

## Si 表面量子化状態の準粒子

東大理 大川 房 義

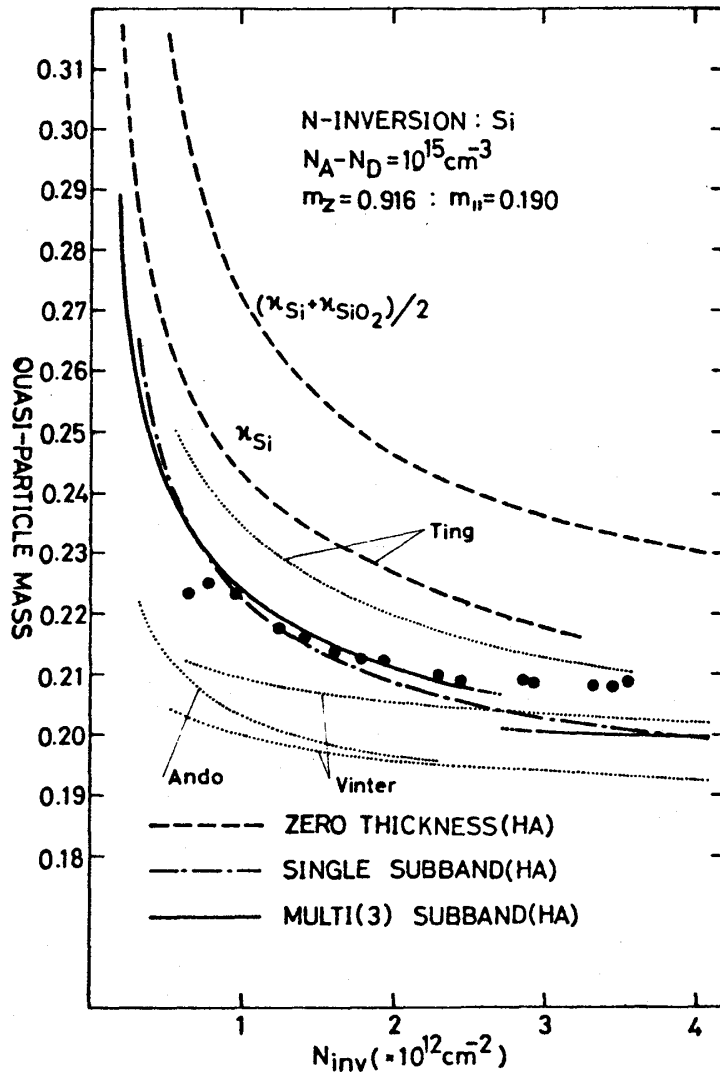
金属 — 酸化膜 — 半導体 (MOS) 接合に実現される準二次元電子 (ホール) 系は多体効果理論にとって非常に興味深い系である。何故ならば, (i) 多体効果を受けない裸の質量を含め, その他諸々の定数が半導体故に良く知られていること, (ii) 金属 — 基盤半導体間に印加されるゲート電圧により一つのサンプルで巾広い範囲でキャリア濃度を自由に変えられることが挙げられる。この理由により, MOS に於ては詳細な理論と実験との比較が可能である。従来, アルカリ金属で, 裸の質量が良く知られておらず, キャリア濃度が一つに決った系で比較されていたのは非常に大きな違いである。

又, 実験に於ても準粒子スペクトルが詳しく測定されている。Smith-Stiles<sup>1)</sup> による Si-(100)-n 型反転層における Schubnikov-de Haas 振動による準粒子質量の測定, Kneshaurek-Kamgar-Koch<sup>2)</sup> による Si-(100) 面の種々の層におけるサブバンド間遷移に対応する光吸収スペクトルの測定, 又, Wheeler<sup>3)</sup> による Si-(100)-n 型反転層における光吸収スペクトルの測定が行なわれている。

多体効果理論の取扱いにならぬ, まずサブバンド構造をハートリ近似で計算した。SiO<sub>2</sub> と Si で誘電率に違いがあるための鏡像力の存在を含めて, セルフコンシステントに決められた表面ポテンシャルのため, 表面垂直方向の運動は量子化されるが, 面垂直方向の運動は自由に残るサブバンド構造をなす。ここで p チャネル, つまりホールに対するサブバンドの計算は Si の 6 枚の価電子帯を考慮した Luttinger-Kohn ハミルトニアンを用いている。

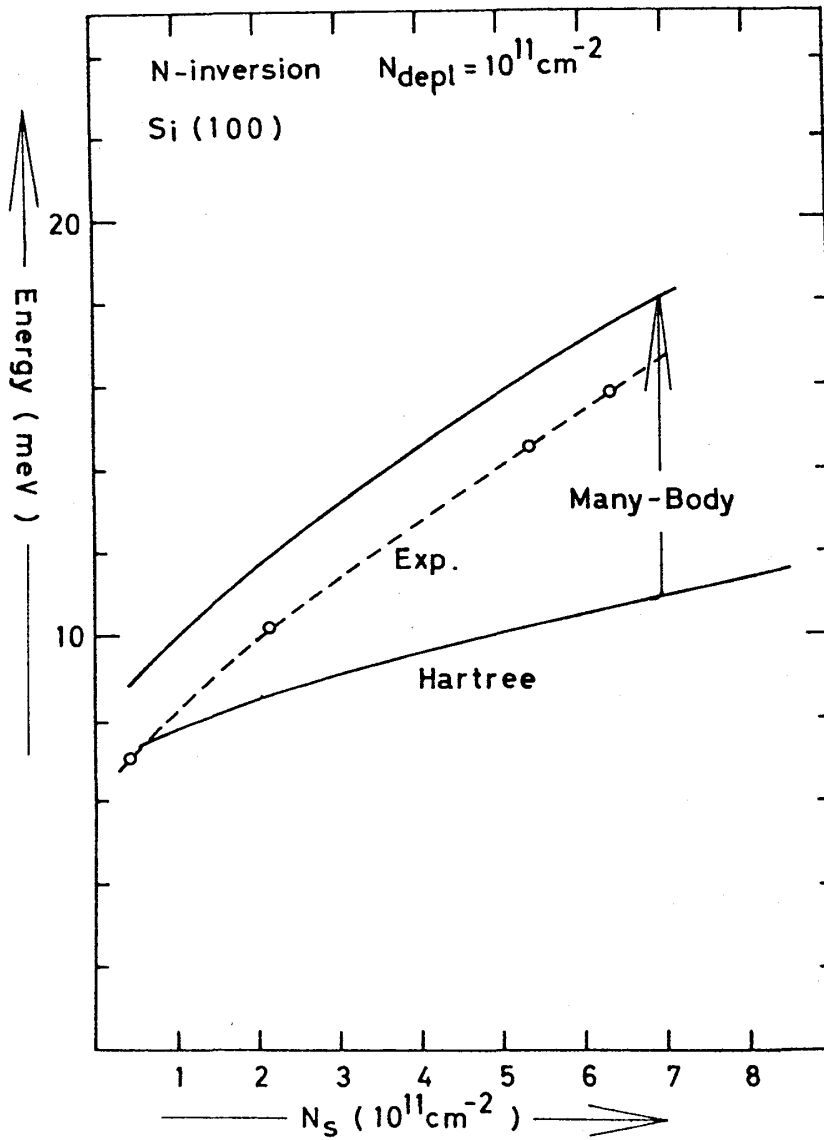
次に, ハートリ近似でとりこめなかったキャリアーキャリア相互作用を摂動として, いわゆる多体効果を受けた準粒子スペクトルを RPA を一歩進めた Hubbard 近似で計算した。励起サブバンドからの誘電関数への寄与を考慮すると, セルフエネルギー, 誘電関数等はサブバンドを添字の足とするテンソルで表わさなければならない。裸のキャリアーキャリア相互作用としては, 先にハートリ近似で求めた無摂動状態の波動関数を使って求め, 鏡像力も含んだものを用いた。但し p チャネルの計算に対しては, 重い価電子帯のみを仮定し, その分散は丸く放物的であると近似した。計算結果を第 1 図~第 5 図

に示すが、実験との一致は極めて良い。



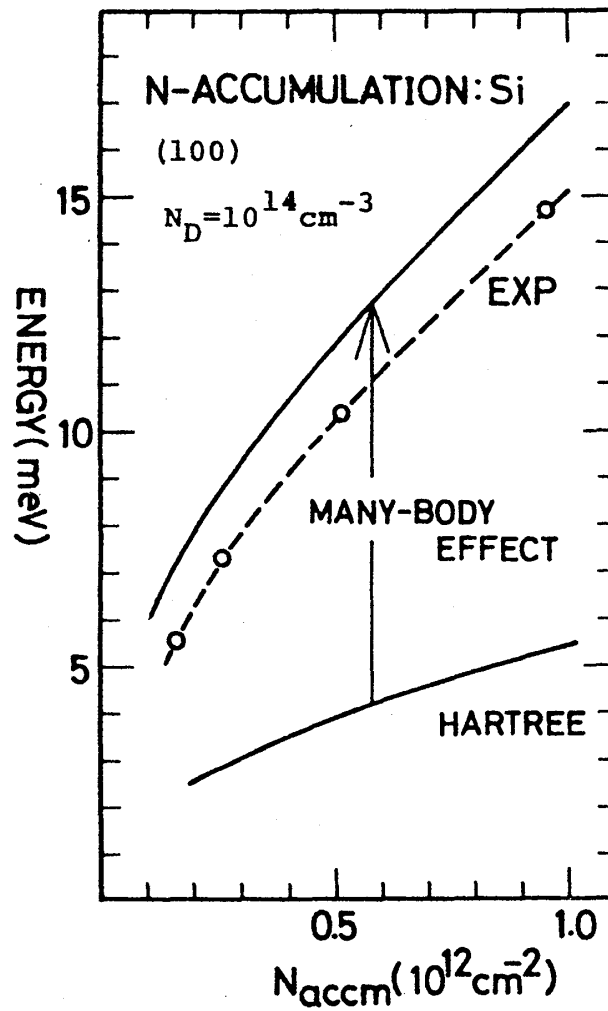
The quasi-particle mass calculated in several approximations. The solid line is the present one. The experimental points obtained by Smith et al. [9] are shown by dots. The singularity appearing in the present calculation is because of the inconsistency of the theory in the higher carrier concentration than the singularity point as described in the thesis. Ting et al.[5] also reported the nearly same result as the approximation of SINGLE SUBBAND (HA). Ando's one is the density functional formalism.

図 1

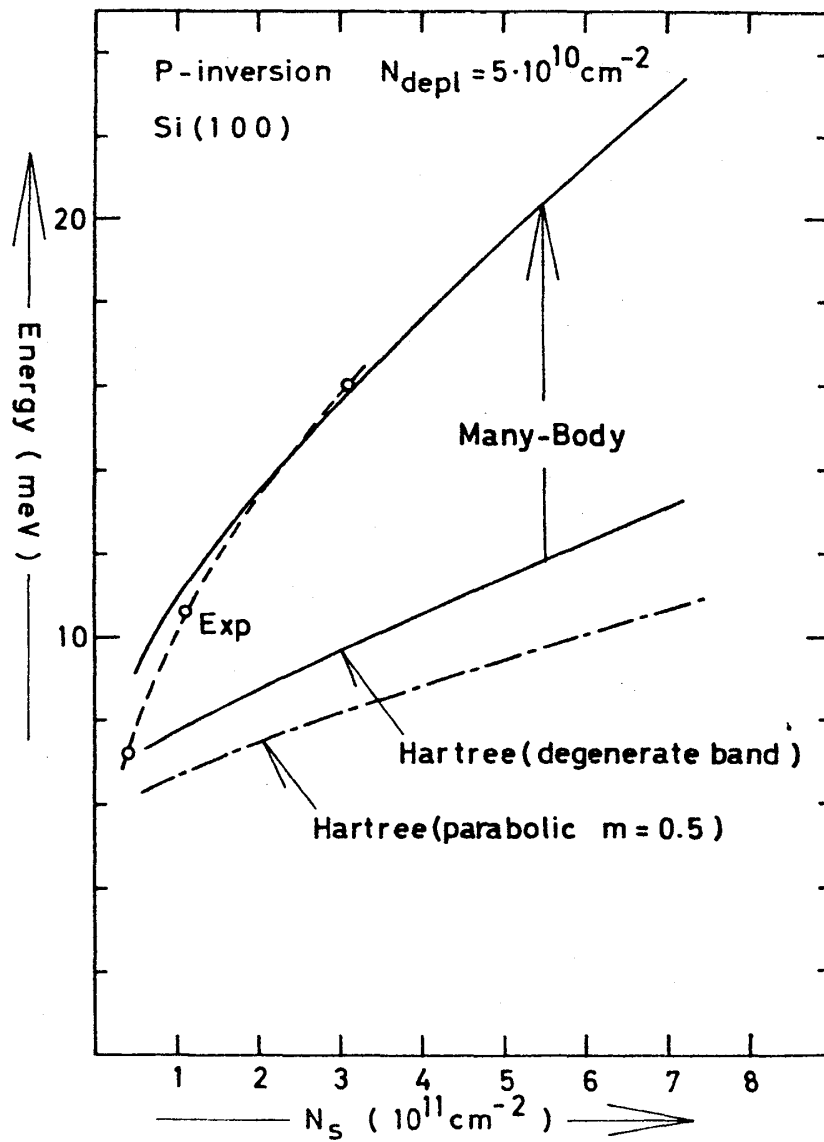


The optical resonance energy for n-channel (100) inversion layer of Si. The experimental data shown in Figs. 5.11, 5.12, and 5.13 were obtained by P. Knescharek, A. Kamgar, and J. F. Koch (preprint).

図 2

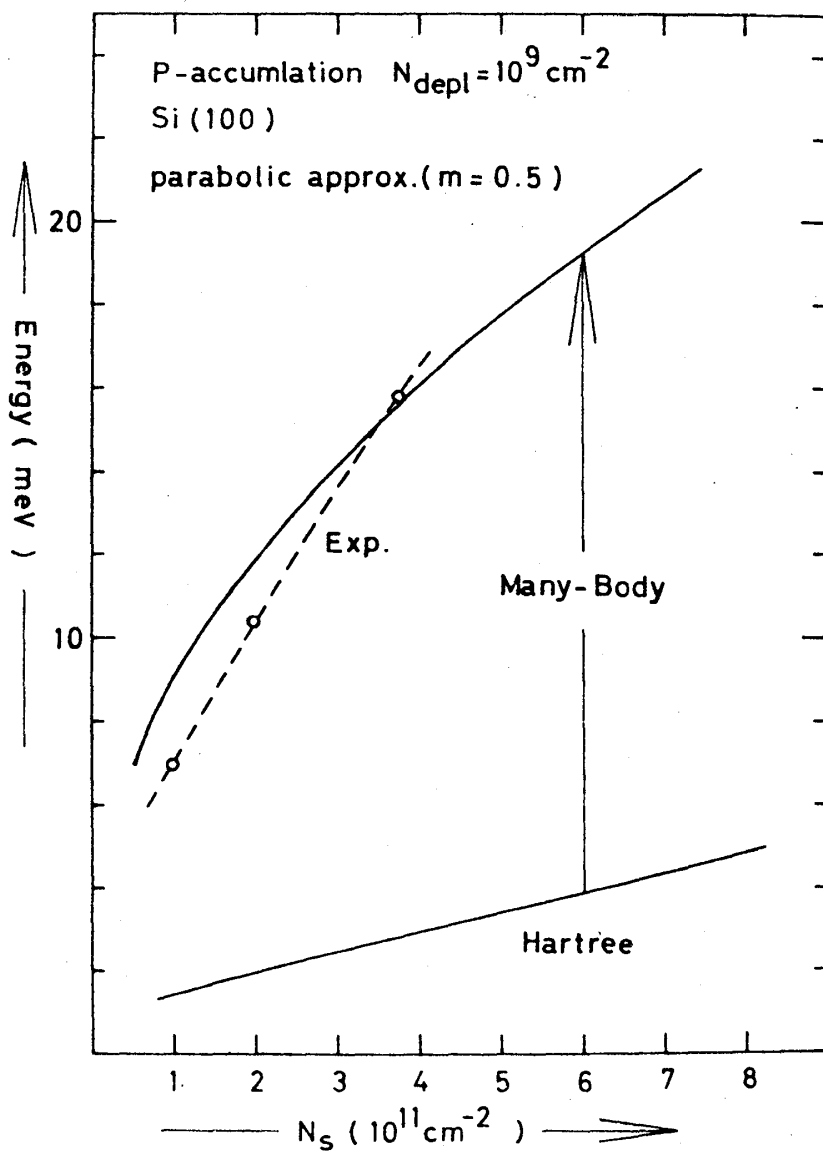


The optical resonance energy together with the experimental points by Kamgar et al.[10] The solid lines are the Hartree one and the corrected one by the many-body effects.



The optical resonance energy together with the experimental results for p-channel (100) inversion layer of Si. The Hartree calculation in the parabolic approximation is shown in dotted-dashed line for the comparison.

図 4



The optical resonance energy for p-channel (100) accumulation layer of Si. The dispersion relation of the heavy hole is assumed to be parabolic (m=0.5).

図 5

参 考 文 献

- 1) J. L. Smith and P. J. Stiles, Phys. Rev. Letters 29 (1972) 102.
- 2) P. Kneshaurek, A. Kamgar and J. F. Koch, Proc. the XII-th Intern. Conf. on Semiconductor Physics, Stuttgart, 1974, p. 709. and to be published in Surface Science.
- 3) R. G. Wheeler, to be published in Surface Science.

Si-n 型 (100) 面反転層における  
Valley 分裂の強磁場下 enhancement

東大理 大 川 房 義  
植 村 泰 忠

Si の伝導帯は縮退する 6 つの谷からなる。不純物に束縛されたドナー状態では、これらの準位は電場による谷間相互作用で分裂し、そのスペクトルは詳しく測定されている。<sup>1)</sup> 理論的には、Twose<sup>2)</sup> の近似により数多くの解析が行われているが、定式化を含め扱いに疑問がある。出発点の方程式は分裂を与えない厳密解を持つのであるが、従来それを変分で扱って分裂を得ているのである。

Si の (100) 面 n 型反転層に於ては、表面垂直方向の質量の違いにより、6 つの谷は 4 重縮退と 2 重縮退のサブバンドの 2 系列に分裂し、これは更に谷間相互作用で分裂する。低温 ( $T \lesssim 10\text{K}$ ) で、通常のキャリア濃度 ( $N_s \lesssim 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ ) では、キャリアは 2 重の系列の基底サブバンドのみに存在する。そして、これに付随する谷分裂は、サブバンド形成の初の実験的証拠と言える Fowler 等<sup>3)</sup> の磁気伝導に現われていたが、その理論的解明は先に述べたように谷分裂を扱う定式の問題もあって長く未解決であった。

我々は谷分裂を扱う一方法として extended zone 有効質量近似を提案し、Si の (100) 面 n 型反転層に適用し、谷分裂として次を得た。