]\langle n''\boldsymbol{k}\sigma|H_{\rm W}^{\rm so}|0\boldsymbol{k}-\sigma\rangle. \qquad (388)$$

$n''=1$ として上式を解くと次式が得られる。

$$C_{1,\boldsymbol{k},\sigma}(t)\approx\frac{\langle 1\boldsymbol{k}\sigma|H_{\rm W}^{\rm so}|0\boldsymbol{k}-\sigma\rangle}{\varepsilon_{1\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}}}\{1-\exp[i(\varepsilon_{1\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}})t/\hbar]\}. \qquad (389)$$

したがって、

$$\frac{\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|\rho|1\boldsymbol{k}-\sigma\rangle}{\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|\rho|0\boldsymbol{k}-\sigma\rangle} \tag{390}$$

$$\approx \frac{C_{0,\boldsymbol{k},\sigma}(t)C^*_{1,\boldsymbol{k},-\sigma}(t)}{C_{0\boldsymbol{k}\sigma}(t)C^*_{0\boldsymbol{k}-\sigma}(t)} \tag{391}$$

$$= \frac{\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}|1\boldsymbol{k}-\sigma\rangle}{\varepsilon_{1\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}}}\{1-\exp[-i(\varepsilon_{1\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}})t/\hbar]\}. \tag{392}$$

となる。ここで、$H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}$ の行列要素の大きさはみな同じ程度だとすると、式 (382) の第 3 、4 項の大きさは第 1 、2 項の大きさの $|\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}|1\boldsymbol{k}-\sigma\rangle|/(\varepsilon_{1\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}})$ 倍程度となる。つまり、$|\langle 0\boldsymbol{k}\sigma|H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}|1\boldsymbol{k}-\sigma\rangle|/(\varepsilon_{1\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{0\boldsymbol{k}})\ll 1$ であれば式 (382) の右辺において第 3 、4 項は第 1 、2 項に比べて無視でき、$\langle 0\boldsymbol{k}|\rho|1\boldsymbol{k}\rangle = 0$ が妥当となる。したがって、$|\langle n\boldsymbol{k}\sigma|H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}|n'\boldsymbol{k}-\sigma\rangle|/(\varepsilon_{n'\boldsymbol{k}}-\varepsilon_{n\boldsymbol{k}})\ll 1$ であれば $\langle n'\boldsymbol{k}|\rho|1\boldsymbol{k}\rangle = 0$ が妥当となり、

$$\langle n\boldsymbol{k}|[H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}},\rho]|n\boldsymbol{k}\rangle = \langle n\boldsymbol{k}|H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}|n\boldsymbol{k}\rangle\langle n\boldsymbol{k}|\rho|n\boldsymbol{k}\rangle - \langle n\boldsymbol{k}|\rho|n\boldsymbol{k}\rangle\langle n\boldsymbol{k}|H^{\mathrm{so}}_{\mathrm{W}}|n\boldsymbol{k}\rangle = [R_{n\boldsymbol{k}},f_{n\boldsymbol{k}}]. \tag{393}$$

となる。

K　3 重量子井戸構造の Rashba 係数の導出

図 56 のような仮想的なバンドオフセットのある 3 重量子井戸構造を考え、次式のような関数 $h_{\mathrm{L}i}$ と $h_{\mathrm{R}i}$ を導入する。

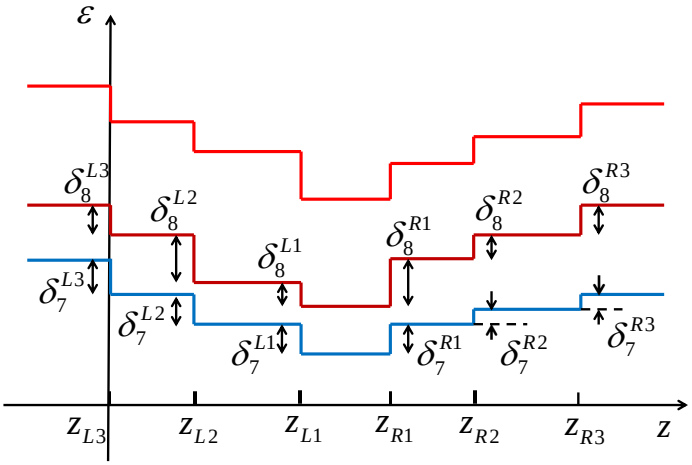


図 56: 3 重量子井戸構造の仮想的なバンドオフセット

$$h_{\mathrm{L}i}(z) = \begin{cases} 1 & z \le z_{\mathrm{L}i} \\ 0 & z > z_{\mathrm{L}i}, \end{cases} \tag{394}$$

$$h_{\mathrm{R}i}(z) = \begin{cases} 0 & z < z_{\mathrm{R}i} \\ 1 & z \ge z_{\mathrm{R}i}, \end{cases} \tag{395}$$

Appendix H の式 (352) より、量子井戸構造中の Rashba スピン軌道相互作用は次式のように書ける。

$$H_{\mathrm{W}}^{\mathrm{so}} = \frac{P^2}{3} G(z) \left(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x \right), \tag{396}$$

ここで、P は Kane の行列要素であり（3.5 節の式 (74) 参照）、$G(z)$ は次式により与えられる。

$$G(z) = \nabla_z \left(\frac{1}{\varepsilon - E_8} - \frac{1}{\varepsilon - E_7} \right), \tag{397}$$

ここで、E_8 と E_7 は 3.5 節の式 (101) と (102) を参照。ε および、E_8 と E_7 中の $\hbar^2 k^2/2m$ と $V_{\mathrm{es}}(z)$ を ε_{g} や $\varepsilon_{\mathrm{g}} + \triangle_{\mathrm{so}}$ $(= \varepsilon_{\mathrm{g}}^{\mathrm{s}})$ に比べて小さいとして無視し、一方 $\nabla_z V_{\mathrm{es}}$ は考慮すると、$G(z)$ は次式のようになる。

$$G(z) = G_{\mathrm{v}} + G_{\mathrm{s}} + G_{\mathrm{es}}, \tag{398}$$

$$G_{\mathrm{v}} = \nabla_z \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - h_8 \right)^{-1}, \tag{399}$$

$$G_{\mathrm{s}} = -\nabla_z \left(\varepsilon_{\mathrm{g}}^{\mathrm{s}} - h_7 \right)^{-1}, \tag{400}$$

$$G_{\mathrm{es}} = \left[\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - h_8 \right)^{-2} - \left(\varepsilon_{\mathrm{g}}^{\mathrm{s}} - h_7 \right)^{-2} \right] \nabla_z V_{\mathrm{es}}. \tag{401}$$

ただし、h_8、h_7 は次式により与えられる。

$$h_8 = \sum_{i=1}^{3} \delta_8^{\mathrm{L}i} h_{\mathrm{L}i} + \sum_{i=1}^{3} \delta_8^{\mathrm{R}i} h_{\mathrm{R}i}, \tag{402}$$

$$h_7 = \sum_{i=1}^{3} \delta_7^{\mathrm{L}i} h_{\mathrm{L}i} + \sum_{i=1}^{3} \delta_7^{\mathrm{R}i} h_{\mathrm{R}i}. \tag{403}$$

ここで次の関係式が成り立つ。

$$\begin{aligned}
&(\varepsilon_{\mathrm{g}} - h_8)^{-1} \\
&= (\varepsilon_{\mathrm{g}})^{-1} + \left[\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \delta_8^{\mathrm{L}1}\right)^{-1} - (\varepsilon_{\mathrm{g}})^{-1} \right] h_{\mathrm{L}1}(z) + \cdots && (404)\\
&\quad + \left[\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{3} \delta_8^{\mathrm{L}i} \right)^{-1} - \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{2} \delta_8^{\mathrm{L}i} \right)^{-1} \right] h_{\mathrm{L}3}(z) && (405)\\
&\quad + \left[\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \delta_8^{\mathrm{R}1}\right)^{-1} - (\varepsilon_{\mathrm{g}})^{-1} \right] h_{\mathrm{R}1}(z) + \cdots && (406)\\
&\quad + \left[\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{3} \delta_8^{\mathrm{R}i} \right)^{-1} - \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{2} \delta_8^{\mathrm{R}i} \right)^{-1} \right] h_{\mathrm{R}3}(z) && (407)\\
&= \frac{1}{\varepsilon_{\mathrm{g}}} + \frac{\delta_8^{\mathrm{L}1}}{\varepsilon_{\mathrm{g}} \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \delta_8^{\mathrm{L}1}\right)} h_{\mathrm{L}1}(z) + \cdots && (408)\\
&\quad + \frac{\delta_8^{\mathrm{L}3}}{\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{2} \delta_8^{\mathrm{L}i}\right) \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{3} \delta_8^{\mathrm{L}i}\right)} h_{\mathrm{L}3}(z) && (409)\\
&\quad + \frac{\delta_8^{\mathrm{R}1}}{\varepsilon_{\mathrm{g}} \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \delta_8^{\mathrm{R}1}\right)} h_{\mathrm{R}1}(z) + \cdots && (410)\\
&\quad + \frac{\delta_8^{\mathrm{L}3}}{\left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{2} \delta_8^{\mathrm{R}i}\right) \left(\varepsilon_{\mathrm{g}} - \sum_{i=1}^{3} \delta_8^{\mathrm{R}i}\right)} h_{\mathrm{R}3}(z). && (411)
\end{aligned}$$

また $\left(\varepsilon_{\mathrm{g}}^{\mathrm{s}} - h_7\right)^{-1}$ についても同様の関係式が成り立つ。さらに、現実の量子井戸構造では G_{es} 中の h_8 と h_7 は波動関数の絶対値の小さい障壁層のみで非ゼロなので、それらを無視する。式 (411) において、価電子帯の頂上のエネルギーが 3 重量子井戸構造の中央から外側に向かって低下しているときは、$\delta_8^{\mathrm{L}i}$ や $\delta_8^{\mathrm{R}i}$ の値を負にすることを行うと、式 (158) が得られる。

L　不純物ポテンシャルの δ 関数型モデルの適用範囲

位置 $\boldsymbol{r}_i$ にある不純物による不純物ポテンシャル $u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)$ を、そのポテンシャルが及ぶ距離が d であるガウス関数型とする。自由電子モデルを考え、$u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)$ について基底関数である平面波による行列要素を評価する。簡略化のため x に依存するものの積分についてのみ記す。ただし、物理系の周期 L は $L \gg d$ であるとする。指数関数 $\exp[i(k_x-k'_x)(x-x_i)]$ をテーラー展開すると次式のように評価できる。

$$\begin{aligned}
&\int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{e^{-ik'_x x}}{\sqrt{L}} \frac{\exp[-(x-x_i)^2/d^2]}{\sqrt{\pi}d} \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L}} \\
&= \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k_x-k'_x)x_i}\left[1+i(k_x-k'_x)(x-x_i)-\frac{1}{2}(k_x-k'_x)^2(x-x_i)^2+\cdots\right] \\
&\quad \times \frac{\exp[-(x-x_i)^2/d^2]}{\sqrt{\pi}d} \\
&\approx \frac{e^{i(k_x-k'_x)x_i}}{L}\left[1-\frac{(k_x-k'_x)^2}{2}\frac{d^2}{2}+\cdots\right]. \qquad (412)
\end{aligned}$$

ここで、指数関数のテーラー展開の $x-x_i$ の奇数次の項に $u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)$ がかかったものを積分をするとゼロになり、偶数 $(2n)$ 次の項の場合は $(k_x-k'_x)^{2n}d^{2n}$ に係数がかかったものになる。したがって、ガウス関数型のポテンシャルを δ 関数型のポテンシャルで近似できるには次式が満たされれば良いことが分かる。

$$(k_x-k'_x)d \ll 1. \qquad (413)$$

上式において $k_x-k'_x$ は k_F 程度なので次式が得られ、

$$k_F d \ll 1. \qquad (414)$$

最終的に次式が得られる。

$$d \ll \lambda_F, \qquad (415)$$

ここで、λ_F はフェルミ波長である。つまり、上式が満たされれば不純物ポテンシャルを δ 関数で近似できることになる。上式は不純物が中性不純物の場合は満たされると考える。

M　スピン緩和が on となる電場の値と off となる電場の値の差が電子面密度に比例することについて

図 57 のように、電場 E_z が $E_z \leq 0$ のときの 3 重量子井戸内の電子分布を、中央の量子井戸と右の量子井戸の中心にある厚さゼロのコンデンサーの極板上の電子分布に置き換える。左のコンデンサーの極

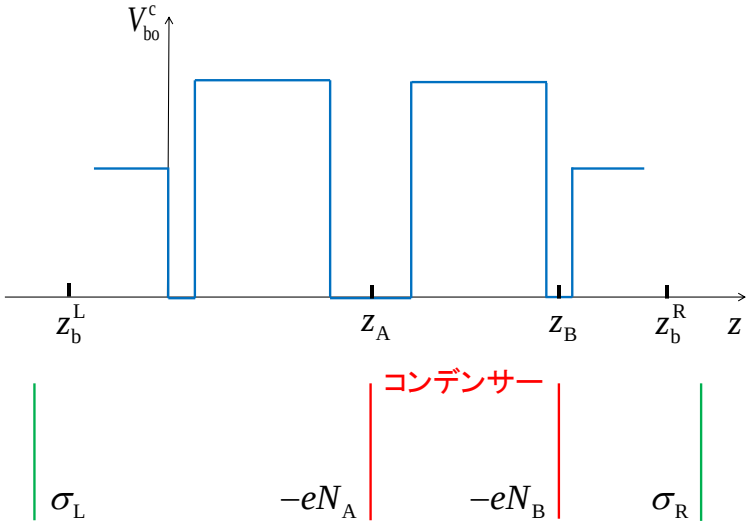


図 57: 中央と右の量子井戸内の電子分布をコンデンサーの極板上の電子分布で表すモデル

板の単位面積当たりの電子密度を N_A、右のコンデンサーの極板の単位面積当たりの電子密度を N_B とする。一方、ドナーは $z < z_b^L$ と $z > z_b^R$ にそれぞれ面密度 σ_L と σ_R で存在するとし、境界条件として次式を課す。

$$V_{es}(z_b^L) = 0. \tag{416}$$

また、電荷中性の条件より次式が成り立ち、

$$\sigma_L + \sigma_R - e(N_A + N_B) = 0. \tag{417}$$

$N_A + N_B = N_{tot}$ とする。ただし $e > 0$ である。

このときガウスの法則より次式が成り立つ。

$$\frac{dV_{es}}{dz} = \frac{A}{e}\{\sigma_L + (-e)[N_A\theta(z - z_A) + N_B\theta(z - z_B)]\}. \tag{418}$$

ここで、$A = 4\pi e^2/\epsilon$ (ϵ: 静的誘電率) であり、θ は階段関数である。上式より、V_{es} について次式が成り立つ。

$$V_{es} = \begin{cases} (A/e)\sigma_L(z - z_b^L) & (z_b^L \leq z < z_A), \\ (A/e)[\sigma_L(z - z_b^L) + (-e)N_A(z - z_A)] & (z_A \leq z < z_B), \\ (A/e)[\sigma_L(z - z_b^L) + (-e)N_A(z - z_A) + (-e)N_B(z - z_B)] & (z_B \leq z < z_b^R). \end{cases} \tag{419}$$

2 つのコンデンサーの極板に分布している電子は、それぞれサブバンドを形成すると考える。左のコンデンサーの極板の電子はサブバンド A を、右のコンデンサーの極板の電子はサブバンド B を形成するとし、

$E_z = E_z^{\rm off}$ で $N_{\rm A} = N_{\rm tot}$ かつ $N_{\rm B} = 0$、$E_z = E_z^{\rm on}$ で $N_{\rm A} = 0$ かつ $N_{\rm B} = N_{\rm tot}$ とする（$N_{\rm A} + N_{\rm B} = N_{\rm tot}$ は一定に保たれる）。つまり、$E_z = E_z^{\rm off}$ ではサブバンド A が基底サブバンドであったが、$E_z = E_z^{\rm on}$ では印加した静電ポテンシャルのためにサブバンド B が基底サブバンドになる。2 つの極板のポテンシャルエネルギーの差 $\varepsilon_{\rm B} - \varepsilon_{\rm A}$ は、

$$\varepsilon_{\rm B} - \varepsilon_{\rm A} = \frac{A}{e}(\sigma_{\rm L} - eN_{\rm A})(z_{\rm B} - z_{\rm A}). \tag{420}$$

となり、2 つのサブバンドの化学ポテンシャルが一致するという条件より次式が成り立つ。

$$\frac{N_{\rm A} - N_B}{D} = \frac{A}{e}(\sigma_{\rm L} - eN_{\rm A})(z_{\rm B} - z_{\rm A}), \tag{421}$$

$$\therefore \quad N_{\rm B} = N_{\rm A} - \frac{A}{e}(\sigma_{\rm L} - eN_{\rm A})(z_{\rm B} - z_{\rm A})D. \tag{422}$$

ここで、D は 2 次元電子系の単位エネルギー当たりの電子状態密度である。外部電場 E_z はガウスの法則と式 (417) より次式のようになる。

$$E_z = \frac{A}{2e^2}(\sigma_{\rm L} - \sigma_{\rm R}) = \frac{A}{2e^2}(2\sigma_{\rm L} - eN_{\rm tot}). \tag{423}$$

したがって、上式と式 (422) より、$N_{\rm A}$、$N_{\rm B}$ は次式により与えられる。

$$N_{\rm A} = -\frac{2e}{A}\frac{1}{2 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}E_z + \frac{\sigma_{\rm L}}{e}, \tag{424}$$

$$N_{\rm B} = -\frac{2e}{A}\frac{1 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}{2 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}E_z + \frac{\sigma_{\rm L}}{e}. \tag{425}$$

上の 2 式より $E_z^{\rm on}$ と $E_z^{\rm off}$ は次式のように得られる。

$$E_z^{\rm on} = \frac{A\sigma_{\rm L}^{\rm on}}{2e^2}[2 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D], \tag{426}$$

$$E_z^{\rm off} = \frac{A\sigma_{\rm L}^{\rm off}}{2e^2}\left[1 + \frac{1}{1 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}\right]. \tag{427}$$

ここで、$\sigma_{\rm L}^{\rm on}$ と $\sigma_{\rm L}^{\rm off}$ は、それぞれ $E_z = E_z^{\rm on}$ での $\sigma_{\rm L}$ と $E_z = E_z^{\rm off}$ での $\sigma_{\rm L}$ であり、式 (424) から (427) を用いて次式のように得られる。

$$\sigma_{\rm L}^{\rm on} = -\frac{eN_{\rm tot}}{A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}, \tag{428}$$

$$\sigma_{\rm L}^{\rm off} = \left[1 + \frac{1}{A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}\right]eN_{\rm tot}. \tag{429}$$

最終的に式 (426) から (429) を用いて次式が得られる。

$$E_z^{\rm on} - E_z^{\rm off} = -\frac{AN_{\rm tot}}{2e}\left[\left(1 + \frac{2}{A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}\right) + \left(1 + \frac{1}{A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}\right)^2\right]. \tag{430}$$

つまり、$|E_z^{\rm on} - E_z^{\rm off}|$ は $N_{\rm tot}$ に比例する。

最後に、式 (423) から (425) を用いると、$N_{\rm A}$、$N_{\rm B}$ は次式のようにも書ける。

$$N_{\rm A} = \frac{2e}{A}\left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}\right]E_z + \frac{N_{\rm tot}}{2}, \tag{431}$$

$$N_{\rm B} = -\frac{2e}{A}\left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2 + A(z_{\rm B} - z_{\rm A})D}\right]E_z + \frac{N_{\rm tot}}{2}. \tag{432}$$

つまり、$N_{\rm A}$、$N_{\rm B}$ は E_z の 1 次関数である。

N (111) 量子井戸中の Dresselhaus スピン軌道相互作用

量子井戸を構成する半導体の [100]、[010]、[001] 方向をそれぞれ x、y、z 方向とし、[111] 方向を Z 方向、(111) 面内の互いに直交する 2 つの方向を X、Y 方向とする。Dresselhaus スピン軌道相互作用が働く量子井戸中の伝導帯の電子のハミルトニアンは次式のように書ける（不純物ポテンシャルは無視している）。

$$H = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m^*} + V_{\rm W}(Z) + \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D}\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{433}$$

Dresselhaus スピン軌道相互作用 $H_{\rm D}^{\rm so} = (\hbar/2)\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ の大きさは小さいとし、固有ケットを $|\boldsymbol{k}\rangle|m\rangle|\zeta\rangle$（$|\boldsymbol{k}\rangle\otimes|m\rangle\otimes|\zeta\rangle$ の意）により近似する。ここで、$|\boldsymbol{k}\rangle$ は波数演算子 $\hat{\boldsymbol{k}}(=(\hat{k}_X,\hat{k}_Y)=(\hat{p}_X,\hat{p}_Y)/\hbar)$ の固有ケット、$|\zeta\rangle$ はパウリ行列 σ_z の固有ケットであり、$|m\rangle$ は次式を満たす。

$$\left[\frac{\hat{p}_Z^2}{2m^*} + V_{\rm W}(Z)\right]|m\rangle = \varepsilon_m|m\rangle. \tag{434}$$

上の 2 式よりシュレーディンガー方程式は次のように書ける。

$$\left[\frac{\hat{p}_X^2+\hat{p}_Y^2}{2m^*} + \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \varepsilon_m\right]|\boldsymbol{k}\rangle|m\rangle|\zeta\rangle \approx E|\boldsymbol{k}\rangle|m\rangle|\zeta\rangle. \tag{435}$$

上式の両辺に左から $\langle m|$ をかけると次式が得られる。

$$\left[\frac{\hbar^2(k_X^2+k_Y^2)}{2m^*} + \frac{\hbar}{2}\langle m|\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D}|m\rangle\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]|\boldsymbol{k}\rangle|\zeta\rangle \approx (E-\varepsilon_m)|\boldsymbol{k}\rangle|\zeta\rangle. \tag{436}$$

次に $(\hbar/2)\langle m|\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D}|m\rangle\cdot\boldsymbol{\sigma}$ を求める。4.2 節の式 (86)、(87) より、バルクの Dresselhaus スピン軌道相互作用の $\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D}$ は次式のように書ける。

$$\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{\rm D} = \frac{2\gamma}{\hbar^4}\hat{\boldsymbol{\chi}}, \tag{437}$$

$$\hat{\chi}_x = \hat{p}_x(\hat{p}_y^2-\hat{p}_z^2),\ \hat{\chi}_y = \hat{p}_y(\hat{p}_z^2-\hat{p}_x^2),\ \hat{\chi}_z = \hat{p}_z(\hat{p}_x^2-\hat{p}_y^2). \tag{438}$$

$\hat{\boldsymbol{p}}$ を (111) 面内の $\hat{\boldsymbol{p}}_\parallel$ とそれに垂直な $\hat{\boldsymbol{q}}$ に分解して考える。つまり、(111) 面の法線ベクトルを $\boldsymbol{n}$ とすると、

$$\hat{\boldsymbol{q}} = (\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{n},\ \hat{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{p}}_\parallel + \hat{\boldsymbol{q}}. \tag{439}$$

ここで、$\boldsymbol{n} = (1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3})$ であり、$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{n} = \hat{p}_{\rm Z}$ とすると、

$$\hat{\boldsymbol{q}} = \hat{p}_{\rm Z}\left(1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}\right). \tag{440}$$

と書けるから、$\hat{\boldsymbol{q}}$ の成分（の積）の $|m\rangle$ による期待値について次式の関係が成り立つ（式 (441) と (443) の導出はこの Appendix N の最後に記す）。

$$\langle m|\hat{q}_i|m\rangle = \left(1/\sqrt{3}\right)\langle m|\hat{p}_{\rm Z}|m\rangle = 0, \tag{441}$$

$$\langle m|\hat{q}_i\hat{q}_j|m\rangle = \left(1/\sqrt{3}\right)^2\langle m|\hat{p}_{\rm Z}^2|m\rangle, \tag{442}$$

$$\langle m|\hat{q}_i\hat{q}_j\hat{q}_\ell|m\rangle = \left(1/\sqrt{3}\right)^3\langle m|\hat{p}_{\rm Z}^3|m\rangle = 0, \tag{443}$$

ここで、i,j,ℓ は x,y,z のいずれかである。さらに $\hat{\chi}_x$ を $\hat{q}_i$ と $\hat{p}_{\parallel j}$（$\hat{\boldsymbol{p}}_\parallel$ の j 成分）を用いて書くと次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \hat{\chi}_x \\
= \;& \hat{p}_x(\hat{p}_y^2 - \hat{p}_z^2) \\
= \;& (\hat{q}_x + \hat{p}_{\parallel x})[(\hat{q}_y + \hat{p}_{\parallel y})^2 - (\hat{q}_z + \hat{p}_{\parallel z})^2] \\
= \;& \hat{q}_x(\hat{q}_y^2 - \hat{q}_z^2) + [2\hat{q}_x(\hat{q}_y\hat{p}_{\parallel y} - \hat{q}_z\hat{p}_{\parallel z}) + (\hat{q}_y^2 - \hat{q}_z^2)\hat{p}_{\parallel x}] \\
& + [2\hat{p}_{\parallel x}(\hat{q}_y\hat{p}_{\parallel y} - \hat{q}_z\hat{p}_{\parallel z}) + \hat{q}_x(\hat{p}_{\parallel y}^2 - \hat{p}_{\parallel z}^2)] + \hat{p}_{\parallel x}(\hat{p}_{\parallel y}^2 - \hat{p}_{\parallel z}^2).
\end{aligned} \tag{444}$$

したがって、$\hat{\chi}_x$ の $|m\rangle$ による期待値を式 (441)、(442)、(443) を用いて書き、さらに $\hat{p}_{\parallel i}$ の 3 次の項を落とすと次式のようになる。

$$\begin{aligned}
& \langle m|\hat{\chi}_x|m\rangle \\
\approx \;& \frac{2}{\sqrt{3}} \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}^2|m\rangle \frac{1}{\sqrt{3}}(\hat{p}_{\parallel y} - \hat{p}_{\parallel z}) \\
= \;& \frac{2}{\sqrt{3}} \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}^2|m\rangle (\hat{p}_{\parallel y} n_z - \hat{p}_{\parallel z} n_y).
\end{aligned} \tag{445}$$

ここで、$\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ とした。したがって、

$$\langle m|\hat{\boldsymbol{\chi}}|m\rangle \approx \frac{2}{\sqrt{3}} \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}^2|m\rangle (\hat{\boldsymbol{p}}_\parallel \times \boldsymbol{n}). \tag{446}$$

と書ける。さらに、$\boldsymbol{n}$ の向きに Z 軸がある XYZ 座標系で考えると、$\langle m|\hat{\boldsymbol{\chi}}|m\rangle$ は次式のように書ける。

$$\begin{aligned}
& \langle m|\hat{\boldsymbol{\chi}}|m\rangle \\
\approx \;& \frac{2}{\sqrt{3}} \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}^2|m\rangle (\hat{p}_Y \boldsymbol{e}_X - \hat{p}_X \boldsymbol{e}_Y), \\
= \;& \frac{2\hbar^3}{\sqrt{3}} \left\langle m \left| \left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial Z}\right)^2 \right| m \right\rangle (\hat{k}_Y \boldsymbol{e}_X - \hat{k}_X \boldsymbol{e}_Y).
\end{aligned} \tag{447}$$

ここで、$\boldsymbol{e}_X$、$\boldsymbol{e}_Y$、$\boldsymbol{e}_Z$ は X 軸、Y 軸、Z 軸方向の単位ベクトルで、$\boldsymbol{e}_Z = \boldsymbol{n}$ としている。さらに $\hat{\boldsymbol{p}}_\parallel = \hbar\hat{\boldsymbol{k}}$ である。最後に、上式の X,Y,Z を小文字にしたものと式 (437) より次式が得られる。

$$\frac{\hbar}{2}\langle m|\hat{\boldsymbol{\Omega}}_D|m\rangle \cdot \boldsymbol{\sigma} \approx \frac{2}{\sqrt{3}}\gamma \left\langle m \left| \left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 \right| m \right\rangle (\sigma_x \hat{k}_y - \sigma_y \hat{k}_x). \tag{448}$$

式 (441) と (443) の導出を記す。

$$
\begin{aligned}
& \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}|m\rangle \\
= \; & \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dZ\varphi_m(Z)\frac{d\varphi_m(Z)}{dZ} \\
= \; & \frac{\hbar}{2i}\int_{-\infty}^{\infty} dZ\frac{d[\varphi_m(Z)]^2}{dZ} \\
= \; & \frac{\hbar}{2i}\left[[\varphi_m(Z)]^2\right]_{-\infty}^{\infty} \\
= \; & 0, \qquad (449)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}^3|m\rangle \\
= \; & \left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\int_{-\infty}^{\infty} dZ\varphi_m(Z)\frac{d^3\varphi_m(Z)}{dZ^3} \\
= \; & \left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\left(\left[\varphi_m(Z)\frac{d^2\varphi_m(Z)}{dZ^2}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dZ\frac{d\varphi_m(Z)}{dZ}\frac{d^2\varphi_m(Z)}{dZ^2}\right) \\
= \; & \left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\left[-\left[\left(\frac{d\varphi_m(Z)}{dZ}\right)^2\right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dZ\frac{d^2\varphi_m(Z)}{dZ^2}\frac{d\varphi_m(Z)}{dZ}\right] \\
= \; & \left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\left(\left[\frac{d^2\varphi_m(Z)}{dZ^2}\varphi_m(Z)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dZ\frac{d^3\varphi_m(Z)}{dZ^3}\varphi_m(Z)\right) \\
= \; & -\left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\int_{-\infty}^{\infty} dZ\frac{d^3\varphi_m(Z)}{dZ^3}\varphi_m(Z) \\
\therefore \; & \left(\frac{\hbar}{i}\right)^3\int_{-\infty}^{\infty} dZ\varphi_m(Z)\frac{d^3\varphi_m(Z)}{dZ^3} = \langle m|\hat{p}_{\mathrm{Z}}^3|m\rangle = 0, \qquad (450)
\end{aligned}
$$

ここで、1 次元の束縛状態の固有値は縮退せず固有関数は 1 つずつである。そのため固有関数は実関数であることを利用している。

参考文献

[1] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Spin orientation of electrons associated with the interband absorption of light in semiconductors, Sov. Phys. JETP **33**, 1053 (1971).

[2] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors, Sov. Phys. Solid State **13**, 12, 3023–3026 (1972).

[3] E. I. Rashba, Properties of semiconductors with an extremum loop. 1. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop, Sov. Phys. Solid State **2**, 1109–1122 (1960).

[4] F. J. Ohkawa and Y. Uemura, Quantized Surface States of a Narrow-Gap Semiconductor, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 5, 1325–1333 (1974).

[5] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers, J. Phys. C **17**, 33, 6039 (1984).

[6] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy, JETP Lett. **39**, 2, 78 (1984).

[7] R. J. Elliott, Theory of the effect of spin-orbit coupling on magnetic resonance in some semiconductors, Phys. Rev. **96**, 2, 266 (1954).

[8] Y. Yafet, g Factors and Spin-Lattice Relaxation of Conduction Electrons, In F. Seitz and D. Turnbull, editors, *Solid State Physics*, Vol. 14, 1 – 98, Academic, New York (1963).

[9] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, Nonballistic Spin-Field-Effect Transistor, Phys. Rev. Lett. **90**, 146801 (2003).

[10] X. Cartoixà, D. Z.-Y. Ting, and Y.-C. Chang, A Resonant Spin Lifetime Transistor, Appl. Phys. Lett. **83**, 1462 (2003).

[11] K. C. Hall, W. H. Lau, K. Gündoğdu, M. E. Flatté, and T. F. Boggess, Nonmagnetic semiconductor spin transistor, Appl. Phys. Lett. **83**, 14, 2937–2939 (2003).

[12] K. C. Hall and M. E. Flatté, Performance of a spin-based insulated gate field effect transistor, Appl. Phys. Lett. **88**, 16, 162503 (2006).

[13] S. Datta and B. Das, Electronic analog of the electro- optic modulator, Appl. Phys. Lett. **56**, 7, 665–667 (1990).

[14] 明楽浩史, 鈴浦秀勝, 江上喜幸, 量子井戸のスピン緩和：緩和時間を制御する方法, 固体物理 **49**, 11, 645–652 (2014).

[15] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ Heterostructure, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335–1338 (1997).

[16] G. Engels, J. Lange, T. Schäpers, and H. Lüth, Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped $In_xGa_{1-x}As/InP$ quantum wells for B→0, Phys. Rev. B **55**, R1958–R1961 (1997).

[17] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, Rashba Spin-Orbit Coupling Probed by the Weak Antilocalization Analysis in InAlAs/InGaAs/InAlAs Quantum Wells as a Function of Quantum Well Asymmetry, Phys. Rev. Lett. **89**, 046801 (2002).

[18] H. Akera, H. Suzuura, and Y. Egami, Spin relaxation in a quantum well by phonon scatterings, Phys. Rev. B **92**, 205311 (2015).

[19] H. Akera, H. Suzuura, and Y. Egami, Gate-voltage-induced switching of the Rashba spin-orbit interaction in a composition-adjusted quantum well, Phys. Rev. B **95**, 045301 (2017).

[20] T. Iijima and H. Akera, Gate-Voltage-Induced Switching of the Spin-Relaxation Rate in a Triple-Quantum-Well Structure, Phys. Rev. Applied **13**, 064075 (2020).

[21] X. Cartoixà, D. Z.-Y. Ting, and Y.-C. Chang, Suppression of the D'yakonov-Perel' spin-relaxation mechanism for all spin components in [111] zincblende quantum wells, Phys. Rev. B **71**, 045313 (2005).

[22] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, Spin-relaxation suppression by compensation of bulk and structural inversion asymmetries in [111]-oriented quantum wells, J. Appl. Phys. **97**, 053707 (2005).

[23] B. Y. Sun, P. Zhang, and M. W. Wu, Spin relaxation in n-type (111) GaAs quantum wells, J. Appl. Phys. **108**, 093709 (2010).

[24] A. Balocchi, Q. H. Duong, P. Renucci, B. L. Liu, C. Fontaine, T. Amand, D. Lagarde, and X. Marie, Full Electrical Control of the Electron Spin Relaxation in GaAs Quantum Wells, Phys. Rev. Lett. **107**, 136604 (2011).

[25] H. Q. Ye, G. Wang, B. L. Liu, Z. W. Shi, W. X. Wang, C. Fontaine, A. Balocchi, T. Amand, D. Lagarde, P. Renucci, and X. Marie, Growth direction dependence of the electron spin dynamics in 111 GaAs quantum wells, J. Appl. Phys. **101**, 032104 (2012).

[26] K. Biermann, A. Hernandez-Minguez, H. R., and S. P. V., Electrically tunable electron spin lifetimes in GaAs(111)B quantum wells, J. Appl. Phys. **112**, 083913 (2012).

[27] A. Hernández-Mínguez, K. Biermann, R. Hey, and P. V. Santos, Electrical Suppression of Spin Relaxation in GaAs(111)B Quantum Wells, Phys. Rev. Lett. **109**, 266602 (2012).

[28] G. Wang, A. Balocchi, D. Lagarde, C. R. Zhu, T. Amand, P. Renucci, Z. W. Shi, W. X. Wang, B. L. Liu, and X. Marie, Temperature dependent electric field control of the electron spin relaxation in (111)A GaAs quantum wells, J. Appl. Phys. **102**, 242408 (2013).

[29] T. Iijima, Y. Egami, and H. Akera, Suppressing effective magnetic field and spin-relaxation rate by tuning barrier compositions in a (111) quantum well, Japanese Journal of Applied Physics **59**, 10, 100901 (2020).

[30] W. Kohn and J. M. Luttinger, Quantum theory of electrical transport phenomena, Phys. Rev. **108**, 3, 590 (1957).

[31] E. O. Kane, Band structure of indium antimonide, J. Phys. Chem. Solids **1**, 4, 249–261 (1957).

[32] G. Dresselhaus, Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures, Phys. Rev. **100**, 2, 580–586 (1955).

[33] J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, Atomistic spin-orbit coupling and **k**?**p** parameters in III-V semiconductors, Phys. Rev. B **72**, 193201 (2005).

[34] W. Knap, C. Skierbiszewski, A. Zduniak, E. Litwin-Staszewska, D. Bertho, F. Kobbi, J. L. Robert, G. E. Pikus, F. G. Pikus, S. V. Iordanskii, V. Mosser, K. Zekentes, and Y. B. Lyanda-Geller, Weak antilocalization and spin precession in quantum wells, Phys. Rev. B **53**, 3912–3924 (1996).

[35] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Conduction electrons in GaAs: Five-level k·p theory and polaron effects, Phys. Rev. B **41**, 1561–1576 (1990).

[36] W. Zawadzki and P. Pfeffer, Average forces in bound and resonant quantum states, Phys. Rev. B **64**, 235313 (2001).

[37] A. Därr, J. P. Kotthaus, and T. Ando, Electron-spin resonance in an inversion layer on InSb, In F. G. Fumi, editor, *Proceedings of the 13th International Conference on the Physics of Semiconductors, Rome*, 774, North-Holland, Amsterdam (1976).

[38] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Electronic properties of two-dimensional systems, Rev. Mod. Phys. **54**, 437–672 (1982).

[39] R. S. Calsaverini, E. Bernardes, J. C. Egues, and D. Loss, Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells, Phys. Rev. B **78**, 15, 155313 (2008).

[40] T. Schäpers, G. Engels, J. Lange, T. Klocke, M. Hollfelder, and H. Lüth, Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped InxGa1-xAs/InP quantum wells for B $\rightarrow$ 0, J. Appl. Phys. **83**, 8, 4324–4333 (1998).

[41] L. Wissinger, U. Rössler, R. Winkler, B. Jusserand, and D. Richards, Spin splitting in the electron subband of asymmetric GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells: The multiband envelope function approach, Phys. Rev. B **58**, 15375–15377 (1998).

[42] P. Pfeffer, Effect of inversion asymmetry on the conduction subbands in $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ heterostructures, Phys. Rev. B **59**, 15902–15909 (1999).

[43] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Bychkov-Rashba spin splitting and its dependence on magnetic field in $InSb/In_{0.91}Al_{0.09}Sb$ asymmetric quantum wells, Phys. Rev. B **68**, 035315 (2003).

[44] M. O. Nestoklon, S. A. Tarasenko, J.-M. Jancu, and P. Voisin, Spin splitting of electron states in (110) quantum wells: Symmetry analysis and k·p theory versus microscopic calculations, Phys. Rev. B **85**, 205307 (2012).

[45] G. E. Pikus and A. N. Titkov, Spin relaxation, In F. Meier and B. P. Zakharchenya, editors, *Optical Orientation*, 77, North Holland, Amsterdam (1984).

[46] J. N. Chazalviel, Spin relaxation of conduction electrons in n-type indium antimonide at low temperature, Phys. Rev. B **11**, 1555–1562 (1975).

[47] C. Grimaldi and P. Fulde, Theory of screening of the phonon-modulated spin-orbit interaction in metals, Phys. Rev. B **55**, 15523–15530 (1997).

[48] M. I. Dyakonov and V. Y. Kachorovskii, Spin relaxation of two-dimensional electrons in noncentrosymmetric semiconductors, Sov. Phys. Semicond. **20**, 1, 110–112 (1986).

[49] A. A. Kiselev and K. W. Kim, Progressive suppression of spin relaxation in two-dimensional channels of finite width, Phys. Rev. B **61**, 13115–13120 (2000).

[50] N. S. Averkiev, L. E. Golub, and M. Willander, Spin relaxation anisotropy in two-dimensional semiconductor systems, J. Phys.: Condens. Matter **14**, R271 (2002).

[51] E. Y. Sherman, Random spin–orbit coupling and spin relaxation in symmetric quantum wells, Appl. Phys. Lett. **82**, 2, 209–211 (2003).

[52] Y. G. Semenov, Electron spin relaxation in semiconductors and semiconductor structures, Phys. Rev. B **67**, 115319 (2003).

[53] M. Glazov and E. Ivchenko, D'yakonov-Perel' Spin Relaxation Controlled by Electron-Electron Scattering, Journal of Superconductivity **16**, 4, 735–742 (2003).

[54] R. Winkler, Spin orientation and spin precession in inversion-asymmetric quasi-two-dimensional electron systems, Phys. Rev. B **69**, 045317 (2004).

[55] F. X. Bronold, A. Saxena, and D. L. Smith, Semiclassical kinetic theory of electron spin relaxation in semiconductors, Phys. Rev. B **70**, 24, 245210 (2004).

[56] Y. Zhou and M. W. Wu, A virtual intersubband spin–flip spin–orbit coupling induced spin relaxation in GaAs (110) quantum wells, Solid State Commun. **149**, 45, 2078–2081 (2009).

[57] M. Murata and T. Tsuchiya, Controllable Dresselhaus field in microscopically inversion-symmetric quantum wells, Physica E **42**, 10, 2711 – 2713 (2010).

[58] H. Akera, H. Suzuura, and Y. Egami, Spin relaxation in a zinc-blende (110) symmetric quantum well with delta doping, Phys. Rev. B **89**, 075314 (2014).

[59] A. Tackeuchi, O. Wada, and Y. Nishikawa, Electron spin relaxation in InGaAs/InP multiple-quantum wells, Appl. Phys. Lett. **70**, 1131 (1997).

[60] A. Tackeuchi, T. Kuroda, S. Muto, Y. Nishikawa, and O. Wada, Electron Spin-relaxation Dynamics in GaAs/AlGaAs Quantum Wells and InGaAs/InP Quantum Wells, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 8R, 4680 (1999).

[61] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura, and H. Ohno, Spin relaxation in GaAs (110) quantum wells, Phys. Rev. Lett. **83**, 20, 4196–4199 (1999).

[62] J. T. Hyland, G. T. Kennedy, A. Miller, and C. C. Button, Spin relaxation and all optical polarization switching at 1.52 micrometres in InGaAs(P)/InGaAsP multiple quantum wells, Semiconductor Science and Technology **14**, 3, 215–221 (1999).

[63] K. C. Hall, S. W. Leonard, H. M. van Driel, A. R. Kost, E. Selvig, and D. H. Chow, Subpicosecond spin relaxation in GaAsSb multiple quantum wells, Appl. Phys. Lett. **75**, 4156 (1999).

[64] T. Adachi, Y. Ohno, F. Matsukura, and H. Ohno, Spin relaxation in n-modulation doped GaAs/AlGaAs (110) quantum wells, Physica E **10**, 1, 36–39 (2001).

[65] K. C. Hall, K. Gündoğdu, E. Altunkaya, W. H. Lau, M. E. Flatté, T. F. Boggess, J. J. Zinck, W. B. Barvosa-Carter, and S. L. Skeith, Spin relaxation in (110) and (001) InAs/GaSb superlattices, Phys. Rev. B **68**, 115311 (2003).

[66] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, and M. Oestreich, Anomalous spin dephasing in (110) GaAs quantum wells: Anisotropy and intersubband effects, Phys. Rev. Lett. **93**, 14, 147405 (2004).

[67] M. Henini, O. Karimov, G. John, R. Harley, and R. Airey, Gated spin relaxation in (1 1 0)-oriented quantum wells, Physica E **23**, 3 - 4, 309 – 314 (2004).

[68] R. Aleksiejunas, A. Kadys, K. Jarasiunas, F. Saas, U. Griebner, and J. W. Tomm, All-optical analysis of carrier and spin relaxation in InGaAs/GaAs saturable-absorber structures, Appl. Phys. Lett. **90**, 10, 102105 (2007).

[69] G. M. Müller, M. Römer, D. Schuh, W. Wegscheider, J. Hübner, and M. Oestreich, Spin noise spectroscopy in GaAs (110) quantum wells: Access to intrinsic spin lifetimes and equilibrium electron dynamics, Phys. Rev. Lett. **101**, 20, 206601 (2008).

[70] X. Z. Ruan, H. H. Luo, Y. Ji, Z. Y. Xu, and V. Umansky, Effect of electron-electron scattering on spin dephasing in a high-mobility low-density two-dimensional electron gas, Phys. Rev. B **77**, 193307 (2008).

[71] L. H. Teng, P. Zhang, T. S. Lai, and M. W. Wu, Density dependence of spin relaxation in GaAs quantum well at room temperature, EPL **84**, 2, 27006 (2008).

[72] N. Yokota, K. Ikeda, Y. Nishizaki, S. Koh, and H. Kawaguchi, Carrier Lifetime and Electron Spin Relaxation Time in (110)-Oriented GaAs–AlGaAs Quantum-Well Micro-Posts, IEEE Photon. Technol. Lett. **22**, 22, 1689–1691 (2010).

[73] A. Larionov and A. Zhuravlev, Coherent spin dynamics of different density high mobility two-dimensional electron gas in a GaAs quantum well, JETP Lett. **97**, 3, 137–140 (2013).

[74] N. Yokota, Y. Yasuda, K. Ikeda, and H. Kawaguchi, Electron spin relaxation time in (110) InGaAs/InAlAs quantum wells, J. Appl. Phys. **116**, 2, 023507 (2014).

[75] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, Spintronics: Fundamentals and applications, Rev. Mod. Phys. **76**, 2, 323 (2004).

[76] M. W. Wu, J. H. Jiang, and M. Q. Weng, Spin dynamics in semiconductors, Phys. Rep. **493**, 2, 61–236 (2010).

[77] D. D. Awschalom and M. E. Flatté, Challenges for semiconductor spintronics, Nat. Phys. **3**, 3, 153–159 (2007).

[78] D. Yamamoto and T. Tsuchiya, Efficient Control of the Rashba Effective Magnetic Field Using Acceptor-Doped Quantum Wells, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 12, 124701 (2014).

[79] D. Gvozdić and U. Ekenberg, Beyond the Rashba model, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **32**, 458 – 461 (2006).

[80] D. Gvozdić and U. Ekenberg, Efficient switching of Rashba spin splitting in wide modulation-doped quantum wells, Applied Physics Letters **90**, 053105 (2007).

[81] U. Ekenberg and D. M. Gvozdić, Analysis of electric-field-induced spin splitting in wide modulation-doped quantum wells, Phys. Rev. B **78**, 205317 (2008).

[82] E. Bernardes, J. Schliemann, M. Lee, J. C. Egues, and D. Loss, Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands, Phys. Rev. Lett. **99**, 7, 076603 (2007).

[83] Y. Egami and H. Akera, Controlling Rashba spin–orbit interaction in quantum wells by adding symmetric potential, Applied Physics Express **10**, 063007 (2017).

[84] F. Capasso, A. Y. Cho, K. Mohammed, and P. W. Foy, Doping interface dipoles: Tunable heterojunction barrier heights and band- edge discontinuities by molecular beam epitaxy, Appl. Phys. Lett. **46**, 7, 664–666 (1985).

[85] S. Modesti, D. Furlanetto, M. Piccin, S. Rubini, and A. Franciosi, High-resolution potential mapping in semiconductor nanostructures by cross-sectional scanning tunneling microscopy and spectroscopy, Appl. Phys. Lett. **82**, 12, 1932–1934 (2003).

[86] M. Q. Weng and M. W. Wu, Multisubband effect in spin dephasing in semiconductor quantum wells, Phys. Rev. B **70**, 195318 (2004).

[87] T. Kaneko, M. Koshino, and T. Ando, Numerical study of spin relaxation in a quantum wire with spin-orbit interaction, Phys. Rev. B **78**, 245303 (2008).

[88] R. Lassnig, k · p theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures, Phys. Rev. B **31**, 12, 8076 (1985).

[89] X. Cartoixà, L.-W. Wang, D.-Y. Ting, and Y.-C. Chang, Higher-order contributions to Rashba and Dresselhaus effects, Phys. Rev. B **73**, 205341 (2006).

[90] J. Zhou, J. L. Cheng, and M. W. Wu, Spin relaxation in n-type GaAs quantum wells from a fully microscopic approach, Phys. Rev. B **75**, 045305 (2007).

[91] J. P. Heida, B. J. van Wees, J. J. Kuipers, T. M. Klapwijk, and G. Borghs, Spin-orbit interaction in a two-dimensional electron gas in a InAs/AlSb quantum well with gate-controlled electron density, Phys. Rev. B **57**, 11911–11914 (1998).

[92] N. S. Averkiev and L. E. Golub, Giant spin relaxation anisotropy in zinc-blende heterostructures, Phys. Rev. B **60**, 15582–15584 (1999).

[93] J. Kainz, U. Rössler, and R. Winkler, Anisotropic spin-splitting and spin-relaxation in asymmetric zinc blende semiconductor quantum structures, Phys. Rev. B **68**, 075322 (2003).

[94] J. Schliemann, Colloquium: Persistent spin textures in semiconductor nanostructures, Rev. Mod. Phys. **89**, 011001 (2017).

謝辞

ご指導して下さった明楽浩史教授に感謝致します。遠隔地でご指導を受けることを許可して下さり、インターネットを利用してご指導して下さいました。学会発表、研究室のゼミでの発表の仕方や、生活面についてもご指導して下さいました。また、議論して下さった江上喜幸助教、物性物理工学研究室の皆さんに感謝致します。最後に、博士後期課程の研究生活を見守ってくれた両親と弟に感謝します。