

超格子中の音響フォノンに対するモード変換機能

加 藤 初 儀

Mode conversion mechanism of acoustic phonons in superlattices

Hatsuyoshi KATO*

概 要

ヘテロ接合半導体超格子に於ける音響フォノンのモード間相互作用について、その概要を論じる。議論を明確にするため、始めに周期的超格子を構成する各層を等方的媒質と仮定し、音響フォノンのモード変換機能が超格子に存在することを明らかにする。さらに、モード変換の効率を強めるため、非周期的超格子を考察する。また、モード変換機能の検出のための実験例も提案した。一方、超格子の構成層が異方性をもつ場合の影響を分散関係によって示し、モード変換機能が等方的層より構成される超格子の場合と同様に理解できることを示した。結論では、この超格子のモード変換器としての応用、および能動素子としての応用の可能性を議論する。なお、付録においてフォノンの理解を助けるために、共鳴透過現象を例として、フォノンと電子の類似性について述べた。

Abstract

Mode interactions between acoustic phonons in heterojunction semiconductor superlattices are discussed concisely. First we assume that layers in periodic superlattices are anisotropic for simplicity of the discussion, and show resonant mode conversion in the superlattices exists. Further, to raise efficiency of the mode conversion we consider an aperiodic superlattice. Also, some experiments to detect the resonant and enhanced mode conversions are proposed. On the other hand, isotropy of the layers in the superlattices are considered using dispersion relations of infinite-size superlattices. In this condition, the mode conversions also exist as well as the anisotropic cases. In conclusion, we show possibilities of application of the above mode conversion as the phonon optical devices both passive and active. In appendix, for a help of understanding phonon features, we discuss the resonant transmissions for both phonons and electrons.

1 序 論

ナノスケールヘテロ半導体薄膜積層構造である人工超格子は、高温超伝導体等と共に新しい光、電子材料として重要である。さらに、この数あるいは数十原子層からなるマイクロ（または、メソスコピック）な構造における音響振動（フォノン）のダイナミクスは単に基礎物性の解明上のみならず、THz領域におけるフォノン光学素子への応用上からも興味をもたれている。

周期的な超格子におけるフォノンの物理的特性は、波数と周波数の間に成立する分散関係によっ

て支配される。これは、無限周期系において意味をもち、フォノンのバンド構造を決めている。一方、現実に作製される有限周期超格子において、この分散関係と直接比較できる物理量としてフォノンの透過率があり、前者の周波数ギャップ内で後者は鋭くゼロに落ちこむ。これらの量は共に超格子系におけるフォノン場の転送行列を用いて計算され、その計算結果とフォノン・スペクトロスコピー法あるいはフォノン・イメージング法による実験結果とは良く一致している¹。

しかし、これまでのフォノンの分散関係の計算は、主に立方晶の[001]方向に積層された超格子に対するものが殆どである。一方、立方晶の[111]方向にも超格子は成長可能であり、実際縦波フォ

* 助教授 一般教科

ノンの透過実験が初めて行われたのは(111) GaAs/AlAs 超格子においてである²。(111)超格子においては界面が鏡面对称性をもたないため、斜方入射に対してフォノンの入射角と反射角は等しくならず、その分散関係に(001)超格子とは異なる特徴が期待される。本論文ではこの点を詳細に検討し、分散関係にゾーンの中心と端以外の波数で周波数ギャップが生じることを見出した。さらに、この系におけるフォノンの透過、反射特性を転送行列法に基づいて明かにした。

一方、フォノンの斜方入射においては、垂直入射で生じるフォノンの単一モード間のブラッグ反射の他に、モード遷移を伴うブラッグ反射が理論、実験の両面から新たに発見されている。これらは、フォノンの分散関係で二つの分枝が音速の違いにより互いに交差しようとする周波数で生じる。その様な周波数においては、さらにフォノン間にモード変換を伴う共鳴的透過が生じる可能性がある。本研究では、この共鳴的透過が実際に存在すること、またそれが単に周期的超格子のみならず、層厚を「共鳴透過条件」を満たす値の前後で徐々に変化させた超格子においても生じる事を³、解析的および数値的計算により示した。後者の非周期的超格子は CHIRP 超格子と呼ばれ⁴、電子デバイスへの応用上興味を持たれている。

2 超格子の構造とフォノン

広い意味での超格子とは、低次元の物理現象が生じる構造をもつ人工構造と定義できる。しかし、本論では、初期の頃から研究対象となっている人工的積層構造物を考察する。図1にその

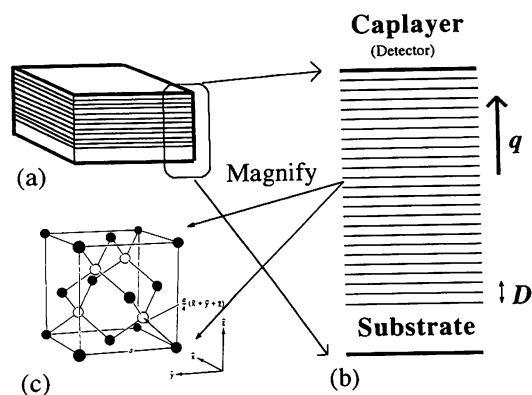


図1：超格子の構造を示す。(a)外観の縦方向を強調して描いた。(b)積層の様子を拡大して見た。(c)各層が GaAs 等のセン亜鉛構造を持つ場合の結晶のようす。

構造を示す。基盤 (substrate) 上に2種の媒質よりなる層(AまたはB)を交互に積層する。以降の考察の具体例では、層 A, 層 B は各々 AlAs, GaAs とする。両媒質ともに、結晶ではセン亜鉛構造をもつ。

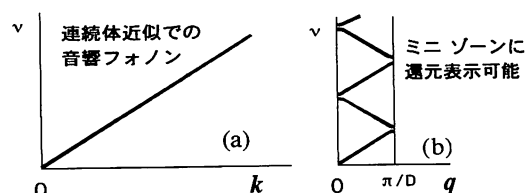


図2：周波数 ν と超格子の界面に垂直な波数成分間の関係を示す分散関係。(a)バルクの場合で、周波数が低い部分でのブリルアンゾーンのような。(b)超格子でのミニゾーンのようす。

上記の超格子中を伝搬するフォノンの分散関係を図2に示す。縦軸が周波数、横軸が波数である。図(a)にあるバルクの場合では、ブリルアン・ゾーンの波数 k が小さな領域で、周波数 ν が k に比例する。媒質を連続体近似すると分枝は直線となり、この近似で記述できる周波数は考察しようとする AlAs, GaAs で約 1 THz 程度までである。超格子での層界面に垂直な波数ベクトルの成分を q とすると、図(b)のようにブリルアン・ゾーンより小さなミニゾーンと呼ばれる波数領域に分散関係が還元表示可能となる。人工的に導入した空間的な長周期構造に起因してミニゾーンの端や境界で分枝に跳びが生じる。ここではフォノンが伝搬できず、これをストップバンドと呼ぶ。これはブラッグ反射に起因して生じ、モード変換がない場合にはミニゾーンの中央や端にストップバンドが現われ、モード変換がある場合にはミニゾーンの内部にストップバンドが生じることは既に知られている。

(001)面を界面とし、フォノンを垂直入射すると解析が容易となるが、本研究の目的は、ブラッグ反射以外のモード間の相互作用を調べることで、および、分散関係に対する(111)面の影響を調べることにする。このため、等方的媒質層をもつ超格子に対するフォノンの斜方入射をまず調べる。次に、(111)面を界面としてもつ超格子での斜方入射を考察する。なお、(111)超格子はフォノンの周波数遮断フィルターとしての性質の議論で当初より調べられている基本的な超格子である。本研究の応用として、特に、「モード変換」に着目して以降の議論を進める。

3 等方的周期超格子

まず、等方的媒質を層とする周期的超格子を考察することで、超格子のモード変換の機能を議論しやすくする。主に、 L モードを入射してモード変換により T モードに変換されて超格子を透過する音響フォノンを扱う。これより、「共鳴透過現象」の存在を本研究によって明らかにした⁵。

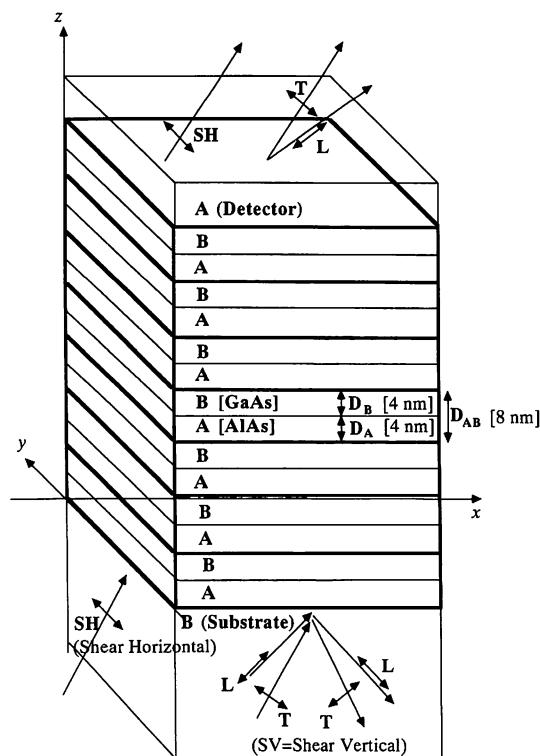


図 3 : 等方的媒質層からなる周期超格子の構造を示す。層 A, 層 B は, それぞれ AlAs と GaAs のアモルファスより成るとする。基盤(substrate)は層 B, 検出層(detector)は層 A と同じ弾性的性質をもつとする。

超格子の構造を図3に示す。層AをAlAs, 層BをGaAsとする。層の厚さ D_A と D_B は共に40 Åとするので, 単位構造ABの厚さ D_{AB} は80 Åとなる。議論を簡潔にするため, 基盤(substrate)は層B, 検出層(detector)は層Aと同じ媒質とする。図中に示したSH (Shear Horizontal) モードは界面である (x, y) 面と偏極ベクトルが常に平行で他のモードとは独立に扱える。 L モードは波数ベクトルと平行に偏極する。 T モードは波数ベクトルと垂直に偏極し, SV (Shear Vertical) とも呼ばれる。この T , L モードの波数ベクトルと偏極ベクトルは全て (x, z) 面上に載る。検出層では, 透過した全エネルギーが吸収されて反射

波が存在しないと仮定する。以降では、まず L と T モードを中心に考察し、 SH モードは(111)超格子の議論で別に取り扱う。

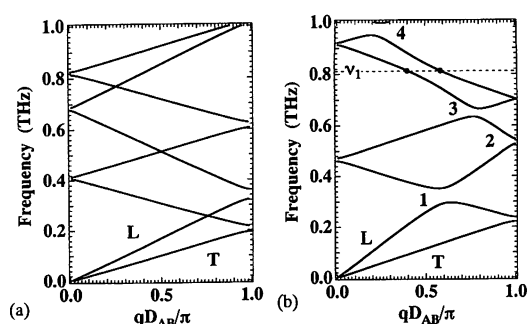


図 4：等方的媒質層からなる GaAs/AlAs 周期超格子で、各層を連続体近似した場合の分散関係を示す。層の厚さは、 $D_A = D_B = 40 \text{ \AA}$ としてある。(a) 界面への垂直入射の場合。(b) 界面に L モードのフォノンを 45° の角度で斜方入射した場合。

図3にある超格子での L と T ードに対する分散関係の計算例を図4示す。図(a)は垂直入射の例で、分枝が交差しても相互作用がないため跳びが生じない。ゾーンの中央や端でのみ、分枝の跳びが見られる。これは、モード変換の無いブラッグ反射として知られているものであることは、既に述べた。図(b)が L モードを 45° で入射したときの分散関係である。番号1を付したの部分で、 L と T モードの相互作用のために、ゾーンの内部に分枝の跳びが見られる。ここでは、フォノンが伝搬しない周波数のギャップ(ストップバンド)が生じる。これは、モード変換のあるブラッグ反射として知られているものであることも既に述べた。このとき、分枝の傾きは異なる符号を持って交差する。

一方、分枝の傾きが同じ符号を持って交差する周波数 $\nu_1 = 812\text{GHz}$ では、分枝に跳びが生じるが、ストップバンドが生じない。この周波数を「共鳴周波数」を呼ぶこととする。ここでは、フォノンの透過が可能で、強いモード変換が生じることとなる。これを以降、「共鳴透過」と呼ぶ。

分散関係と透過率の関係を図5に示す。図(a)は先の分散関係である。図(b)がLモードを45°で入射した際の透過率で、積層した単位構造ABの個数は16である。分散関係中のストップバンド1, 2, 3の周波数で透過率の落ち込みが生じて、強い反射であるブラッグ反射が生じていることが

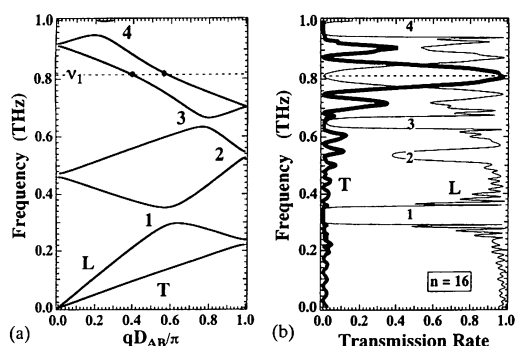


図5：(a)分散関係であり、図4での斜方入射した場合と同じである。(b)分散関係を算出した条件と同じ条件でLモードのフォノンが45°斜方入射したときの透過率を示す。透過率の大きな落ち込みに付した数字1, 2, 3, 4は、分散関係中のブラッグ反射に起因するストップバンドと対応している。周波数 ν_1 では、強いモード変換が生じていることが分かる。超格子中の単位構造数は16である。

分かる。周波数 $\nu_1=812\text{GHz}$ では、Tモードに変換されて透過する現象が見られる。

透過率を詳しく調べるために、次に、透過と反射の構造因子を考察する。図6に示すように、入射するLモードは、超格子内を透過するとき減衰しないと近似し、各界面で1回のみモード変換をうけて検出層にTモードのフォノンとして現れるとする。層BとAの界面での振幅透過係数を t_{BA} 、層AとBの界面での振幅透過係数を t_{AB} とする。この各振幅を検出層で足し合わせたものが、検出層にモード変換をうけて現われたフォノンの振幅で、以降、透過の構造因子と呼ぶ。算出結果の絶対値の自乗は、単位構造の個数を n として次のようになる。

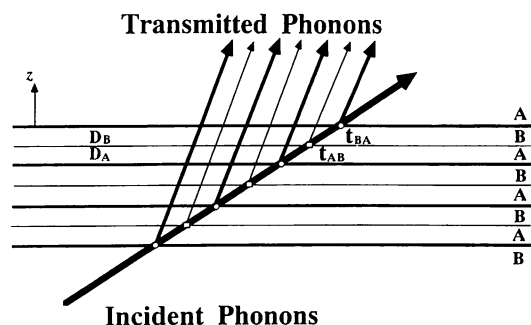


図6：透過の構造因子の算出方法を示す。入射波は超格子を減衰せずに透過し、各界面で1回のみモード変換を受けて検出層に達した透過波がもつ振幅の和を求める。

$$|S_T|^2 = |t_{BA} + t_{AB} e^{i\phi^{(B)}}|^2 \frac{\sin^2(n\Phi/2)}{\sin^2(\Phi/2)}, \quad (1)$$

ここで、

$$\phi^{(B)} = (k_T^{(B)} - k_L^{(B)})D_B, \quad (2)$$

$$\Phi = (k_T^{(A)}D_A + k_T^{(B)}D_B) - (k_L^{(A)}D_A + k_L^{(B)}D_B), \quad (3)$$

$k_L^{(A)}$ は、層A内でのLモードの波数ベクトルの界面に垂直(z軸)な成分であり、 $k_T^{(A)}$, $k_L^{(B)}$, $k_T^{(B)}$ も同様の意味で用いている。 D_A , D_B は、それぞれ層A, 層Bの厚さである。透過の構造因子の絶対値の自乗がピークを持つ条件が「共鳴透過条件」となる。つまり、 m を整数として

$$\Phi = 2\pi m. \quad (4)$$

なお、モード変換を伴わない透過をこの構造因子で扱うことは不可能である。これは、入射したLモードのフォノンが減衰しないと仮定したことによる。共鳴透過の消滅則は式(1)より次のように得られる。

$$|t_{BA} + t_{AB} e^{i\phi^{(B)}}| = 0. \quad (5)$$

これは、一つの単位構造AB内での2モードの透過波間の干渉条件となっている。

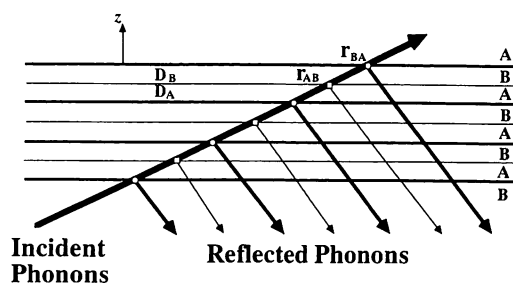


図7：反射の構造因子の算出方法を示す。入射波は超格子を減衰せずに透過し、各界面で1回のみ反射され基盤に戻った反射波がもつ振幅の和を求める。

反射の構造因子の算出過程を図7に示す。入射するLモードのフォノンは、超格子内を透過するとき減衰しないと近似する。層の各界面で1回のみモード変換をうけて基盤にTモードのフォノンが現れるとして、検出層内に戻ってくる反射波の振幅を計算したものが反射の構造因子である。単位構造の個数を n として、反射の構造因子の絶対値を自乗した結果を示す。

$$|S_R|^2 = |r_{BA}e^{i\theta^{(B)}} + r_{AB}|^2 \frac{\sin^2(n\theta/2)}{\sin^2(\theta/2)}, \quad (6)$$

ここで,

$$\theta^{(B)} = (k_L^{(B)} + k_T^{(B)})D_B, \quad (7)$$

$$\Theta = (k_T^{(A)}D_A + k_T^{(B)}D_B) + (k_L^{(A)}D_A + k_L^{(B)}D_B), \quad (8)$$

であり, 層 B と層 A の界面での振幅反射係数を r_{BA} , 層 A と層 B の界面での振幅反射係数を r_{AB} とする。その他の記号は, $|S_T|^2$ の表現にあるものと同じである。反射の構造因子の絶対値の自乗がピークを持つ条件がブラッグ反射条件となる。整数を m として,

$$\Theta = 2\pi m. \quad (9)$$

ここで着目すべき点として, モード変換を伴わない反射もこの構造因子と同様に考えることができる。なお, ブラッグ反射の消滅則も式(6)より次のように与えられる。

$$|r_{BA}e^{i\theta^{(B)}} + r_{AB}| = 0. \quad (10)$$

これは, 一つの単位構造 AB 内での 2 モードの反射波間の干渉条件となっている。

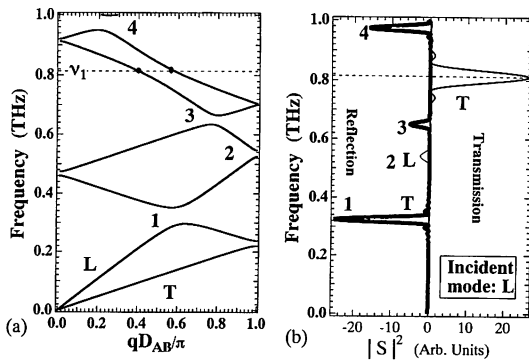


図 8 : (a) 分散関係で図 5 および図 4 に示したのと同じものである。(b) 透過と反射に対する構造因子の絶対値の自乗を示す。透過に対しては右側にピークを持つよう、反射に対しては左側にピークを持つように描いている。

構造因子の数値計算例を, 図 8 に示す。図 (a) が分散関係で, 図 (b) がこれに対応する構造因子である。構造因子は, 透過の場合には, 右にピークを持つように, 反射の場合には, 左にピークを持つ様に描いている。番号 1, 3 は, L モードを入射したとき T モードに変換されて反射するブラッグ反射を示す。このとき, ストップバンド

はミニゾーンの内部にある。番号 2 は, L モードを入射したときモード変換を受けずに L モードのまま反射するブラッグ反射を示している。このストップバンドはゾーンの端に存在する。

共鳴透過条件を満たす周波数 $\nu_1 = 812\text{GHz}$ では, モード変換を伴った透過の構造因子がピークを持っていることが分かる。このとき, モード変換の有無によらず反射の構造因子は全て零である。 T モードを入射して L モードに変換されて透過する場合の構造因子も同じ周波数でピークを持つことが分かっている。これより, 周波数 ν_1 ではフォノンが反射せず, モード変換を受けながら超格子中を伝搬することが分かり, ふたつのモードのエネルギーが超格子中をフォノンが伝搬するにしたい振動することが期待できる。

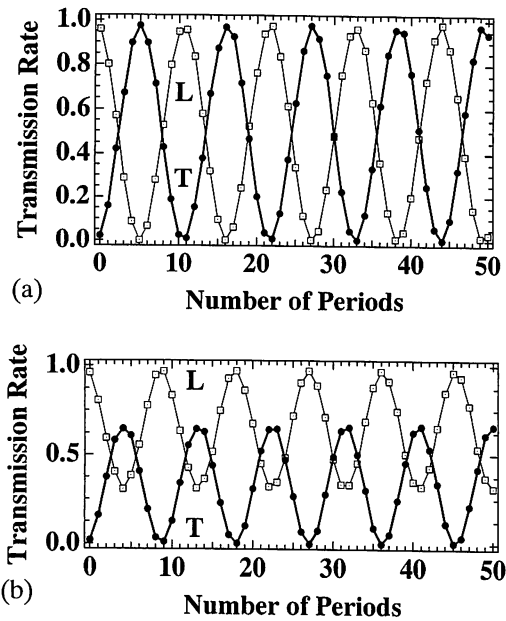


図 9 フォノンの伝搬距離に対する透過率の振動の様子を示す。(a) 共鳴透過条件を満たす周波数 $\nu_1 = 812\text{GHz}$ での振動。(b) 共鳴透過条件を満たす周波数から少しずれた周波数 760GHz での振動。

図 9 (a) に, このフォノンの透過率の振動の様子を示す。共鳴透過条件が成立すると ($\nu = \nu_1 = 812\text{GHz}$) 振動の幅は, ほぼ 0 から 1 と大きな値をもつ。図 9 (b) に示したように, 共鳴周波数より多少ずれた周波数 ($\nu = 760\text{GHz}$) では, 振幅が小さくなる。なお, 共鳴透過条件が成立する周波数 (ν_1) から大きく離れた周波数 (たとえば, 100GHz 程度) ではこのような振動は生じない。

共鳴透過条件での透過率の振動の空間的周期は、透過の構造因子より導出可能である。いま、単位構造数 n が小さいとすると、式(1)より、

$$|S_T|^2 \simeq |t_{BA} + t_{AB} e^{i\phi^{(B)}}|^2 n^2, \quad (11)$$

となる。一方透過率の変化が $\sin^2$ で変化すると仮定すると、 n が小さな場合

$$\sin^2(\pi n/n_0) \simeq (\pi n/n_0)^2, \quad (12)$$

と近似できる。上記の式(11)と(12)式を等しいとおくことより、振動の周期 n_0 が次のように与えられる。

$$n_0 \simeq \frac{\pi}{|t_{BA} + t_{AB} e^{i\phi^{(B)}}|}. \quad (13)$$

数値計算ではこの値が約11となり、図の振動から読み取れる振動周期とよく一致する。また、単位構造 AB が5個で L と T のモードのエネルギーが入れ替わることも、これより理解できる。ただし、この振動周期は短く、各モードの透過率が単位構造数に鋭敏に依存するため、超格子をモードの変換器として応用する際には欠点と成り得る。

4 等方的非周期超格子

超格子をフォノンのモード変換器として応用することに着目して以降議論する。この応用のために適切と考えられるのが非周期的超格子である⁶。その構造を図10(a)に示す。この超格子ではフォノンが伝搬する方向に、単位構造 (bilayer) の層厚を ΔD で示すわずかな値ずつ増加するように積層する。前節で考察した「共鳴透過条件」を満たす単位構造を超格子の中央に置くものとする。

フォノンが各単位構造を透過して行く際に、ストップバンドをもつ単位構造が現われないようにこの層厚を変えて行けば、反射が無視可能となる。

後の解析の為に、図10(b)にあるように、隣り合う単位構造間の関係を表わす行列 $F^{<n>}$ を用いて、透過振幅に対する差分方程式を定義しておく。

$$a_{T,n+1} = F_{11}^{<n>} a_{T,n} + F_{12}^{<n>} a_{L,n}, \quad (14)$$

$$a_{L,n+1} = F_{21}^{<n>} a_{T,n} + F_{22}^{<n>} a_{L,n}. \quad (15)$$

ここで、 $a_{T,n}$ と $a_{L,n}$ は、それぞれ基盤より n 番目の単位構造までに透過した T モードと L モードの透過フォノンの振幅である。上付の添字 $<n>$ は、超格子中 n 番目の単位構造 (bilayer) に対す

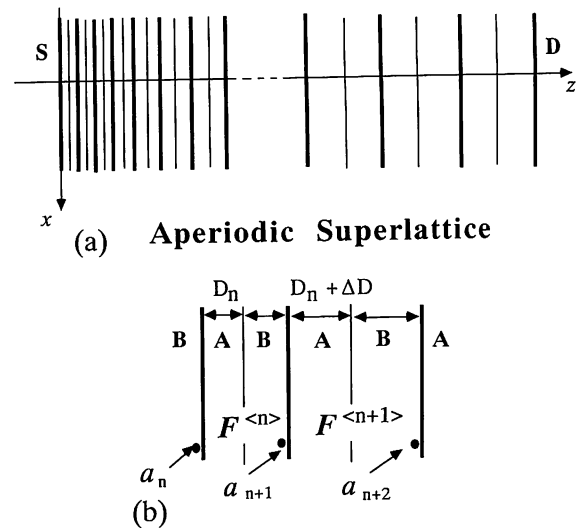
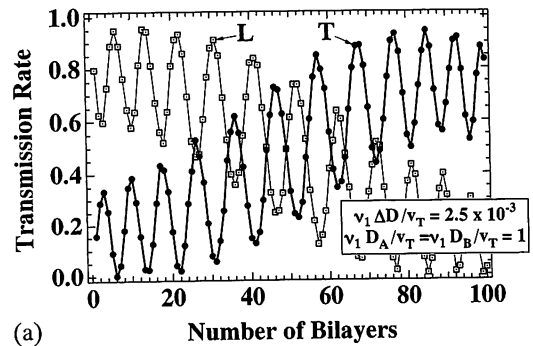
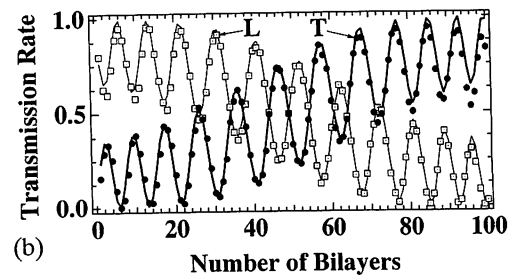


図10：(a) 等方的媒質層をもつ非周期超格子の構造を示す。単位構造中の各層を次第に厚くなるように積層する。この超格子の中央で、共鳴透過条件が満たされるようにする。(b) n 番目の単位構造中にある一つの層の厚さを D_n で示すと、次の層の厚さは $D_n + \Delta D$ と表わされる。ここで、 ΔD は D_n に対して充分に小さくとり、一つの単位構造のまわりで超格子を見るとほぼ周期的となる。



(a) Number of Bilayers



(b) Number of Bilayers

図11：(a) フォノンが透過した単位構造数と透過率との関係を図示する。 $v_1 \Delta D / v_T = 2.46 \times 10^{-3}$ とパラメータを設定してある。 v_T は層 B 内の T モードフォノンの速度である。 v_1 は中央の層での共鳴透過周波数である。また、超格子の中央では、 $v_1 \Delta D / v_T = 0.984$ である。(b) 2×2 の転送行列で得られた透過率を実線で示す。点は、 4×4 の転送行列で算出した図(a)の値と同じである。

る値を示す。以下でも同様である。ここで、反射フォノンは無いとして無視している。非周期的超格子では、これは一般的な差分方程式になるが、周期的超格子の場合には、定数係数の差分方程式になり、厳密解を求めるのは容易に可能となる。

図11(a)に、上記の超格子に於ける各フォノンモードの透過率の様子を示す。モードの変換が強められていることが見て取れる。以降、これを「共鳴的モード変換」と呼ぶ。図(b)は、本節で導入した差分方程式の数値解であり、共鳴的モード変換を十分な精度で表現できることが分かる。

差分方程式(14)と(15)の非周期超格子に対する解を初等関数を用いて表わすことは不可能であるため、近似解を与える。この詳細な導出方法は省略するが、結果は次のとおりである。

$$|a_{T,n}|^2 = A \left| \prod_{k=1}^n \rho_1^{<k>} - \prod_{k=1}^n \rho_2^{<k>} \right|^2, \quad (16)$$

$$A = \frac{|F_{12}^{<1>}|^2}{|\rho_1^{<1>} - \rho_2^{<1>}|^2}, \quad (17)$$

ここで、

$$\left. \begin{matrix} \rho_1^{<k>} \\ \rho_2^{<k>} \end{matrix} \right\} = \varepsilon_k \pm (\varepsilon_k^2 - e^{i\beta})^{1/2}. \quad (18)$$

また、

$$\varepsilon_n \approx \frac{1}{2} \text{tr}[F^{<n>}] / (\det[F^{<n>}])^{1/2},$$

であり、 β は ΔD に比例する小さな実数である(詳細は文献を参照⁶)。これより、 $|\rho_1^{<k>} \rho_2^{<k>}| \simeq 1$ であることを用いて、透過率の局所的な振動周期は次のように表わせる。

$$n_0 = \frac{2\pi}{|\arg(\rho_1^{<n>}) - \arg(\rho_2^{<n>})|} = \frac{\pi}{\cos^{-1}|\varepsilon_n|}. \quad (19)$$

図12に近似解の単位構造数に対する透過率の変化の様子を示す。共鳴的モード変換をある程度表現する事ができるが、残念ながら超格子の中央では十分な精度とは言い難い。ただし、局所的な振動周期はよく一致する。ここで注目すべきは、式(17)で表わされる透過率の振動振幅 A は $L-T$ モード間の相互作用の大きさ F_{12} に依存している点である。振動を抑えた共鳴的モード変換を可能にするには、入射角を垂直入射に近づけて、相互作用 F_{12} を小さくすればよいことが解る。この場合の共鳴的モード変換を図13に示した。 L モードの入射角を 25.4° と小さくしている。

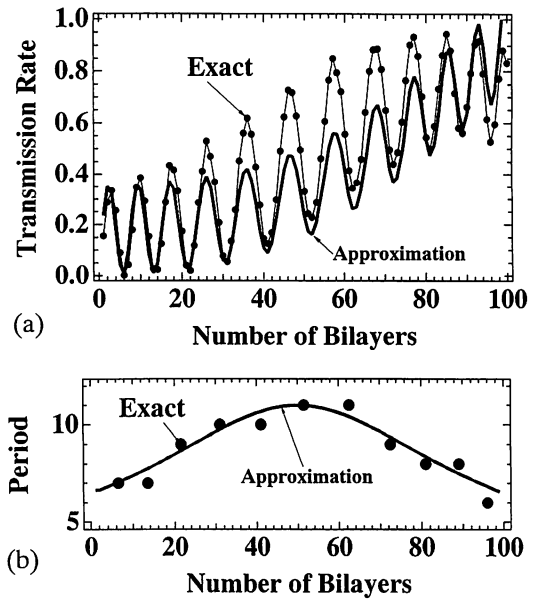


図12：(a)入射フォノンのモードを L とし、モード変換をうけて T モードになる透過率を示している。条件は図11と同じである。点と細線で図11の T モードへの透過率を示してある。太い線が、式(16)から得られる近似解の T モードへの透過率を示す。(b) T モードへの透過率での振動周期を示す。点が 4×4 の転送行列で得た値を示し、実線で式(19)から得られる近似解の振動周期を表わす。

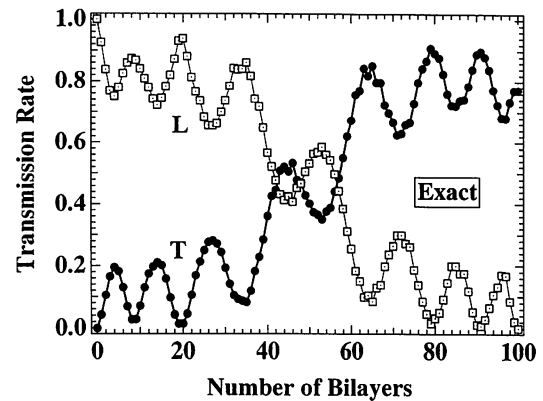


図13：フォノンのモード L と T 間の相互作用を小さくするため、 L モードのフォノンの入射角を図11の場合より小さな 25.4° として、垂直入射に近づけた場合の透過率の変化を示す。振動が抑えられ、モード変換の効率が良くなっている。

透過率の振動はモード間の相互作用によって生じることが上記の議論で明らかとなった。一方、共鳴的モード変換自体が生じる機構は、図14に示すように、共鳴透過条件を満たす分散関係の分枝を入射フォノンが断熱的に辿ることによって生じる。これは、層厚 D が薄いと分散関係の分枝は高周波数側にずれ、逆に D が厚いと分散関係の

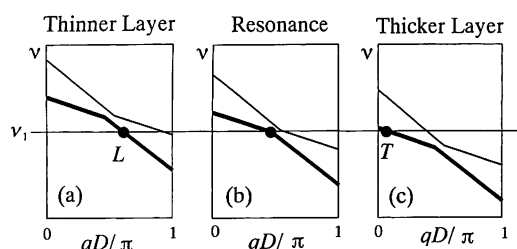


図14：層厚 D の変化に対する分散関係の分枝のずれを示す。(a) D が薄い場合。(b) D が共鳴透過条件を満たす場合。(c) D が厚い場合。

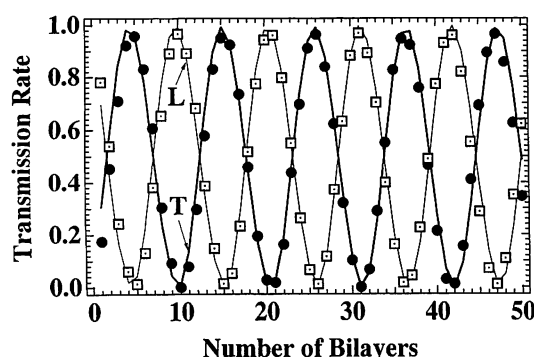


図15：周期的な超格子での透過率を示す。点と正方形の印は、図9(a)の値を示す。実線が差分方程式の解から得られる透過率である。両者は十分な精度で一致している。

分枝は低周波数側にずれることに起因している。 L モードのフォノンが一定の周波数で超格子の層厚 D が薄い部分から入射して、 D が厚い部分に透過して行くに従い、分枝を L -like から T -like に辿ってゆく。これによって、共鳴のモード変換が生じる。

なお、周期的超格子では差分方程式の厳密解が得られ、十分な精度を持つ。解くべき差分方程式は、式(14)と(15)を書き換えて

$$a_{T,n+2} - \text{tr}[F]a_{T,n+1} + \det[F]a_{T,n} = 0 \quad (20)$$

となる。このとき、超格子の周期性により F は n に依存しなくなる。基盤より L モードを入射したとき、 T モードの振幅の増加は、式(20)の定数係数差分方程式を解いて、次のようになる。

$$|a_{T,n}|^2 = \frac{|F_{12}|^2}{\sin^2(\pi/n_0)} \sin^2(n\pi/n_0). \quad (21)$$

この解の数値計算を図15に与える。これより、周期超格子での透過率の振動の様子が差分方程式で表現でき、十分な精度をもつことが分かる。式(21)

より分かるように、この場合の振動の振幅も相互作用 F_{12} の大きさによって決まることが見て取れる。

5 モード変換の検証実験

この節では、上述した周期超格子と非周期超格子でのモード変換を実験で検出するための具体例を提案する。これには、X線におけるペンデル縞の観測と同様の実験が参考になる。界面に対して鋭角に超格子を切断し、くさび型の試料とし、界面に平面波フォノンを斜方入射する実験を考える。

周期超格子では、基盤(substrate)と超格子(superlattice)を図16のように楔型に加工する。基盤に置いたトランスデューサーから L モードのフォノン(平面波)を超格子の界面に斜方入射させる。このとき、超格子の界面を多く透過したフォノンほどモード変換を強く受ける。ゆえに、図の超格子下方の切断面を左から右に辿ると面の振動方向が回転してゆく。この切断面を液体中に置くと、振動の液体に対するせん断成分は除去され、圧力成分のみが液体中に透過する。液体中でこの圧力を検出すると、切断面に沿って圧力強度の振動が見られる。(図の下に描いた円は、その大きで液体中の圧力の大きさを示している。)

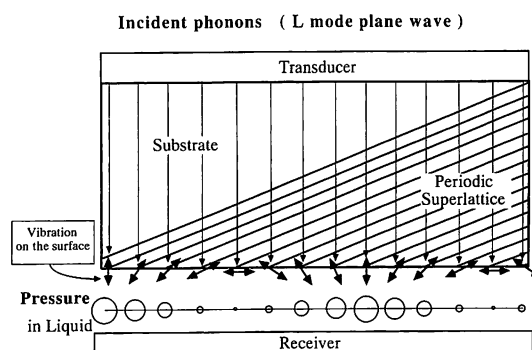


図16：等方的媒質層よりなる周期超格子での共鳴透過の検出例。

非周期超格子の場合にも同様の加工を基盤と超格子に行い、超格子の切断面を液体に置く。図17のように L モードのフォノンを入射して切断面に沿っての液体の圧力を測定すると、圧力の多少の振動は存在するであろうが、図の左から右に辿るに従って圧力強度が次第に弱くなる。

なお、両超格子ともに界面から発生する T モードと L モードの伝搬方向が異なるため、実験に於いては入射するフォノンを界面に可能な限り垂

直に近づける必要がある。入射角が大きな場合には、さらに正確な理論的解析が必要である。

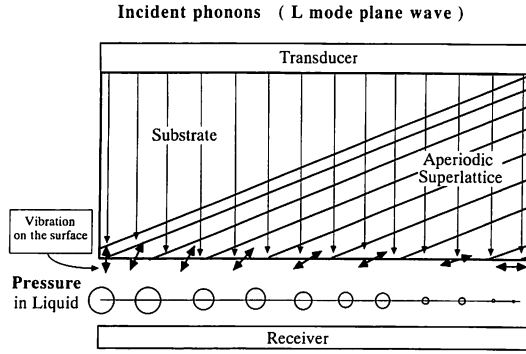


図17 等方的媒質層よりなる非周期超格子での共鳴的モード変換の検出例。

6 (111)超格子での分散関係

以上の議論では、周期および非周期の超格子ともに、その構成層を等方的としている。この節では、層が異方性をもつ超格子の分散関係が示す特徴を考察する。特に、鏡面对称性を持たない界面を議論する⁷。このために、図18に示したように異方的媒質よりなる層で界面を(111)面とする超格子を考察する。超格子の構造は、層BがGaAsの結晶で基盤(S)と同じ媒質とし、層AがAlAsの結晶でフォノンの検出層(D)と同じ媒質とする。考察するフォノンはSHモードで、変位はy成分のみもつ。

図19にこの(111)超格子でのSHモードの分散関係を示す。図(a)がフォノンを界面に垂直入射した場合で、ブラッグ反射が生じるストップバンドは分散関係のミニゾーン中央か端に現れる。一方、図(b)が[111]から[110]方向に20°傾けた斜方入射の分散関係である。ここで、横軸 q は波数の界面に垂直な成分である。斜方入射では、ストップバンドが分散関係のミニゾーン中央または端以外に現れることが分かる。このシフトする波数 q_B は、ブラッグ反射の周波数と入射角の関数として得られる。

$$q_B D = \frac{1}{2i} \log(\det[T]) + \pi m \quad (22)$$

$$= L(\nu_B, \phi_{inc}; m) \quad (23)$$

ここで、 T は、SHモードのフォノンに対する転送行列と呼ばれるものであり、 2×2 の行列である。また、 m は q_B がミニゾーン内に還元表示

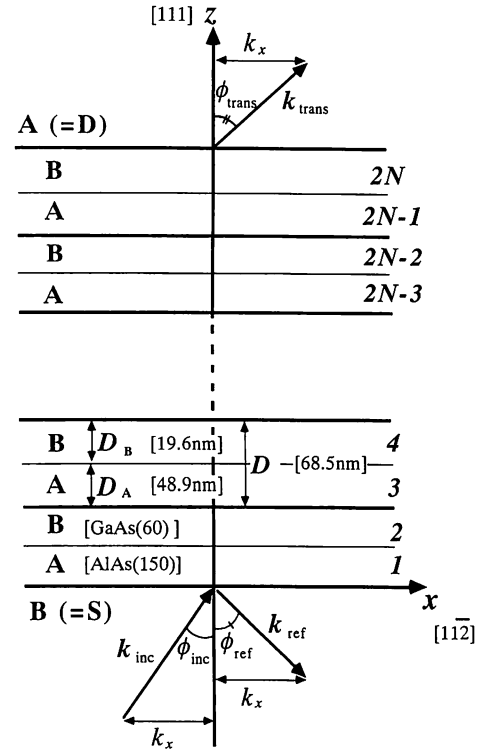


図18 異方的媒質層よりなる周期超格子の構造を示す。単位構造は、GaAsの60単一層とAlAsの150単一層からなる。その厚さは、それぞれ、 $D_B = 60 \times 0.326 \text{ nm}$ 、 $D_A = 150 \times 0.326 \text{ nm}$ となる。ゆえに、単位構造の厚さは $D = D_A + D_B = 68.5 \text{ nm}$ である。基盤はGaAsよりなる。各界面からは、入射フォノンの一部が反射される。透過したフォノンは、検出層に現われるが、ここで全ての透過波のエネルギーが吸収されるとし、検出層では反射波が存在しないと仮定する。

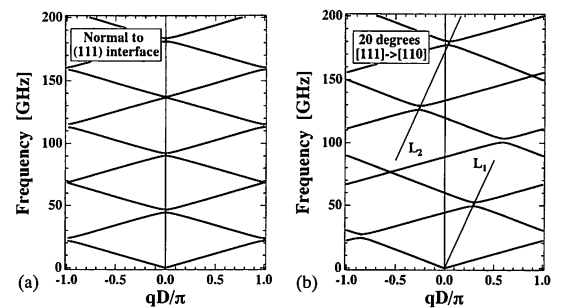


図19 異方的媒質層よりなる周期超格子でのSHモードに対する分散関係を示す。(a)界面に対して垂直入射した場合。(b)界面に垂直な[111]より[110]方向に20°で斜方入射した場合。直線 L_1 、 L_2 は式(23)で与えられる。

できるようにする整数であり、 ν_B はブラッグ反射が生じる周波数、 ϕ_{inc} は基盤からのSHフォノンの入射角である。関数 L は ν_B に比例する。なお、ストップバンドのシフトは波数のみでなく、

周波数にも現われている。これは、垂直入射のときの波数は界面に平行な成分をもたないが、斜方入射では図に示した界面に垂直な波数 q 以外に界面に平行な波数成分も持つためである。この現象の検出は、Raman 散乱で可能と考えられる。

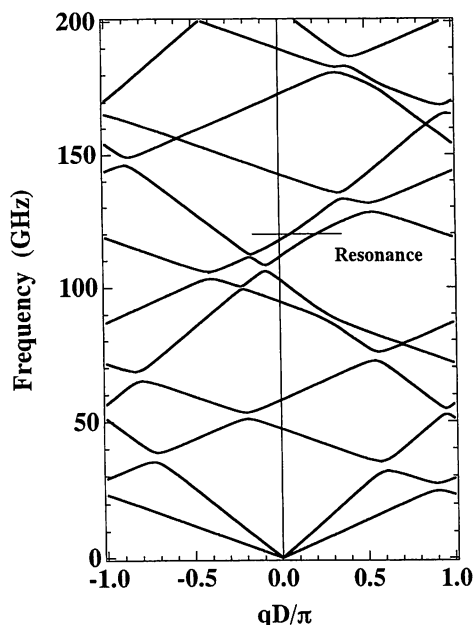


図20 異方的媒質層よりなる周期超格子における、モード L, T の分散関係を示す。入射角は、 $[111]$ より $[110]$ 方向に T モードで 20° 、 L モードで 34.2° としてある。図中に明記した横線で示す周波数で、等方的媒質層を持つ超格子と同様な共鳴透過が生じる。

SH モードと独立に存在できる T と L モードに対する分散関係を上記の議論と同じ超格子で算出した結果も図20に示す。この際の T モードの入射角は SH モードと同じ 20° である。この場合でも、 SH モードと同様にミニゾーンの端や中央には、ストップバンドが現れない。しかし、図に横線で示した周波数で、ふたつのモードの分枝が同じ符号の傾きをもって交わる際に生じる分枝の跳びが現われる。この周波数では共鳴透過条件が満たされ、等方的な媒質の層をもつ超格子と同様に、共鳴透過現象が生じることを確認できる。

7 結 論

本研究では、超格子中のフォノンに対する「共鳴透過現象」と「共鳴的モード変換」の存在を明かにした。実験的検証は液体中に楔形に加工した超格子において、透過フォノンによる液体中の圧力変化を検出することで可能である。異

方的媒質よりなる層をもつ超格子では、斜方入射でストップバンドがミニゾーンの内部にシフトする。特に、 SH モードのフォノンでは、シフトする波数が転送行列で表現可能であり、Raman 散乱で確認できる。

超格子を受動フォノン光学素子として応用する一例に、平面波フォノンに対するモード変換器の作製が考えられる。さらに、本研究の興味深い点として、フォノンの波束を超格子に入射したとき、 T と L モードの波束は超格子を伝搬し、検出層に達すると分離して現れることが予想できる。この特徴を用いれば、フォノンのモードを T - L 間で変換するデバイス（波束として扱えるフォノンに対するモード変換器）以外に、フォノンのモード T と L を分離するデバイス（モード・セレクター）が作成可能である。超格子のフォノンに対する周波数フィルターとしての性質を組み合わせると、単一モードで特定の周波数のフォノンを抽出することも可能であろう。

一方、半導体である CdS 等の結晶に電場をかけると、電子のドリフト速度が音速に達する電場以上では電流が飽和する。これと同時に電子・フォノン相互作用によりフォノンが励起される。このフォノンによって結晶内の電子に対するポテンシャルが変形し、その谷に電子が集められる。フォノンの伝搬速度よりも電子のドリフト速度が大きくなると、電子はポテンシャルの壁にぶつかりエネルギーをフォノンに与えて、フォノンの強度を強める結果となる。これはマイクロ波に対する進行波管と同じ原理に基づくフォノンに対する進行波増幅である。L. Esaki 等が半導体ヘテロ接合超格子の概念を発表した当初より電子の散乱により電子のドリフト速度の飽和が議論されており、この超格子に於いても進行波増幅器の機能が存在する可能性がある。このとき、本論文で明かにした共鳴透過条件をフォノンが満たすように超格子を設計すると、特定のモードのみを取り出すフォノン発振器を実現できる。

なお、本研究においてフォノンを平面波として扱った。実験等においてこの結論で示した現象を正確に検証するには、フォノンを波束として扱い、理論を整備し実験と対比することが必要である。さらに、フォノンの伝搬を時間的に考察する際には、波束の群速度を考慮しなければならない。これらは、本研究をさらに展開してゆく際の重要な課題である。

付録：三層構造を透過するフォノンと二重障壁を透過する電子の透過率の類似性

弾性媒質中を伝搬するフォノンと障壁を透過する電子のあいだには、波動として密接な関連が存在する。以降においてはフォノンの性質の理解を助けるために、まず波動としてのフォノンと電子の対応のようすを示した後、フォノンが三重層よりなる媒質を透過する場合と電子が二重障壁を透過する場合の各透過率を算出する過程を示すことで、これらの関連を明らかにする。結びにおいては、電子の WKB 近似による二重障壁の透過や単一ポテンシャル井戸の透過にも論及し、フォノンとの関連をさらに明確にする。

8 フォノンの基礎方程式

弾性媒質中を伝搬するフォノン(弾性波動)に対する運動方程式は次のように表わせる。

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \mathbf{T}.$$

ここで、 ρ は媒質の質量密度、 $\mathbf{u}$ は媒質の変位である。 $\mathbf{T}$ は応力テンソルであり、媒質の弾性定数と変位 $\mathbf{u}$ を用いて算出される。いま、フォノンが平面波であるとし、 z 軸に沿って伝搬する横波と仮定する。媒質は立方晶よりなりその[001]方向を z 軸方向と置くか、または媒質は等方的とする。このとき、上記の運動方程式は次の様に變形される。

$$\frac{\partial^2 u(z)}{\partial z^2} + \frac{\rho \omega^2}{c_{44}} u(z) = 0. \quad (24)$$

ここで、 $u(z)$ は z 軸に垂直に偏極する変位を示し、 ω は平面波の角振動数である。また c_{44} は媒質の弾性定数である。式(24)に於いて、 $k^2 \equiv \rho \omega^2 / c_{44}$ とすると、変位 $u(z)$ は次のように表現できる。

$$u(z) = A e^{ikz} + B e^{-ikz}. \quad (25)$$

ここで、 A と B は平面波の振幅である。この変位によって媒質中に生じる z 軸に垂直なせん断応力成分 $\sigma(z)$ を求めると

$$\sigma(z) = c_{44} \frac{\partial u(z)}{\partial z} \quad (26)$$

となる。

フォノンが z 軸に垂直な界面で反射、または透過する場合を考えると、式(25)および式(26)で定義される変位と応力が界面で連続になる必要がある。境界が $z=0$ の点にあるとき、この境界条件は次の様に表現できる。

$$u(z)|_{z=-0} = u(z)|_{z=+0}, \quad (27)$$

$$\sigma(z)|_{z=-0} = \sigma(z)|_{z=+0}. \quad (28)$$

これらの境界条件を考察するとき、下記の関数を定義すると、議論を容易にできる。

$$\Psi_p(z) = M_p \Phi_p(z) \mathbf{W}_p, \quad (29)$$

ここで、

$$M_p = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik c_{44} & -ik c_{44} \end{bmatrix}, \quad (30)$$

$$\Phi_p(z) = \begin{bmatrix} e^{ikz} & 0 \\ 0 & e^{-ikz} \end{bmatrix}, \quad (31)$$

$$\mathbf{W}_p = \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}, \quad (32)$$

と定義した。式(31)は、フォノンが伝搬してゆく際の位相の変化を示す。式(32)は、平面波の $z=0$ における位相を含んだ振幅からなるベクトルを表わしている。これを用いると、境界条件である式(27)と式(28)は次のようになる。

$$\Psi_p(-0) = \Psi_p(+0). \quad (33)$$

9 電子の基礎方程式

電子の一次元の波動方程式は、

$$\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \phi(x) = 0. \quad (34)$$

ここで、座標を x としており、 $\phi(x)$ は波動関数である。 E はエネルギー、 V はポテンシャルである。式(34)に於いて $\hbar k = \sqrt{2m(E-V)}$ とおくと、波動関数は次のようになる。

$$\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}. \quad (35)$$

ここで、 $(E-V) > 0$ と仮定している。 $(E-V) < 0$

の際には、 k は虚数 ik とし、 $\hbar\kappa = \sqrt{2m(V-E)}$ と定義しておく。この波動関数を用いて、運動量 $p(x)$ を求めると次のようになる。

$$p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi(x)}{\partial x}. \quad (36)$$

電子に対するポテンシャル V が $x=0$ で不連続的に変化すると仮定する。この際の境界条件は、式(35)と式(36)で表わされる波動関数と運動量が連続する条件であり、次のようになる。

$$\phi(x)|_{x=-0} = \phi(x)|_{x=+0}, \quad (37)$$

$$p(x)|_{x=-0} = p(x)|_{x=+0}. \quad (38)$$

これらの条件を用いるとき、フォノンと同様に以下の関数を定義しておくことが容易に議論しやすい。

$$\Psi_e(x) = M_e \Phi_e(x) \mathbf{W}_e, \quad (39)$$

ここで、

$$M_e = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix}, \quad (40)$$

$$\Phi_e(x) = \begin{bmatrix} e^{ikx} & 0 \\ 0 & e^{-ikx} \end{bmatrix}, \quad (41)$$

$$\mathbf{W}_e = \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}, \quad (42)$$

と定義した。式(40)においては運動量の連続に関する第2行目の虚数単位 i は不要であるが、フォノンの場合との対応が明確になるように表現に i を残してある。式(41)は、電子が伝搬するときの位相の変化を示す。式(42)は、電子の $x=0$ における位相を含んだ振幅を表わしている。これを用いると、境界条件である式(37)と式(38)は次のようになる。

$$\Psi_e(-0) = \Psi_e(+0). \quad (43)$$

以上の議論は、前節におけるフォノンの場合と明らかな対応関係がある。フォノンの場合の式(24)から(33)は、本節での電子の場合の式(34)から(43)までとそれぞれ互いに対応している。明らかな違いは式(30)と式(40)における波数の係数のみである。ただし、具体的な問題を考察する際には、フォノンの波数は常に実数であるが、電子の波数は虚数となる場合があるので、二つの問題が直接的な対応のつくものばかりで無いことに注意すべきである。

10 三重構造を透過するフォノンの透過率

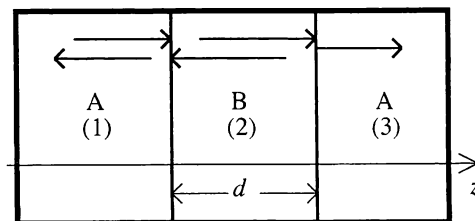


図21 三重構造を透過するフォノン

媒質 A と B が図21に示す三重構造 (ABA) をもつ場合、図の左側の媒質 A から中央の媒質 B を透過して右側の媒質 A に透過するフォノンの透過率を算出する。各領域を左側から 1, 2, 3 の番号を付して区別する。式(29)を用いて各領域の界面での境界条件を表現すれば

$$\Psi_p^{(1)}(-0) = \Psi_p^{(2)}(+0), \quad (44)$$

$$\Psi_p^{(2)}(d-0) = \Psi_p^{(3)}(+0), \quad (45)$$

となる。ここで、 d は中央の媒質 B (領域 2) の厚さを示す。上付の添字 (j) は領域を区別するものであるが、混乱のないときには、その領域の媒質を示す A または B を添字として用いることとする。式(45)において右辺の $\Psi_p^{(3)}(+0)$ の座標が $+0$ となっているのは、領域 3 の座標の原点を領域 3 と 2 の境界に置いているためである。これは、領域 3 での振幅に領域 2 の厚さ d による位相の定数を含ませることを意味する。つまり、媒質 A での波数を k_A とし、領域 1 と 2 の界面に z の原点を置くと領域 3 での変位 $u_3(z)$ は

$$u_3(z) = A_3 e^{ik_A z} + B_3 e^{-ik_A z}$$

となる。このとき、境界が $z = d$ にあることを明記して書き直すと

$$u_3(z) = A_{03} e^{ik_A(z-d)} + B_{03} e^{-ik_A(z-d)}$$

となる。つまり、各振幅は $A_3 \equiv A_{03} e^{-ik_A d}$ および $B_3 \equiv B_{03} e^{ik_A d}$ と書き直している。 A_{03} と B_{03} は領域 3 と 2 との界面 (境界) での振幅である。ここで、 z の原点を $z = d$ に置き直した表現を式(45)の右辺で用いている。

このように振幅を扱うのは、物理的には本質的でない $z = 0$ での振幅である A_3 や B_3 を用いて議論し、物理的に意味のない振幅の因子を計算中に

現われ無いようにする為である。

式(32)で定義したフォノンの振幅からなるベクトルに対応させて、左側の媒質 A で媒質 B に入射しようとするフォノンの振幅を $\mathbf{W}_p^{(1)}$ と表わし、媒質 B を透過して右側の媒質 A に現われたフォノンの振幅を $\mathbf{W}_p^{(3)}$ とすると、これらのベクトル間には式(44)と式(45)より次の関係が成立する。

$$\mathbf{W}_p^{(3)} = F \mathbf{W}_p^{(1)}, \quad (46)$$

$$F = f^{(BA)} \Phi_p^{(B)}(d) f^{(AB)}. \quad (47)$$

これを成分で表示するとき、

$$\begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (48)$$

とする。ここで、 A_3 は A_{03} 、 B_3 は B_{03} と記すべきものであるが、振幅は境界での値を用いることとして特に添字 0 を明記しない。以降の議論でも、振幅をこれと同様に扱う。

媒質 A から B へのフォノン透過と反射に関する振幅透過反射係数 $f^{(AB)}$ は、式(30)に示した行列を用いて次のように表現できる。

$$f^{(AB)} = [M_p^{(B)}]^{-1} M_p^{(A)}, \quad (49)$$

ここで、 $j = A, B$ として

$$M_p^{(j)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ iZ_j\omega & -iZ_j\omega \end{bmatrix}, \quad (50)$$

と定義し直す。 Z_j は、媒質 j での音響インピーダンスと呼ばれるもので、次のように定義される。

$$Z_j = \rho_j v_j. \quad (51)$$

ここで、 ρ_j は媒質 j の密度、 $c_{44}^{(j)}$ を媒質 j の弾性定数とする。 $v_j = \sqrt{c_{44}^{(j)}/\rho_j}$ は媒質 j 内部を伝搬するフォノンの位相速度である。単純な計算により、

$$f^{(AB)} = \frac{1}{2Z_B} \begin{bmatrix} Z_B + Z_A & Z_B - Z_A \\ Z_B - Z_A & Z_B + Z_A \end{bmatrix} \quad (52)$$

となる。同様に媒質 B から A へのフォノン透過と反射に関する振幅透過反射係数 $f^{(BA)}$ は次のように算出される。

$$f^{(BA)} = \frac{1}{2Z_A} \begin{bmatrix} Z_A + Z_B & Z_A - Z_B \\ Z_A - Z_B & Z_A + Z_B \end{bmatrix} \quad (53)$$

中央の媒質 B での位相の変化は、式(31)を用いて

$$\Phi_p^{(B)}(d) = \begin{bmatrix} e^{ik_B d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_B d} \end{bmatrix}, \quad (54)$$

と表現できる。ここで、 k_B は媒質 B でのフォノンの波数、 d は媒質 B の厚さを表わす。この行列 $\Phi_p^{(B)}(d)$ は、中央の媒質 B 内部でのフォノンが左側の媒質 A から入射し距離 d だけ伝搬して右側の媒質 A に透過しようとするときの境界条件である式(45)を考慮するとき必要となる。

上述の議論より 2 行 2 列の行列 F を算出すると、その成分は次のようになる。

$$F_{11} = \cos k_B d + \frac{i}{2} \left(\frac{Z_A}{Z_B} + \frac{Z_B}{Z_A} \right) \sin k_B d. \quad (55)$$

$$F_{22} = \cos k_B d - \frac{i}{2} \left(\frac{Z_A}{Z_B} + \frac{Z_B}{Z_A} \right) \sin k_B d. \quad (56)$$

$$F_{12} = -\frac{i}{2} \left(\frac{Z_A}{Z_B} - \frac{Z_B}{Z_A} \right) \sin k_B d. \quad (57)$$

$$F_{21} = \frac{i}{2} \left(\frac{Z_A}{Z_B} - \frac{Z_B}{Z_A} \right) \sin k_B d. \quad (58)$$

以上の表現より、 $\det[F] = 1$ が成立していることがわかる。右側の媒質 A では、フォノンの反射が無いと考える。つまり、式(48)において $B_3 = 0$ 。これより行列 F を用いて、フォノンの透過率 T_p を次のように求めることができる。

$$T_p = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{\det[F]}{F_{22}} \right|^2 \quad (59)$$

$$= \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{Z_A}{Z_B} - \frac{Z_B}{Z_A} \right)^2 \sin^2 k_B d \right]^{-1}. \quad (60)$$

この表現より、 n を整数として

$$k_B d = \pi n \quad (61)$$

の条件が成立すると $T_p = 1$ となり、入射したフォノンが全て媒質 B を透過することが分かる。

11 二重障壁を透過する電子の透過率

図22に示す二重障壁をもつ空間の左側から右側に入射する電子を考察する。ポテンシャルが一定である各領域を左から右に番号1から5で示す。領域2および4の幅を a とし、ここでの電子のエネルギー E はポテンシャル V より小さい値とする。つまり、 $(E-V) < 0$ とし、式(35)にある波数 k は虚数 $i\kappa$ とおく。領域3の幅を b とし、この領域でのポテンシャルは零であり、 $E > 0$ とする。

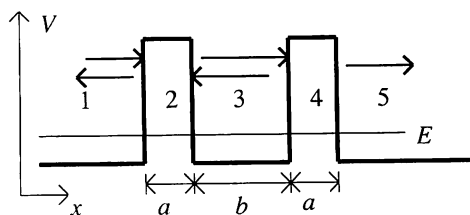


図22 二重障壁を透過する電子

式(39)で定義した関数を用いて、各領域の境界での境界条件を表現すると次のようになる。

$$\Psi_e^{(1)}(-0) = \Psi_e^{(2)}(+0), \quad (62)$$

$$\Psi_e^{(2)}(a-0) = \Psi_e^{(3)}(+0), \quad (63)$$

$$\Psi_e^{(3)}(b-0) = \Psi_e^{(4)}(+0), \quad (64)$$

$$\Psi_e^{(4)}(a-0) = \Psi_e^{(5)}(+0). \quad (65)$$

上付き添字(j)は領域を区別するためのものである。また、上記の境界条件で、右辺の座標が+0となっているのは、各領域の座標の原点をフォノンの場合の式(45)と同様に扱っているためである。領域1から2に入射しようとする波動の振幅を式(42)と対応させて $\mathbf{W}_e^{(1)}$ とし、領域4から5に現われた振幅を $\mathbf{W}_e^{(5)}$ とおく。以上より、これらの振幅には次の関係が成立することがわかる。

$$\mathbf{W}_e^{(5)} = \mathbf{Q} \mathbf{W}_e^{(1)}, \quad (66)$$

ここで、

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G} \Phi_e^{(3)}(b) \mathbf{G}, \quad (67)$$

$$\mathbf{G} = [\mathbf{M}_e^{(1)}]^{-1} \mathbf{M}_e^{(2)} \Phi_e^{(2)}(a) [\mathbf{M}_e^{(2)}]^{-1} \mathbf{M}_e^{(1)}, \quad (68)$$

と定義した。ただし、領域1, 3, 5での各行列の表現が同じものとなることを用いた。領域2, 4に対しても同様である。式(68)中の表現に現われる行列は、次のように定義したものである。

$$\mathbf{M}_e^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i\kappa & i\kappa \end{bmatrix}, \quad (69)$$

$$\mathbf{M}_e^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\kappa & \kappa \end{bmatrix}, \quad (70)$$

$$\Phi_e^{(2)}(a) = \begin{bmatrix} e^{-\kappa a} & 0 \\ 0 & e^{\kappa a} \end{bmatrix}. \quad (71)$$

以上より、 $\mathbf{G}$ の各成分を算出すると次のようになる。

$$G_{11} = \cosh \kappa a - \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \sinh \kappa a, \quad (72)$$

$$G_{22} = \cosh \kappa a + \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \sinh \kappa a, \quad (73)$$

$$G_{12} = -\frac{i}{2} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right) \sinh \kappa a, \quad (74)$$

$$G_{21} = \frac{i}{2} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right) \sinh \kappa a. \quad (75)$$

行列 $\mathbf{G}$ は、実数 μ と λ を用いて次のようにも表現可能である。

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} e^{-i\mu} \cosh \lambda & -i \sinh \lambda \\ i \sinh \lambda & e^{i\mu} \cosh \lambda \end{bmatrix}. \quad (76)$$

ここで、

$$\mu = \tan^{-1} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \tanh \kappa a \right], \quad (77)$$

$$\sinh \lambda = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right) \sinh \kappa a, \quad (78)$$

または、

$$\cosh^2 \lambda = \cosh^2 \kappa a + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)^2 \sinh^2 \kappa a \quad (79)$$

と定義する。なお、 $\det[\mathbf{G}] = 1$ であることが式(76)の表現を見て容易にわかる。この2行2列の行列 $\mathbf{G}$ で、電子がひとつのポテンシャル障壁をトンネリングする確率 T_t を算出することができる。参考のために明記すれば、

$$T_t = \left| \frac{\mathbf{A}_3}{\mathbf{A}_1} \right|^2 = \left| \frac{\det[\mathbf{G}]}{G_{22}} \right|^2 = \frac{1}{\cosh^2 \lambda} \quad (80)$$

$$= \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right)^2 \sinh^2 \kappa a \right]^{-2} \quad (81)$$

となる。領域2では、 $(E-V) < 0$ であり $\kappa > 0$ としているため、 $T_t < 1$ が常に成立する。つまり、単一障壁の場合での電子の透過では、必ず反射が

生じることがわかり、電子が完全に透過することはない。

式(67)の表現に現われる行列 $\Phi_e^{(3)}(b)$ は次のように表わされる。

$$\Phi_e^{(3)}(b) = \begin{bmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{bmatrix}. \quad (82)$$

これより、式(67)で定義される行列 Q も行列式を求めると行列 G と同様に、 $\det[Q]=1$ となることが直ちにわかる。 Q の各成分の具体的な表現を算出すると

$$Q_{11} = e^{-i\mu} \{ \cosh 2\lambda \cos(\mu - kb) - i \sin(\mu - kb) \}, \quad (83)$$

$$Q_{22} = e^{i\mu} \{ \cosh 2\lambda \cos(\mu - kb) + i \sin(\mu - kb) \}, \quad (84)$$

$$Q_{12} = -i \sinh 2\lambda \cos(\mu - kb), \quad (85)$$

$$Q_{21} = i \sinh 2\lambda \cos(\mu - kb), \quad (86)$$

となる。

以上の計算を基に、電子が領域 1 から 5 に透過する透過率 T_e を算出する。式(66)で、領域 5 の反射波が存在しないとすると

$$T_e = \frac{|A_5|^2}{|A_1|^2} = \frac{|\det[Q]|^2}{|Q_{22}|^2} \quad (87)$$

となる。ここで、 $\det[Q]=1$ および式(84)を用いれば、

$$T_e = [1 + \sin^2 2\lambda \cos^2(\mu - kb)]^{-1} \quad (88)$$

$$= \left[1 + \frac{1}{4} (e^{2\lambda} - e^{-2\lambda})^2 \cos^2(\mu - kb) \right]^{-1} \quad (89)$$

となる。さらに、 n を整数として

$$kb = \mu + \frac{\pi}{2} (2n - 1) \quad (90)$$

が成立すると $T_e = 1$ となり、電子は二重障壁を完全に透過することがわかる。(これは、単一障壁の場合には決して生じない現象である。) また、障壁の高さが電子のもつエネルギーより十分に大きな値のとき κ/k も大きな値となることがわかる。このとき、式(77)より、 $\mu \simeq \pi/2$ となるので、式(90)は

$$kb \simeq \pi n \quad (91)$$

となる。これは、フォノンの場合に生じる類似の現象の条件である式(61)と全く同様の条件となる。これより、フォノンの三重層の透過と電子の

二重障壁の透過に密接な対応が存在することが明らかとなった。

12 結 び

電子にたいする二重障壁を図23のように原点 $x=0$ で対称なポテンシャル $V(x)$ で扱い、障壁が高くて厚い場合に WKB 近似を用いて電子の透過率 T を算出すると次のようになることが知られている⁸。

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(4\Theta^2 - \frac{1}{4\Theta^2} \right)^2 \sin^2 \frac{1}{2} \left(\pi - \frac{J}{\hbar} \right) \right]^{-1} \quad (92)$$

ここで、

$$\Theta = \exp \left(\int_b^a \sqrt{2m(V(x) - E)} \frac{dx}{\hbar} \right), \quad (93)$$

$$J = 2 \int_{-b}^b \sqrt{2m(E - V(x))} dx \quad (94)$$

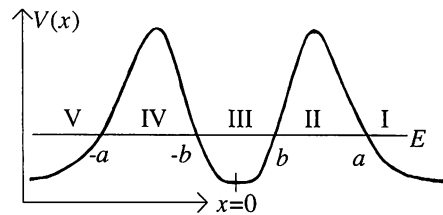


図23 一般的な二重障壁を透過する電子

と定義される。透過率 $T=1$ となる条件は、 n を整数として次のようになる。

$$\frac{J}{2\hbar} = \pi n + \frac{\pi}{2}. \quad (95)$$

これと対応する式(91)や式(61)と条件が $\pi/2$ ずれているのは、WKB 近似をする際にポテンシャル $V(x)$ が緩やかに変化すると仮定しているためである。

透過率 T_b , T_e , T の表現である式(60)および、式(89)、式(92)において、それぞれ Z_A/Z_B , $(e^\lambda)^2$, $(2\Theta)^2$ の対応が存在することも見て取れる。これらは、フォノンと電子の波動に対する境界または障壁の影響を表わす。また、これらの透過率が1になる条件は、各問題における中央の媒質あるいは障壁内の領域が、入射した波動に対して空洞共振器として作用する条件となっている。条件式(61)は、古典的な場合の空洞共振器の共振条件である。式(90)および式(95)は障壁にしみ出す波動関数による補正を考慮した空洞共振器の共振条件

と解釈できる。特に、条件式(90)で κ/k の値が大きくなるときに導かれる式(91)は、この波動関数のしみ出しを無視して、古典的な場合に近づけたものである。

なお、図24のように深さ $-V_0$ の一次元の井戸を透過する電子を考察すると、フォノンの場合の式(60)で表わされる透過率と同様の透過率が得られる。つまり、電子の波数が虚数となる領域が存在せず、透過率は

$$T_{well} = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_A}{k_B} - \frac{k_B}{k_A} \right)^2 \sin^2 k_B d \right]^{-1} \quad (96)$$

となる。ここで、 d は井戸である領域 B の幅を表わし、 k_A は領域 A での波数、 k_B は領域 B での波数を示す。即ち、

$$\hbar k_A = \sqrt{2mE}, \quad (97)$$

$$\hbar k_B = \sqrt{2m(E+V_0)}. \quad (98)$$

この電子の透過率が $T_{well}=1$ となる条件は、 n を整数として

$$k_B d = \pi n \quad (99)$$

で表わせ、フォノンの場合の式(61)と明快な対応が存在する。

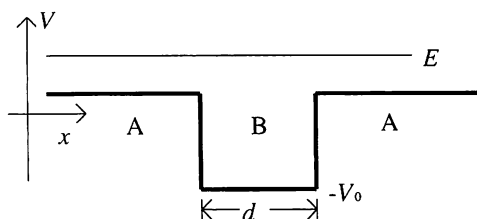


図24 一次元の井戸を透過する電子

謝 辞

本論は、著者の学位論文である「超格子における音響フォノンの分散関係ならびに共鳴透過と反射に関する研究」(1998年1月)の公開論文発表をまとめたものである。発表の準備にあたり、苫小牧工業高等専門学校の佐久間哲郎校長、および岡本幸雄教授、石信一助教授、中野渉助教授、小島洋一郎講師に貴重な意見を頂きました。この場で以上の方々に深謝の意を表します。

参考文献

- ¹ D. C. Hurley, S. Tamura, J. P. Wolfe, and H. Morkoc, Phys. Rev. Lett., **58**, 2446(1987) .
- ² V. Narayanamurti, H. L. Strömer, M. A. Chin, A. C. Gossard, and W. Wiegman, Phys. Rev. Lett., **43**, 2012(1979) .
- ³ H. Kato, H. J. Maris, and S. Tamura, J. Physica **B219 & 220**, 696(1996) .
- ⁴ T. Nakagawa, N. J. Kawai, K. Ohta, and M. Kawashima, Electron. Lett., **19**, 823(1983) .
- ⁵ H. Kato, H. J. Maris, and S. Tamura, Phys. Rev. **B53**, 7884(1996) .
- ⁶ H. Kato, and S. Tamura, J. Phys. C. **32**, 6791(1997) .
- ⁷ H. Kato, J. Acoust. Soc. Am., **101** (3) , 1380(1997) .
- ⁸ D. ボーム, 「量子論」, 高林武彦等共訳, みすず書房, 1964年, pp.328-335.

(平成10年11月25日受理)