ポテンシャル井戸中のブロッホ電子の有効質量増大の機構

Mechanism for Effective Mass Enhancement of Bloch Electrons

Quantized in Potential Well

奈良先端大¹, 産総研², 電通大³, 学芸大⁴, 琉球大⁵

◦武田 さくら¹, 白澤 徹郎², 坂田智裕³, Artoni K. R. Ang¹, 高橋 敏男⁴, 大門 寛¹, 稲岡 毅⁵
 NAIST¹, AIST², UEC¹, Gakugei Univ.², Univ. Ryukyus², ◦Sakura N. Takeda¹, Tetsuro Shirasawa²,
 Tomohiro Sakata³, Artoni K. R. Ang¹, Toshio Takahashi⁴, Daimon Hiroshi¹, Takeshi Inaoka⁵

E-mail: sakura@ms.naist.jp

結晶中の電子は周期的に配列した原子によって作られる周期ポテンシャルを感じる。電子はここではブロッホの定理に従い、格子の周期の変調をもつ平面波として表されるブロッホ波を形成する。薄膜や反転層などの2次元量子井戸では、ブロッホ電子は初等的な量子力学の「箱の中の電子」モデルで表されるような定在波を閉じ込め方向に形成する。しかし、この定在波とブロッホ波の関係はこれまで明らかでなかった。

近年我々は、シリコン p 型反転層中で量子化されたホールサブバンドの分散を高分解能角度分解光電子分光 (ARPES) で実測する手法を開発し、さまざまな系のホールサブバンド分散の測定を行った[1]。その結果、サブバンドではバルクバンド分散と比較し面内有効質量が最大数倍にも増大することを見出した[2]。今回、我々はこの有効質量の増大の機構について ARPES と大規模スラブ第一原理計算の結果から明らかにしたので報告する。有効質量の増大は「ポテンシャル井戸中の電子は、バルクバンドの射影端を基点に量子化される」という定在波とブロッホ波のこれまで知られてなかった関係で説明される。これにより、サブバンドはバルクバンドの射影端に近い面内分散を持つことになる。講演では、Si(001)面に作製された p 型反転層中の[100]及び[110]方向でのホールサブバンド分散の実測と計算の結果を示す。バルクバンド分散では[110]より[100]方向のほうが有効質量が小さいが、サブバンドでは今回報告する量子化による有効質量増大の機構により[100]方向のホール有効質量は[110]方向とほとんど同じとなる。これは、量子化の影響が顕著な微細 CMOS では、従来の考え方[3]とは異なり、バルクバンド分散から得られる有効質量は、軽いキャリア移動度を持つチャンネル方向を決定するうえでの指標とならないことを意味する。

今回見出したブロッホ電子の量子化の機構は、すべての結晶において一般的に適用されるが、特に半導体やトポロジカル絶縁体などの、非等方的なバンド分散を持つ結晶において重要となる[4]。本機構によって、バルクで軽い有効質量を持つ結晶方位では量子化によって有効質量が必ず増大するからである。

[1] S. N. Takeda *et al.* Phys. Rev. Lett. **94**, 037401 (2005), Y. Tanigawa *et al.* eJSSNT **7**, 641 (2009).

[2] S. N. Takeda *et al.* Phys. Rev. B **93**, 125418 (2016).

[3] T. Skotnicki *et al.* IEEE Trans. Electron Devices **55**, 96 (2008).

[4] M. König *et al.* Science **318**, 766 (2007).