

Title	自己形成量子ドットの波動関数マッピング
Author(s)	森, 伸也
Citation	大阪大学低温センターだより. 2003, 123, p. 9-14
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/11018">https://hdl.handle.net/11094/11018</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

# 自己形成量子ドットの波動関数マッピング

工学研究科 森 伸也 (内線 7766)

E-mail: mori@ele.eng.osaka-u.ac.jp

## 1 はじめに

小さな物体の形状を測定するためには、通常、測定したい物体より小さな物体を探針として用いる。一方、良く知られているように、小さな物体はフーリエ空間内において大きな体積を占める。したがって、フーリエ変換を用いることにより、小さな物体を大きな探針で測定できる可能性がある。磁気トンネル分光法 (Magnetotunnelling Spectroscopy, MTS 法) は、実空間における小さな物体を、フーリエ空間内で測定する手段を与える。MTS 法は、英国ノッティンガム大学の Eaves 教授のグループにより精力的に研究されてきており、これまでに種々の系に応用されてきた。その中には、共鳴トンネルダイオード\*の井戸層内の浅い不純物に捕えられた電子の空間的な広がりを測定した例[1]や、量子細線の閉じ込め方向の電子の存在確率 (波動関数の大きさの自乗) を測定した例[2,3]などがある。少し違った応用として、量子井戸における2次元ホールガスのエネルギー分散関係も測定されている[4]。この MTS 法を用いて、最近、InAs 自己形成量子ドットにおける電子の存在確率が測定された[5,6]。この稿では、MTS 法の紹介と、我々が行った自己形成量子ドットの波動関数マッピングに関する理論的な考察の結果について報告する。

## 2 磁気トンネル分光法

磁気トンネル分光法 (MTS 法) では、磁場を用いてフーリエ空間 (波数空間、 $k$  空間) 内で“探針”を走査することにより測定対象の存在確率を測定する。はじめに、図1のように、 $z$  方向に閉じ込められた状態の間を電子がトンネルする場合を考える。そこでは、エミッタ・コレクタ間にバイアス電圧が印加されており、エミッタからコレクタへと電子が流れているとする。また、電子は、エミッタからコレクタへと直接は流れず、中間付近にある井戸層を介して流れているとする。バイアス電圧が適当に大きい場合、エミッタから井戸へのトンネルの方が、井戸からコレクタへのトンネルより起こりにくくなり、電流はエミッタ・井戸間のトンネル過程で律速されるようになる

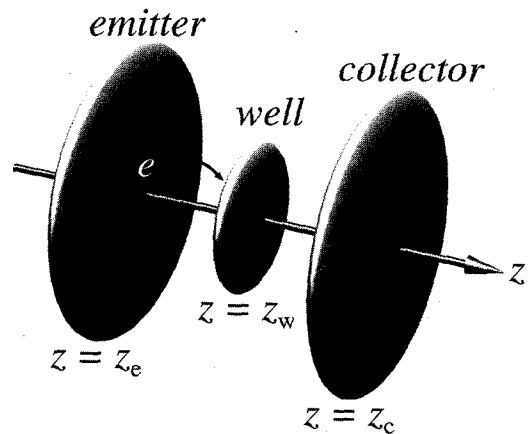


図1. トンネル方向に閉じ込められた状態間での共鳴トンネルの概念図

る。その場合、電流はエミッタ・井戸間のトンネル頻度に比例すると考えることができる。トンネル頻度は、 $z$ 方向の波動関数の重なり程度と  $xy$ 面内の波動関数の重なり積分の大きさの自乗に比例する。MTS法ではトンネル電流に垂直に磁場を印加するが、いま、磁場の方向を  $x$ 軸に選ぶと ( $\mathbf{B} = (B, 0, 0)$ )、トンネル頻度のうち磁場に依存するものは、おもに、磁場と電流とに垂直な  $y$ 方向の波動関数の重なり積分  $M(B)$ となる。ここで、エミッタにおける  $y$ 方向の波動関数を  $\varphi_e(y; B)$ 、井戸における  $y$ 方向の波動関数を  $\varphi_w(y; B)$ として、

$$M(B) = \int \varphi_w^*(y; B) \varphi_e(y; B) dy \quad (1)$$

である。 $z$ 方向の空間的な閉じ込めの幅が、磁場の強さで決まるサイクロトロン半径  $\ell = (\hbar/eB)^{1/2}$ より十分小さい場合、磁場は、電子の波動関数に位相を与えるだけである。すなわち、ゼロ磁場における波動関数を  $\varphi_\alpha(y)$ として、 $\varphi_\alpha(y; B) = e^{i\alpha y/\ell^2} \varphi_\alpha(y)$ と表せる。ここで、 $\alpha$ はエミッタ ( $\alpha = e$ )もしくは井戸 ( $\alpha = w$ )を表す添字であり、 $z_e$ および  $z_w$ は、図1に示したように、それぞれ、エミッタおよび井戸の  $z$ 座標である。以上のことから、エミッタと井戸との間の距離を  $\Delta s (= z_w - z_e)$ として、 $\varphi_\alpha(y)$ のフーリエ変換を  $\Phi_\alpha(k_y)$ とすると、 $M(B)$ の磁場依存性は

$$\begin{aligned} M(B) &= \int e^{i(z_e - z_w)y/\ell^2} \varphi_w^*(y) \varphi_e(y) dy \\ &= \sum_{k_y} \Phi_w^*(k_y - \Delta s/\ell^2) \Phi_e(k_y) \end{aligned} \quad (2)$$

と表せることがわかる。すなわち、 $M(B)$ は  $\Phi_w(k_y)$ と  $\Phi_e(k_y)$ とを磁場  $B$ に比例した量  $k_0 (= \Delta s/\ell^2 = eB \Delta s/\hbar)$ だけずらして積分した値となる。いま、実空間において、エミッタ層の波動関数の広がり  $\Phi_e$ が井戸層の波動関数の広がり  $\Phi_w$ より十分大きいとする。すると、図2に示したように、 $M(B) \propto \Phi_w(k_0)$ となり、電流値  $I$ が  $I \propto |M(B)|^2 \propto |\Phi_w(k_0)|^2 = |\Phi_w(eB \Delta s/\hbar)|^2$ となることがわかる。

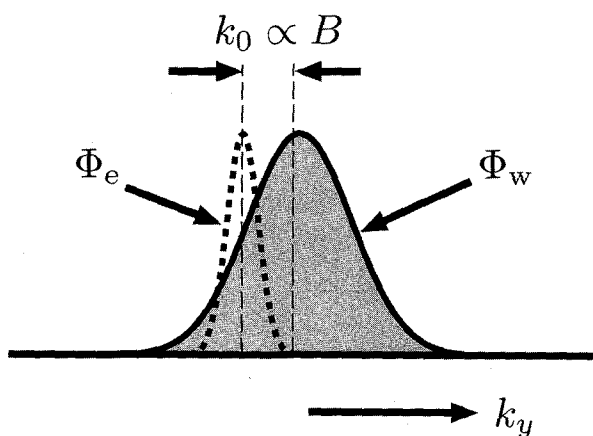


図2. 実空間で広い場所を占める波動関数  $\varphi_e$  のフーリエ変換  $\Phi_e$  は、 $k$ 空間では鋭い。逆に、実空間で小さな領域しか占めない波動関数  $\varphi_w$  のフーリエ変換  $\Phi_w$  は、 $k$ 空間では広がっている。重なり積分  $M(B)$ は  $\Phi_e$ と  $\Phi_w$ とを  $k_0 = eB \Delta s/\hbar$ だけずらして積分した値であるが、いま  $\Phi_e$ が鋭いので、 $M(B) \propto \Phi_w(k_0)$ となる。

すなわち、電流値の磁場依存性を測定することにより、井戸層における波動関数フーリエ変換の自乗を知ることができる。以上がMTS法[2,3]である。

### 3 自己形成量子ドットの波動関数マッピング

最近、ノッティンガム大学のグループは、MTS法を用いて、InAs自己形成量子ドット内の電子の存在確率の測定に成功した[5,6]。InAsをGaAs基板上にエピタキシャル成長させると、InAsとGaAsとの格子定数の違いにより歪みが生じる。そして、InAsの成長膜厚が厚くなると、この歪みを緩和するために、InAsは、面内方向

に10 nm から20 nm 程度、成長軸方向に10 nm 以下程度の大きさの3次元の島状構造となる。これが、InAs 自己形成量子ドットである。ノッティンガム大学のグループは図3に示したようなデバイスを用いてMTS測定を行った。デバイスはGaAs (311) B基板上に成長されており、12 nm 厚のGaAs 井戸層と8.3 nm 厚のAlGaAs 障壁層からなる共鳴トンネルダイオードの井戸層の中央にInAs 量子ドットが埋め込まれている。InAs 量子ドットは自己形成であるため、大きさにばらつきがあり、結果としてエネルギー準位も量子ドット間で異なっている。サイズの大きな量子ドットは、ゼロバイアス付近でもエミッタのフェルミ準位より低エネルギー側に位置しており、負に帯電している。そのため、デバイスは、図3に示したように、中央部が高いポテンシャル・プロファイルを示す。

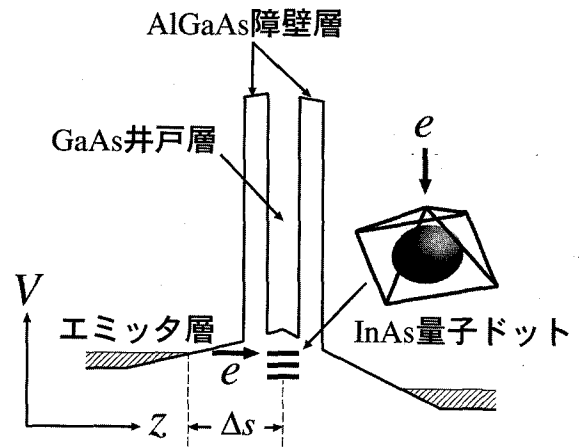


図3. InAs 自己形成量子ドットを井戸層の中央に持つ共鳴トンネルダイオードの模式図。量子ドットは、底面がz軸に垂直な面に平行になるように埋め込まれており、エミッタから注入された電子は量子ドットの頂点から底面方向へと流れる。

以上のようなデバイスにおいて、ヘテロ界面に沿った方向で磁場を回転させて、ヘリウム温度に

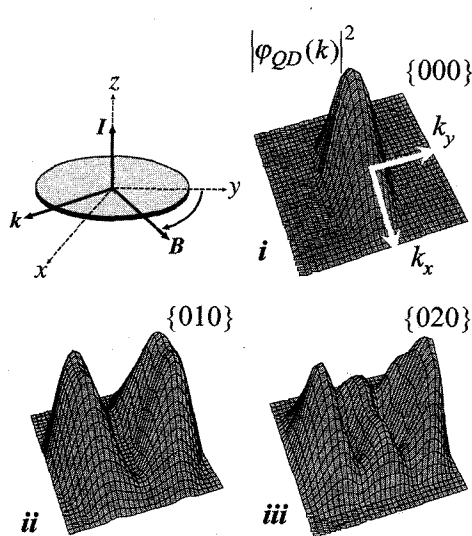


図4. ヘテロ界面に沿った方向で磁場を回転させて測ったヘリウム温度における微分コンダクタンス ( $dI/dV$ ) の磁場依存性 (i, ii, iii). 左上の図に、電流  $I$ 、磁場  $B$ 、波数ベクトル  $k$  の間の関係を示す。

における微分コンダクタンス ( $dI/dV$ ) の磁場依存性が測定された。測定された結果を ( $k_x, k_y$ ) の関数としてプロットしたものを図4に示す。最大磁場は12 Tである。測定はゼロバイアス付近で行われ、i, ii, iiiの順でバイアスが高くなっている。iの状態は節がないことから基底状態を表していると考えられる。図より、この基底状態は、 $k$ 空間内で $[233]$ 方向 (図の  $k_y$  方向) に狭く、 $[01\bar{1}]$ 方向 (図の  $k_x$  方向) に広がっている様子がわかる。エミッタと井戸との間の距離  $\Delta s$  を、図3に示したように、エミッタ層の端と量子ドットとの間の距離  $\Delta s = 25$  nm として、磁場の強さを  $k$  の大きさに換算することにより、電子の存在確率の実空間での広がりが見積もられた。その結果、 $[233]$ 方向に16 nm、 $[01\bar{1}]$ 方向に9 nmとなった。これらの値は、AFM法を用いて測定された量子ドットの底辺の長さ18 nm と近い値となっている。

#### 4 波動関数マッピングの数値シミュレーション

前節で述べたInAs 自己形成量子ドットの波動関数マッピング実験では、エミッタ状態が3次的に広がっており ( $z$ 方向に閉じ込められていない)、また、低バイアス条件で測定が行われている。このため、はじめに述べたような従来のモデルを単純に適用することができない。3次的に広がっ

たエミッタ状態では、①エミッタと量子ドットとの間の距離 $\Delta s$ が一意に決まらない、②エミッタにおいて、複数の横モード（面内方向のモード）がトンネルに寄与する、③磁場の効果を波動関数の位相にだけ含めることができない、などの問題が生じる。また、低バイアス条件では、④電流がエミッタ・井戸間のトンネルだけで律速されることはない。実際、ゼロバイアス付近では、デバイスを左右対称な共鳴トンネル構造とみると、トンネル確率は共鳴条件で常に1となり、波動関数の重なり積分には依らないことが知られている。そこで、以上のようなことを調べるため、波動関数マッピングの数値シミュレーションを行った。その結果、量子ドットが帯電することによりできるエミッタ層と障壁層との間のポテンシャルが高くなっている部分（図3参照。以下、この部分を土手領域と呼ぶ）が重要な働きをしていることがわかった。

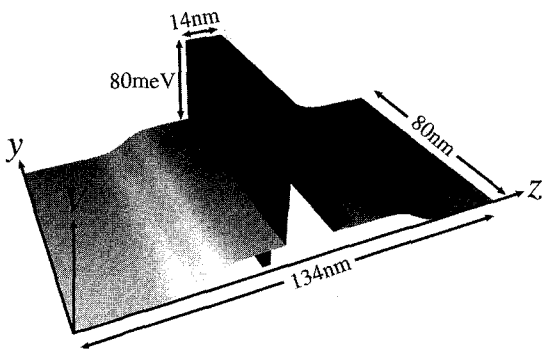


図5. 数値シミュレーションに用いたポテンシャル分布  $V(y,z)$

$z$  方向に14 nm 厚のトンネル障壁の中央に24 nm 幅、4 nm 厚の井戸を設けた構造である。中央の井戸が量子ドットを表していると考えられる。井戸の底のポテンシャルを上下することにより、エミッタ・コレクタ間バイアスをシミュレートした。また、土手領域の効果を調べるために、図5のように、トンネル障壁の前後に緩やかでかつ低いポテンシャル障壁を設けた。この土手領域のポテンシャルの高さはエミッタのフェルミエネルギー（20 meV）程度である。

土手領域が存在することにより、トンネル距離が長くなり、その結果、トンネル頻度は非常に低くなる。例えば、図5の構造の場合、共鳴幅は $\Gamma = 100 \mu\text{eV}$ 程度にしかない（「共鳴幅」については用語解説の「共鳴トンネルダイオード」の項参照）。このように、共鳴幅がエミッタのエネルギー幅より十分小さい場合、トンネル電流は共鳴幅に比例する。そこで、トンネル電流の磁場依存性を調べるために、共鳴幅の磁場依存性を計算した。図6にその結果を示す。●印は井戸内の基底状態に共鳴した場合の共鳴幅 $\Gamma_1$ を、○印は第1励起状態に共鳴し

波動関数マッピングの数値シミュレーションは、ポテンシャルにより閉じ込められた2次元電子ガスのトンネル確率を数値的に計算することにより行った。トンネル確率の数値計算には、臼杵らによって開発された方法[7]を応用した。図5に計算に用いたポテンシャル分布  $V(y,z)$  の例を示す。2次元電子ガスは  $yz$  面内に存在し、 $x$  方向の磁場  $B$  が印加されている。図は、

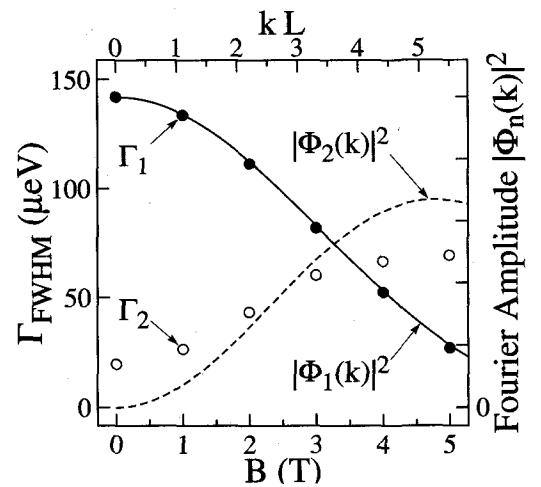


図6. 共鳴幅の磁場依存性の計算結果。●印は井戸内の基底状態に共鳴した場合の共鳴幅 $\Gamma_1$ を表し、○印は第1励起状態に共鳴した場合の共鳴幅 $\Gamma_2$ を表す。井戸内の束縛状態の波動関数のフーリエ変換の自乗を実線（基底状態）と破線（第1励起状態）で示す。波数ベクトル  $k$  は井戸幅  $L = 24 \text{ nm}$  で規格化した。図のように、 $B = 5 \text{ T}$  のとき  $kL = 5.5$  とすると  $\Gamma_n(B)$  と  $|\Phi_n(k)|^2$  とが重なる。このとき、 $\Delta s = (\hbar/eB)(kL/L) = 30 \text{ nm}$  であり、この値はエミッタ層の端と井戸の中央との間の距離にほぼ等しい。

た場合の共鳴幅 $\Gamma_2$ を表す。ゼロ磁場において、 $\Gamma_2 \ll \Gamma_1$ となっていることがわかる。これは、土手領域が最低次の横モードのみを残すフィルターの働きをしているためである。横モードが最低次の波は縦方向 ( $z$  方向) に大きな運動エネルギーを持っており、そのような電子だけが土手領域を越えてくることができると考えられる。土手領域を持たない構造で同様の計算を行った場合、複数の横モードが等しくトンネルに寄与するために、 $\Gamma_2 \leq \Gamma_1$ としかならないことが確かめられた。図6には、井戸内の束縛状態の波動関数のフーリエ変換も同時にプロットした。共鳴幅の磁場依存性がフーリエ変換に対応することがわかる。さらに、図より、磁場を波数に換算するために必要な $\Delta s$ はエミッタ層の端から測れば良いこともわかる。

## 5 おわりに

実空間における小さな物体を、フーリエ空間内で測定する手段のひとつとして、磁気トンネル分光法 (Magnetotunnelling Spectroscopy, MTS 法) を紹介した。MTS 法は若干複雑なデバイス構造を要求するが、デバイスの奥深くに埋め込まれたナノ構造の電子状態を知ることができるという特徴を持っており、走査型プローブ顕微鏡などと相補的に利用することにより、ナノ構造の電子状態の理解がより深まることが期待される。

## 参考文献

- [1] J.W.Sakai, T.M.Fromhold, P.H. Beton, L.Eaves, M.Henini, P.C. Main, F.W.Sheard, and G.Hill, Phys. Rev. B **48** 5664 (1993).
- [2] P.H.Beton, J.Wang, N.Mori, L.Eaves, P.C.Main, T.J.Foster, and M.Henini, Phys. Rev. Lett. **75** 1996 (1995).
- [3] N.Mori, P.H.Beton, J.Wang, and L.Eaves, Phys. Rev. B **51** 1735 (1995).
- [4] R.K.Hayden, D.K.Maude, L.Eaves, E.C.Valadares, M.Henini, F.W.Sheard, O.H.Hughes, J.C.Portal, and L.Cury, Phys. Rev. Lett. **66** 1749 (1991).
- [5] E.E.Vdovin, A.Levin, A.Patané, L.Eaves, P.C.Main, Yu.N.Khanin, Yu.V.Dubrovskii, M.Henini, and G.Hill, Science **290** 122 (2000).
- [6] A.Patané, R.J.A.Hill, L.Eaves, P.C.Main, M.Henini, M.L.Zambrano, A.Levin, N.Mori, C.Hamaguchi, Yu.V.Dubrovskii, E.E.Vdovin, D.G.Austing, S.Tarucha, and G.Hill, Phys. Rev. B **65** 165308 (2002).
- [7] T.Usuki, M.Saito, M.Takatsu, R.A.Kiehl, and N.Yokoyama, Phys. Rev. B **52** 8244 (1995).
- [8] L.L.Chang, L.Esaki, and R.Tsu, Appl. Phys. Lett. **24** 593 (1974).

## 用語解説

### 共鳴トンネルダイオード

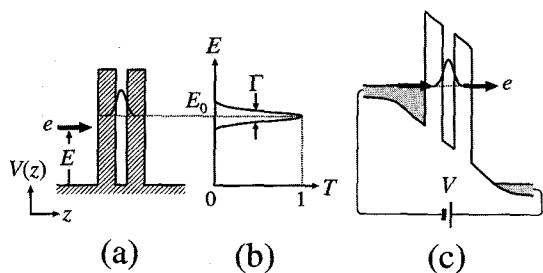


図7. 共鳴トンネルダイオード

トンネル確率  $T$  はトンネル障壁の厚さに対して指数関数的に小さくなるので、図7(a)のように2重のトンネル障壁にエネルギー  $E$  の電子が入射する場合、一般的には、1重のトンネル障壁に比べてトンネル確率は非常に小さくなる。ところが、中央の井戸層の擬束縛状態のエネルギー準位  $E_0$  に  $E$  が一致するとトンネル確率は  $T = 1$  となる (共鳴トンネル効果)。すなわち、図7(b)のように、2重障壁トンネル構造のトンネル確率は、 $E_0$  の前後、共鳴幅  $\Gamma$  程度にわたって共鳴的に大きくなる。この共鳴トンネル効果を利用した2端子のデバイスが共鳴トンネルダイオードである (図7(c))。共鳴トンネルダイオードは、外部印加電圧  $V$  により、エミッタと井戸層とのエネルギー差が変化し、共鳴トンネル効果により、非線形の電流電圧特性を示す[8]。