

「Si の (100) 面 n 型表面量子化状態の
valley-orbit 相互作用」

東大理 大 川 房 義

従来, Multi-valley 有効質量近似は1バンドの視点で扱われているが, その定式化にはいささか疑問がある。Multi-valley 構造は本質的に Multi-band 構造で扱う必要がある。一般の場合を実際に計算できる形に定式化するのは難かしいが, Si の (100) 面の表面量子化状態の場合は, 6つの同等な谷のうち, 表面垂直方向に長く伸びた2つの谷が基底サブバンドとなり, 他の谷が無視でき, 考えるべき2つの谷はX点の回りの $k \cdot p$ ハミルトニアンで表現できるので容易に扱うことができる。 $k = (0, 0, z\pi/a)$ の回りでの $k \cdot p$ ハミルトニアンは, X_1 の2つの状態をベースとして

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} (1+L+M) k_{11}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (1+N) (k_z - k_o)^2, & \frac{\hbar^2}{2m} 2L k_x k_y + \Xi_u^1 e_{xy} \\ \frac{\hbar^2}{2m} 2L k_x k_y + \Xi_u^1 e_{xy}, & \frac{\hbar^2}{2m} (1+L+M) k_{11}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (1+N) (k_z + k_o)^2 \end{pmatrix}$$

ここで L, M, N は他の X_4, X_3, X_1 からの寄与で $1+L+M = (0.190)^{-1}$, $1+N = (0.916)^{-1}$, $L > 0, M < 0$, $k_o = \frac{2\pi}{a} \times 0.15$ (a ; 格子定数), $\Xi_u^1 \approx 10$ eV である。対角成分にある e_{ii} に比例した項はエネルギー原点を変えるだけだから除いた。表面状態を考えるには次の波動方程式を考えればよい。

$$(\tilde{H} + V(Z)) \vec{\Psi}(lr) = \epsilon \vec{\Psi}(lr)$$

valley-orbit splitting の量を推定するため Z 方向の抱絡関数として次を仮定する。

$$\Psi_1(Z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} e^{-\frac{b}{2}Z + ik_o Z}$$

$$\Psi_2(Z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} e^{-\frac{b}{2}Z - ik_o Z}$$

$$b = \sqrt[3]{\frac{4m_z F}{3\hbar^2}} \quad ; \quad m_z = \frac{m}{1+N}$$

すると、分離 Δ は次で与えられる。

$$\Delta \approx 0.38 (cm/eV) \times \sqrt{(\hbar\omega_c^*)^2 + (Z\mathcal{E}_u^1 e_{xy})^2} \cdot F \cdot 10^{-7}$$

ここで $F \approx 10^6 \text{ eV/cm}$, $\sqrt{(\hbar\omega_c^*)^2 + (Z\mathcal{E}_u^1 e_{xy})^2} \approx 10 \text{ meV}$ を入れれば, $\Delta \approx 0.38 \text{ meV}$ を得る。一方実験で, レベル巾 1 meV 程度の試料で分離が観測されることから, 現実には 1 meV 以上あると思われる。しかし, 先に安藤らが報告しているように, 反転層内で交換相互作用による g 値の enhancement と同じ機構がこの valley-orbit 分離にも同じく効くはずで, 現実には強磁場で $N=0, 1$ のラングムアレベルのみ分離が観測されている事実は, 交換相互作用を示唆する。

参 考 文 献

- (1) T. Ando and Y. Uemura : J. Phys. Soc. Japan 37 (1974) 1044