

『n型Si上のP型表面反転層の
サブバンドの計算（100）面』

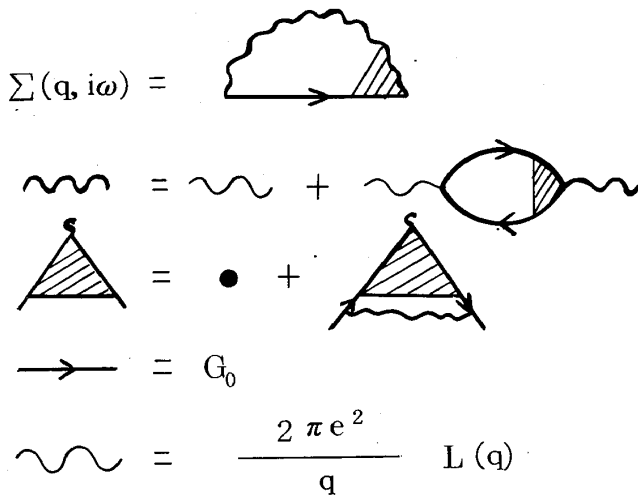
東大理 大川房義

Siの価電子帯は、スピン縮重は数えないで Γ 点で二重に縮重した Γ_8^+ と、それから44 meV離れた Γ_7^+ からなる。表面ポテンシャルの表面量子化状態にたいする擾動エネルギーは 10^2 meV程度あるから、SiのP型反転層を理論的に扱うには、少なくとも Γ_8^+ 、 Γ_7^+ のcoupledバンドの枠内で考える必要がある。また、Hartreeの一体的視点に立てば量子化状態の構造を決めている表面ポテンシャルはポアソン方程式を通して、表面ホールの分布により決まっている。以上の視点に立ち、 6×6 Luttinger有効質量ハミルトニアン⁽¹⁾をモデルにとり、Hartree近似で(100)、(110)、(111)面上のサブバンド構造を求めたが、⁽²⁾ intra-subband的な性質、サイクロトロン質量においては、実験値とよく一致し、⁽³⁾ 一体的視点でも良いことを示唆するが、inter-subband的な性質、サブバンドの間隔については実験値とは定性、定量ともに違っていた。理論のサブバンド間隔の表面ホール数依存性が弱く、かつ絶対値も小さい。これまでの準粒子のエネルギー構造の計算においてHartree近似までで成功した例は皆無に近く、ここでの計算も更に近似を進める必要がある。

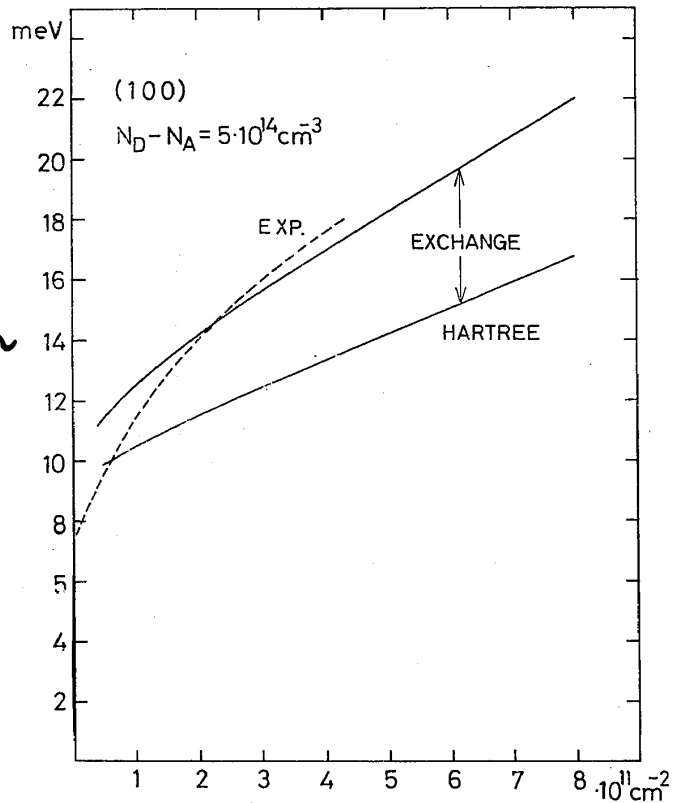
交換相互作用の準粒子スペクトルに対する効果は、占められている準位を押下げる効果を持ちその値はおおよそ

$$\epsilon_{exch} \approx e^2 P_F / \pi \kappa_s \propto \sqrt{N_s}, \quad (N_s \propto P_F^2)$$

であり、絶対値は約10meV程度で、ホールの増加と共に $1/2$ 乗の巾で増加する。ここで P_F はフェルミ波数、 κ_s はSiの静的誘電率、 N_s は表面ホール濃度である。ここでは、交換相互作用の基底サブバンドに対する効果をグリーン関数を用い第1図に示したグラフからの寄与を動的に計算した。第2図に光吸収の実験値と、⁽⁴⁾ 計算により強い吸収強度の期待されるheavyホールの基底サブバンドと第一励起サブバンドとのエネルギー差の、Si-SiO₂界面の鏡像力を考慮したHartree近似による計算値が示され、更に



第1図



第2図

先に述べた交換相互作用の、占められていない第一励起サブバンドに対する効果は無視できるとし、基底サブバンドのみが交換エネルギーだけ下がるとした時の計算値を示す。交換作用まで考えれば、理論モデルは現実をかなり良く表わせることが示唆される。

参考文献

- (1) J. M. Luttinger Phys. Rev. 102 (1956) 1030
- (2) E. Bangert et. al. to be published Proc. the XII Int. Conf. on
 Semiconductor Physics, Stuttgart
 Y. Uemura International Conference at Würzburg (1974) Preprint
 F. J. Ohkawa 物理学会 1974 秋
- (3) V. Klitzing et. al. Solid State Commn. 14 (1974) 387
- (4) A. Kamger et. al. to be published Proc the XII Int Conf. on
 Semiconductor Physics, Stuttgart