

k · p 摂動法による半導体量子井戸における 電子 g 因子の計算

志智 亘¹、伊藤 哲²、森定 慎介¹、西岡 愛恵¹、
市田 正夫^{1,2}、安藤 弘明^{1,2}

¹ 甲南大学大学院自然科学研究科

² 甲南大学量子ナノテクノロジー研究所

(受理日 2006 年 10 月 12 日)

1. はじめに

半導体における電子のスピン自由度に起因する光学効果、すなわちスピン光学効果は、これまで主としてエネルギーバンド構造との関係やスピン緩和機構等、物性上の興味から研究されてきた。近年、応用の観点からは未開拓であった電子のスピン自由度を積極的に利用しようとする試みが活発化しており、新しい光・電子デバイス機能の実現を目指す「スピントロニクス」と呼ばれる新しい研究分野が形成されつつある。電子スピンの磁気応答特性は通常ランダウの g 因子（以降単に g 因子と記す）を用いて評価されている。g 因子は量子井戸、量子細線および量子ドットといった量子ナノ構造において、その値が閉じ込め構造に依存して変化することが知られている。例えば格子整合系量子井戸である井戸層が GaAs、バリア層が $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ における電子 g 因子は井戸幅が狭くなるにつれて、符号が負から正へと変化する。この電子 g 因子が量子構造に依存する理由を説明する考え方の一つとして、量子井戸中の電子の存在確率が井戸幅の広いよりは井戸層における GaAs の電子 g 因子 (-0.44) の値をとり、井戸幅が狭くなるにつれてバリア層に電子の存在確率がしみ出し、 $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ の電子 g 因子 (+0.5) に近づくためという解釈がある[1]。また量子井戸は空間的に等方的でない構造であるため、閉じこめ方向とそれに直交する方向の電子 g 因子の値は異なる[2-5]。

今回我々は量子井戸における電子 g 因子を、前述した解釈や取り扱いとは異なるアプローチ、すなわち量子井戸構造におけるブロッホ関数や閉じ込めエネルギーをもとにした 2 次の k · p 摂動による g 因子の計算を検討した[10]。さらに、この方法を用いて格子整合系量子井戸と歪系量子井戸における電子 g 因子の井戸層厚依存性について計算し、実験結果と比較した。

2. 伝導帯の k · p 摂動法によるエネルギーの計算

GaAs, InGaAs をはじめとする閃亜鉛鉱型の半導体では、伝導帯の下端 (Γ 点) におけるブロッホ関数の対称性が s 型 ($|S\rangle$) であり、価電子帯の上端 (Γ 点) における 3 つのバンドでは p 型の対称性 ($|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$) を持つことが、群論を用いた理論解析から分かって

いる。よって、 Γ 点における伝導帯および価電子帯のプロット関数は、スピン波動関数を含めて $|S \uparrow\rangle$ 、 $|S \downarrow\rangle$ 、 $|X \uparrow\rangle$ 、 $|X \downarrow\rangle$ 、 $|Y \uparrow\rangle$ 、 $|Y \downarrow\rangle$ 、 $|Z \uparrow\rangle$ 、 $|Z \downarrow\rangle$ で与えられる。ただし、スピンの向きは z 軸方向にとる。ここでこれらのプロット関数は、 $f_s(r)$ 、 $g_s(r)$ を球対称関数として $|S\rangle = f_s(r)$ 、 $|X\rangle = x g_s(r)$ 、 $|Y\rangle = y g_s(r)$ 、 $|Z\rangle = z g_s(r)$ で表現できる。これらを基底として使うことも可能であるが、軌道角運動量とスピンを合成した全角運動量がよい量子数となるよう、次のように基底を組み替える。これにより、スピン・軌道相互作用を含むハミルトニアンが見通しのよい形になる。

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |iS \uparrow\rangle \\
 |2\rangle &= \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \equiv -\sqrt{\frac{1}{2}} \left[(X + iY) \uparrow \right] \\
 |3\rangle &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{6}} \left[(X - iY) \uparrow \right] + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \\
 |4\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{3}} \left[(X - iY) \uparrow \right] - \sqrt{\frac{1}{3}} |Z \downarrow\rangle \\
 |5\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |iS \downarrow\rangle \\
 |6\rangle &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{2}} \left[(X - iY) \downarrow \right] \\
 |7\rangle &= \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv -\sqrt{\frac{1}{6}} \left[(X + iY) \downarrow \right] + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle \\
 |8\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{3}} \left[(X + iY) \downarrow \right] + \sqrt{\frac{1}{3}} |Z \uparrow\rangle
 \end{aligned} \tag{1}$$

ここで、これらは上から順に、電子スピン上向き状態、重い正孔スピン上向き状態、軽い正孔スピン下向き状態、スピン分離スピン下向き状態、電子スピン下向き状態、重い正孔スピン下向き状態、軽い正孔スピン上向き状態、スピン分離スピン上向き状態に対応する。また、(1)式のそれぞれ二番目の表現は各状態における全角運動量と全角運動量の z 成分を表している。

次に、 Γ 点近傍 ($k \neq 0$) の電子状態を考えるために、 Γ 点での状態をもとに $k \cdot p$ 摂動計算を行う。このときのプロット関数に対するハミルトニアンは次式で表される。

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \hat{H}_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \tag{2}$$

(2)式において、 \hat{H}_0 は Γ 点におけるハミルトニアンである。さらに、伝導帯および価電子帯の電子状態を求める際に、これら以外のバンドから受ける影響は十分小さいと考え無視することにより、式(1)で表される伝導帯と価電子帯の間の影響だけを取り扱うことにする。 Γ 点の各状態に対応するエネルギーを $E_n^{(0)}$ とすると、

$$E_{1,5}^{(0)} = E_g, \quad E_{2,3,6,7}^{(0)} = 0, \quad E_{4,8}^{(0)} = -\Delta \tag{3}$$

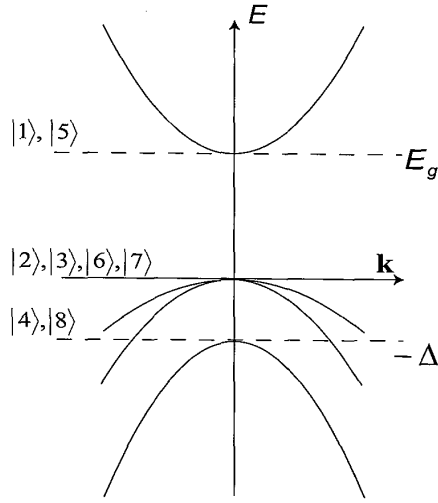


図1. 伝導帯と価電子帯のバンド図

となる。ただし価電子帯上端をエネルギーの基準にとっている。(3)式において E_g は伝導帯下端と価電子帯上端のエネルギー差 (バンドギャップ)、 Δ は価電子帯上端とスピン・軌道分離帯上端のエネルギー差とする。ここで、式(2)の右辺第二項目を摂動 \hat{H}' として取り扱うことで Γ 点近傍の波数 \mathbf{k} におけるエネルギー E_n やこれに対応するブロッホ関数が計算できる。2次摂動まで考慮したエネルギーは以下で表される。

$$E_n \approx E_n^{(0)} + \langle n | \hat{H}' | n \rangle + \sum_{n \neq m} \frac{\langle n | \hat{H}' | m \rangle \langle m | \hat{H}' | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (n, m = 1 \sim 8) \quad (4)$$

具体的に電子スピン上向き状態 ($|1\rangle$) のエネルギーは次のように計算できる。

$$\begin{aligned} E_1 &\approx E_1^{(0)} + \langle 1 | \hat{H}' | 1 \rangle + \sum_{j \neq 1} \frac{\langle 1 | \hat{H}' | j \rangle \langle j | \hat{H}' | 1 \rangle}{E_1^{(0)} - E_j^{(0)}} \\ &= E_g + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \frac{P_{cv}^2}{2} \frac{(k_x + ik_y)(k_x - ik_y)}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{6} \frac{(k_x - ik_y)(k_x + ik_y)}{E_g} \\ &\quad + \frac{2P_{cv}^2}{3} \frac{(k_x - ik_y)(k_x + ik_y)}{E_g + \Delta} + \frac{2P_{cv}^2}{3} \frac{k_z^2}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{3} \frac{k_z^2}{E_g + \Delta} \\ &= E_g + \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} + P_{cv}^2 \left(\frac{2}{3} \frac{1}{E_g} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_g + \Delta} \right) \right] (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 P_{cv}^2 は

$$P_{cv}^2 \equiv \frac{\hbar^2}{m_0^2} \left| \langle iS | p_x | X \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \left| \langle iS | p_y | Y \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \left| \langle iS | p_z | Z \rangle \right|^2 \quad (6)$$

で定義されているブロッホ関数に依存するパラメータであり、電子の有効質量 m_e^* と次のような関係がある。

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} + P_{cv}^2 \left(\frac{2}{3} \frac{1}{E_g} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_g + \Delta} \right) = \frac{\hbar^2}{2m_e^*}$$

3. 電子g因子の計算

3-1. バルクの電子g因子

次に、外場としてz軸方向に磁場を印加することを考える。このときのブロッホ関数に対するハミルトニアン式(2)は

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \mu_B B \sigma_z \quad (7)$$

となる。ここで、磁場 \mathbf{B} は

$$\mathbf{B} = (0, 0, B)$$

であり、ベクトルポテンシャルはランダウゲージを選ぶ。

$$\mathbf{A} = B(0, x, 0)$$

また、式(5)中の波数は磁場印加により演算子化される。

$$k_x \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x}, \quad k_y \rightarrow k_y + \frac{e}{\hbar} B x, \quad k_z \rightarrow k_z \quad (8)$$

このことにより波数 \mathbf{k} には交換しないものが現れる。

$$[k_x, k_y] \neq 0, \quad [k_y, k_z] = 0, \quad [k_z, k_x] = 0 \quad (9)$$

ここで、交換しない波数については次のような置き換えをすると便利である。

$$\begin{aligned} a &\equiv (k_x - i k_y) \\ a^+ &\equiv (k_x + i k_y) \end{aligned} \quad (10)$$

また、 a, a^+ についての交換関係は、式(8)を考慮することにより

$$[a, a^+] = 2 i \frac{e}{\hbar} B \quad (11)$$

となる。よって、外場としてz軸方向に磁場を印加したときの電子スピン上向状態 ($|1\rangle$)

のエネルギー式(5)は次のように求めることができる。

$$E_1 \approx E_g + \mu_B B + \frac{P_{cv}^2}{2} \frac{a^+ a}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{6} \frac{a a^+}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{3} \frac{a a^+}{E_g + \Delta} + \frac{2P_{cv}^2}{3} \frac{k_z^2}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{3} \frac{k_z^2}{E_g + \Delta} \quad (12)$$

同様に、電子スピン下向き状態 (|5>) のエネルギーは

$$E_5 \approx E_g - \mu_B B + \frac{P_{cv}^2}{2} \frac{a a^+}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{6} \frac{a^+ a}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{3} \frac{a^+ a}{E_g + \Delta} + \frac{2P_{cv}^2}{3} \frac{k_z^2}{E_g} + \frac{P_{cv}^2}{3} \frac{k_z^2}{E_g + \Delta} \quad (13)$$

よって、電子 g 因子を求めるために、これらのエネルギー差をとると次式で表される。

$$E_1 - E_5 = 2\mu_B B + P_{cv}^2 \left(\frac{a^+ a - a a^+}{2E_g} + \frac{1}{6} \frac{a a^+ - a^+ a}{E_g} + \frac{2}{3} \frac{a a^+ - a^+ a}{E_g + \Delta} \right) = 2\mu_B B + \frac{e}{\hbar} B P_{cv}^2 \left(-\frac{1}{E_g} + \frac{1}{3E_g} + \frac{2}{3} \frac{1}{E_g + \Delta} \right) \quad (14)$$

ここで電子 g 因子とエネルギー差の関係は

$$E_1 - E_5 \equiv \mu_B g_e^* B \quad (15)$$

で表される。また、 $\mu_B = e\hbar/(2m_0)$ とすると、k · p 摂動法による電子 g 因子は次のように求められる。

$$g_e^* = 2 - \frac{4}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \frac{\Delta}{E_g(E_g + \Delta)} \quad (16)$$

3-2. 量子井戸の電子 g 因子 1

次に、半導体量子井戸における電子 g 因子について述べる。今までの計算では半導体の材料が一つであったが、半導体量子井戸では井戸層とバリア層の二つの材料から構成されている。このような構造における電子 g 因子の計算方法の一つとして、井戸構造によって求められる電子の波動関数とそのときの波数を利用し、各層の電子 g 因子を電子のそれぞれの層における存在確率で重み付けする方法が Ivchenko らにより提案されている[1]。以下ではこの方法を説明する。具体的には、磁場の方向および閉じこめ方向が z 軸方向における量子井戸の電子 g 因子は

$$g_e^* = g_b \int |\phi_b|^2 dz + g_w \int |\phi_w|^2 dz \quad (17)$$

で表現される。ここで、図2で示されている様に g_b, g_w は各層の電子 g 因子、 ϕ_b, ϕ_w は各層における電子の波動関数の一番低いエネルギー状態であるとする。

$$\begin{aligned} \phi_w &= A \cos[k_w z], & \phi_b &= B \exp[\pm k_b z] \\ k_w &= (2m_w E / \hbar^2)^{1/2}, & k_b &= [2m_b (E - V_0) / \hbar^2]^{1/2} \end{aligned} \quad (18)$$

ここで、 V_0 は井戸層とバリア層のエネルギー差、 m_w, m_b は各層の電子有効質量、 E は閉じこめエネルギーとする。また、バリア層の波動関数における波数の符号は井戸層から離れるに従って減衰するよう取るものとする。さらに、電子の波動関数を求める際に井戸層とバリア層の境界条件として以下の連続条件を課している。

$$\phi_w = \phi_b, \quad \frac{1}{m_w} \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_w = \frac{1}{m_b} \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_b \quad (19)$$

以上より下記の方程式を解くことにより、電子の波動関数や波数を求めることができる。

$$\frac{k_b}{k_w} = \frac{m_b}{m_w} \tan \left[k_w \frac{L}{2} \right] \quad (20)$$

ここで、 L は井戸層の幅とする。

次に各層の電子 g 因子について述べる。各層の電子 g 因子は、それぞれの層におけるバルクの電子 g 因子 $g_w^{(0)}, g_b^{(0)}$ と以下で与える補正項により表現されている。

$$g_{w,b} = g_{w,b}^{(0)} + \Delta g_{w,b} k_{w,b}^2 \quad (21)$$

ここで、 Δg は式(7)の3次摂動と4次摂動の k_z^2 かつ磁場 B に比例する項から求めることができる。まず、一般にエネルギーについての3次の補正項は次のように記述できる。

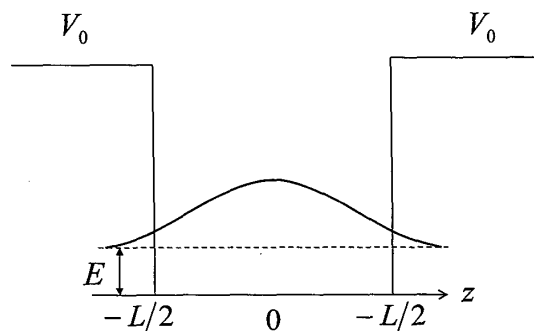


図2. 有限のバリア層に囲まれた電子状態

$$E_j^{(3)} = \sum_{i \neq j} \sum_{h \neq j} \frac{\langle j | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | j \rangle}{(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})(E_h^{(0)} - E_j^{(0)})} - \sum_{i \neq j} \frac{\langle j | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | j \rangle \langle j | \hat{H}' | j \rangle}{(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})^2} \quad (22)$$

ここで、この式の摂動項 \hat{H}' を

$$\hat{H}' = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \mu_B B \sigma_z \quad (23)$$

として、式(1)の状態で k · p 摂動を行い、 k_z^2 かつ磁場 B に比例する項だけを考えると、電子スピン上向き状態 (|1>) のエネルギーについての 3 次の補正項として次式を得る。

$$E_1^{(3)} = \left[-\frac{4}{9} \frac{1}{E_g^2} + \frac{8}{9} \frac{1}{E_g(E_g + \Delta)} - \frac{4}{9} \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} \right] P_{cv}^2 \mu_B B k_z^2 \quad (24)$$

同様に電子スピン下向き状態 (|5>) のエネルギーについての 3 次の補正項は次式を得る。

$$E_5^{(3)} = \left[\frac{4}{9} \frac{1}{E_g^2} - \frac{8}{9} \frac{1}{E_g(E_g + \Delta)} + \frac{4}{9} \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} \right] P_{cv}^2 \mu_B B k_z^2 \quad (25)$$

この二つの補正項の差より Δg の 3 次摂動による部分として次式を得る。

$$\begin{aligned} \Delta g^{(3)} &\equiv \frac{E_1^{(3)} - E_5^{(3)}}{\mu_B B} = P_{cv}^2 \left[-\frac{8}{9} \frac{1}{E_g^2} + \frac{16}{9} \frac{1}{E_g(E_g + \Delta)} - \frac{8}{9} \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} \right] k_z^2 \\ &= -\frac{8}{9} P_{cv}^2 \frac{\Delta^2}{E_g^2 (E_g + \Delta)^2} k_z^2 \end{aligned} \quad (26)$$

次に Δg の 4 次摂動による部分について考える。まず一般にエネルギーについての 4 次の補正項は次のように記述できる。

$$\begin{aligned} E_j^{(4)} &= -\sum_{h \neq j} \sum_{i \neq j} \sum_{n \neq j} \frac{\langle j | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | n \rangle \langle n | \hat{H}' | j \rangle}{(E_h^{(0)} - E_j^{(0)})(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})(E_n^{(0)} - E_j^{(0)})} + 2 \sum_{h \neq j} \sum_{i \neq j} \frac{\langle j | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | j \rangle \langle j | \hat{H}' | j \rangle}{(E_h^{(0)} - E_j^{(0)})(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})^2} \\ &\quad - \frac{3}{2} \sum_{h \neq j} \sum_{i \neq j} \frac{\langle j | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | j \rangle \langle j | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | j \rangle}{(E_h^{(0)} - E_j^{(0)})(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})^2} - \sum_{h \neq j} \frac{\langle j | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | j \rangle \langle j | \hat{H}' | j \rangle \langle j | \hat{H}' | j \rangle}{(E_h^{(0)} - E_j^{(0)})^3} \end{aligned} \quad (27)$$

ここで 3 次摂動の時と同様に、摂動項 \hat{H}' に式(23)を代入し、式(1)の状態で k · p 摂動を行い、 k_z^2 かつ磁場 B に比例する項だけを考えると、電子スピン上向き状態 (|1>) におけるエネルギーの 4 次の補正項は次の項になる。

$$\begin{aligned}
E_1^{(4)} &= \frac{3}{2} \sum_{i \neq 1} \frac{\langle 1 | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | 1 \rangle}{(E_i^{(0)} - E_1^{(0)})} \sum_{h \neq 1} \frac{\langle 1 | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | 1 \rangle}{(E_h^{(0)} - E_1^{(0)})^2} \\
&= -\frac{3}{2} P_{cv}^4 \left[\frac{1}{2E_g^2} a^+ a + \frac{1}{6E_g^2} a a^+ + \frac{1}{3(E_g + \Delta)^2} a a^+ + \frac{2}{3E_g^2} k_z^2 + \frac{1}{3(E_g + \Delta)^2} k_z^2 \right] \\
&\quad \times \left[\frac{1}{2E_g} a^+ a + \frac{1}{6E_g} a a^+ + \frac{1}{3(E_g + \Delta)} a a^+ + \frac{2}{3E_g} k_z^2 + \frac{1}{3(E_g + \Delta)} k_z^2 \right]
\end{aligned} \tag{28}$$

同様に、電子スピン下向き状態 (|5>) については次の項になる。

$$\begin{aligned}
E_5^{(4)} &= -\frac{3}{2} \sum_{i \neq 5} \frac{\langle 5 | \hat{H}' | i \rangle \langle i | \hat{H}' | 5 \rangle}{(E_i^{(0)} - E_5^{(0)})} \sum_{h \neq 5} \frac{\langle 5 | \hat{H}' | h \rangle \langle h | \hat{H}' | 5 \rangle}{(E_h^{(0)} - E_5^{(0)})^2} \\
&= -\frac{3}{2} P_{cv}^4 \left[\frac{1}{2E_g^2} a a^+ + \frac{1}{6E_g^2} a^+ a + \frac{1}{3(E_g + \Delta)^2} a^+ a + \frac{2}{3E_g^2} k_z^2 + \frac{1}{3(E_g + \Delta)^2} k_z^2 \right] \\
&\quad \times \left[\frac{1}{2E_g} a a^+ + \frac{1}{6E_g} a^+ a + \frac{1}{3(E_g + \Delta)} a^+ a + \frac{2}{3E_g} k_z^2 + \frac{1}{3(E_g + \Delta)} k_z^2 \right]
\end{aligned} \tag{29}$$

ここで、式(28)と式(29)の差を考えることにより、 k_z^2 かつ磁場 B に比例する部分だけにすると Δg の4次摂動による部分は次のように求めることができる。

$$\Delta g^{(4)} \equiv \frac{E_1^{(4)} - E_5^{(4)}}{\mu_B B} = \frac{2}{3} P_{cv}^4 \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{\Delta}{E_g (E_g + \Delta)} \left[\frac{4}{E_g^2} + \frac{2}{(E_g + \Delta)^2} + \frac{3}{E_g (E_g + \Delta)} \right] k_z^2 \tag{30}$$

よって、量子井戸における各層の電子g因子の補正項 Δg は

$$\begin{aligned}
\Delta g &= \Delta g^{(3)} + \Delta g^{(4)} \\
&= -\frac{8}{9} P_{cv}^2 \frac{\Delta^2}{E_g^2 (E_g + \Delta)^2} \\
&\quad + \frac{2}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} P_{cv}^4 \frac{\Delta}{E_g (E_g + \Delta)} \left[\frac{4}{E_g^2} + \frac{2}{(E_g + \Delta)^2} + \frac{3}{E_g (E_g + \Delta)} \right]
\end{aligned} \tag{31}$$

となる。

ところで、量子井戸では閉じこめ方向があるため、価電子帯のs型のブロッホ関数に方向性が表れる。このことにより、閉じこめ方向をz軸方向とするとz軸方向の電子g因子とx,y軸方向の電子g因子は異なる値を持つ。このとき、これらの電子g因子の間には次のような関係式がある[1]。

$$g_{\parallel} - g_{\perp} = 2 \frac{m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(\frac{1}{E_g + \delta E_c + \delta E_{hh}} - \frac{1}{E_g + \delta E_c + \delta E_{lh}} \right) \quad (32)$$

ここで、z 軸方向の電子 g 因子を g_{\parallel} 、x, y 軸方向の電子 g 因子を g_{\perp} 、また $\delta E_c, \delta E_{hh}, \delta E_{lh}$ は閉じこめ効果によるエネルギーの変化量として記述した。

さて、この方法は量子井戸の各層におけるバルクの電子 g 因子の値を利用できるという利点がある反面、波数の補正項を k · p 摂動を用いて 4 次の補正項まで計算する必要がある。

3-3. 量子井戸の電子 g 因子 2

次に、電子 g 因子を見積もる方法として、図 3 のような閉じこめエネルギーを考慮した伝導帯、価電子帯およびスピン・分離帯のエネルギー構造を考え、これらの状態間で k · p 摂動を行うことを考える[10]。ここで、各バンドのエネルギーは次のようになる。

$$E_{1,5} = E_g + \delta E_c, \quad E_{2,6} = -\delta E_{hh}, \quad E_{3,7} = -\delta E_{lh}, \quad E_{4,8} = -\delta E_{so} - \Delta \quad (33)$$

式(33)の δE_c は伝導帯、 δE_{hh} は価電子帯における重い正孔、 δE_{lh} は軽い正孔および δE_{so} はスピン分離帯の閉じこめによるエネルギーの変化量であるが、これらは閉じこめにより離散化したエネルギーの一番低いものとし、エネルギーの基準は閉じこめがないときの井戸層における材料の価電子帯上端としている。また、図 3 の $\Delta E_c, \Delta E_v$ はバンドオフセットと呼ばれる量である。ここで、井戸構造によりバンド構造を修正したためプロッホ関数も各バンドに対応するものに取り直さなければならないことに注意する。以上をふまえた上で、

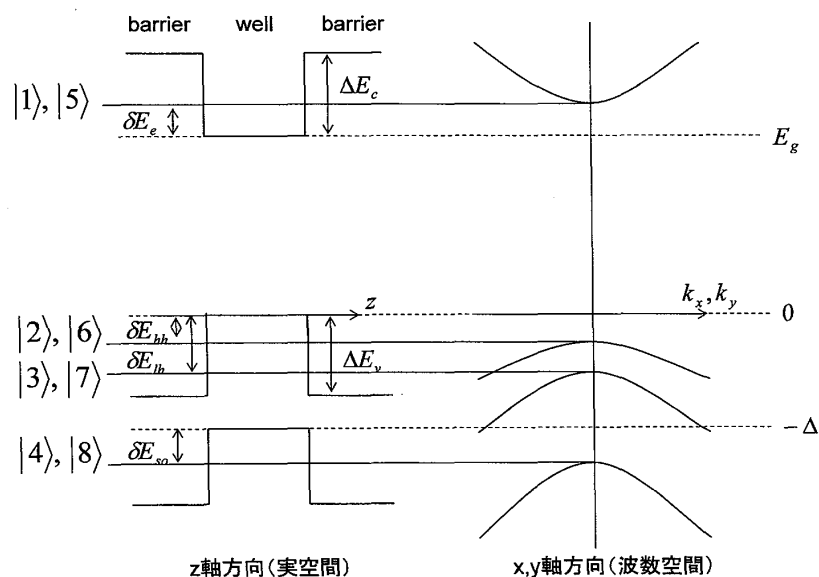


図 3. 量子井戸における伝導帯と価電子帯のエネルギー構造

磁場の方向と閉じこめ方向が平行であるときの電子g因子は以下のように表される。

$$g_{||} = 2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(-\frac{1}{E_g + \delta E_e + \delta E_{hh}} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_g + \delta E_e + \delta E_{hh}} + \frac{2}{3} \frac{1}{E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so}} \right) \quad (34)$$

次に電子g因子のx、y軸方向成分について考える。この方向の電子g因子は、閉じこめ方向と磁場の方向が垂直である時の伝導帯におけるスピン上向き状態と下向き状態のエネルギー差から求めることができる。ここで磁場をx軸方向に印加したときについて考える。また、ブロッホ関数のスピンの向きを価電子帯では閉じこめ方向、伝導帯では磁場の方向とした。これは伝導帯におけるブロッホ関数の対称性がs型なので、磁場方向がよい量子数となるのに対して、価電子帯におけるブロッホ関数の対称性がp型なので、磁場による影響が量子井戸の閉じこめによる影響に比べて小さいときは、閉じこめ方向がよい量子数になると考えたためである。よって、伝導帯のブロッホ関数は次のように表される。

$$\begin{aligned} |1\rangle &\equiv |iS\uparrow_x\rangle = \left| iS \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow + \downarrow) \right\rangle \\ |5\rangle &\equiv |iS\downarrow_x\rangle = \left| iS \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow - \downarrow) \right\rangle \end{aligned} \quad (35)$$

価電子帯のブロッホ関数は式(1)で表される。ここで、

$$\begin{aligned} \langle 1|H|1\rangle &= \langle S\uparrow_x | \mu_B B \sigma_x | S\uparrow_x \rangle \\ &= \mu_B B \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \langle 5|H|5\rangle &= \langle S\downarrow_x | \mu_B B \sigma_x | S\downarrow_x \rangle \\ &= -\mu_B B \end{aligned} \quad (37)$$

として、これらを式(5)に代入すると伝導帯のエネルギーはそれぞれ以下のように表される。

$$\begin{aligned} E_{1x} &\approx (E_g + \delta E_e) + \mu_B B + P_{cv}^2 \frac{(k_x + ik_y)(k_x - ik_y)}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + P_{cv}^2 \frac{(k_x - ik_y)(k_x + ik_y)}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} \\ &+ P_{cv}^2 \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x - ik_y) + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z \right) \left(\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x + ik_y) + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z \right)}{E_g + \delta E_e + \delta E_{hh}} \\ &+ P_{cv}^2 \frac{\left(-\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x + ik_y) + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z \right) \left(-\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x - ik_y) + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z \right)}{E_g + \delta E_e + \delta E_{hh}} \\ &+ P_{cv}^2 \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x - ik_y) - \frac{1}{\sqrt{6}}k_z \right) \left(\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x + ik_y) - \frac{1}{\sqrt{6}}k_z \right)}{E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so}} \\ &+ P_{cv}^2 \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x + ik_y) + \frac{1}{\sqrt{6}}k_z \right) \left(\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x - ik_y) + \frac{1}{\sqrt{6}}k_z \right)}{E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so}} \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned}
E_{5_x} \approx & (E_g + \delta E_e) - \mu_B B + P_{cv}^2 \frac{(k_x + i k_y)(k_x - i k_y)}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} - P_{cv}^2 \frac{(k_x - i k_y)(k_x + i k_y)}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} \\
& + P_{cv}^2 \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x - i k_y) - \frac{1}{\sqrt{3}}k_z\right)\left(\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x + i k_y) - \frac{1}{\sqrt{3}}k_z\right)}{E_g + \delta E_e + \delta E_{th}} \\
& + P_{cv}^2 \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x + i k_y) + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z\right)\left(\frac{1}{\sqrt{12}}(k_x - i k_y) + \frac{1}{\sqrt{3}}k_z\right)}{E_g + \delta E_e + \delta E_{th}} \\
& + P_{cv}^2 \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x - i k_y) + \frac{1}{\sqrt{6}}k_z\right)\left(\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x + i k_y) + \frac{1}{\sqrt{6}}k_z\right)}{E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so}} \\
& + P_{cv}^2 \frac{\left(-\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x + i k_y) + \frac{1}{\sqrt{6}}k_z\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{6}}(k_x - i k_y) + \frac{1}{\sqrt{6}}k_z\right)}{E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so}}
\end{aligned} \tag{39}$$

ここで、x 軸方向の磁場に対するベクトルポテンシャルは次のようなランダウゲージを選ぶ。

$$\mathbf{A} = B(0, 0, y) \tag{40}$$

また、磁場印加に伴い式(38),(39)の波数は演算子化される。

$$k_x \rightarrow k_x, \quad k_y \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial y}, \quad k_z \rightarrow k_z + \frac{e}{\hbar} B y \tag{41}$$

この結果、交換しないものが現れる。

$$[k_x, k_y] = 0, \quad [k_y, k_z] \neq 0, \quad [k_z, k_x] = 0 \tag{42}$$

ここで、以下の置き換えを行う。

$$\begin{aligned}
a & \equiv (-i k_y + k_z), & a^+ & \equiv (i k_y + k_z) \\
c & \equiv (-i k_y + 2 k_z), & c^+ & \equiv (i k_y + 2 k_z)
\end{aligned} \tag{43}$$

上式の波数に式(41)を代入すると、次の交換関係を得る。

$$[a, a^+] = -2i \frac{e}{\hbar} B, \quad [c, c^+] = -4i \frac{e}{\hbar} B \tag{44}$$

よって、これらの関係を用いると式(38),式(39)は次のようになる。

$$\begin{aligned}
E_{1_x} &\approx E_g + \delta E_e + \mu_B B \\
&+ P_{cv}^2 \frac{k_x^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2}}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + P_{cv}^2 \frac{k_x^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2}}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} \\
&+ P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + c c^+ + k_x c^+ + c k_x}{12(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + c c^+ - k_x c^+ - c k_x}{12(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} \\
&+ P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + a^+ a - k_x a - a^+ k_x}{6(E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so})} + P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + a^+ a - k_x a - a^+ k_x}{6(E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so})}
\end{aligned} \tag{45}$$

$$\begin{aligned}
E_{5_x} &\approx E_g + \delta E_e - \mu_B B \\
&+ P_{cv}^2 \frac{k_x^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2}}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + P_{cv}^2 \frac{k_x^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2}}{4(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} \\
&+ P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + c^+ c - k_x c - c^+ k_x}{12(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + c^+ c + k_x c - c^+ k_x}{12(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} \\
&+ P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + a a^+ + k_x a^+ + a k_x}{6(E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so})} + P_{cv}^2 \frac{k_x^2 + a a^+ - k_x a^+ - a k_x}{6(E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so})}
\end{aligned} \tag{46}$$

従って、閉じこめ方向と磁場の方向が垂直であるときの電子g因子は

$$\begin{aligned}
g_{\perp} &\equiv \frac{E_{1_x} - E_{5_x}}{\mu_B B} \approx 2 + \frac{P_{cv}^2}{\mu_B B} \left(\frac{c c^+ - c^+ c}{6(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + \frac{a^+ a - a a^+}{3(E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so})} \right) \\
&= 2 + \frac{2 m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(\frac{-2}{3(E_g + \delta E_e + \delta E_{hh})} + \frac{2}{3(E_g + \delta E_e + \Delta + \delta E_{so})} \right)
\end{aligned} \tag{47}$$

となる。ここで、 $\mu_B = e\hbar/(2m_0)$ を利用した。

この方法は $k \cdot p$ 摂動において2次の補正項までで計算できる。また、この方法では閉じこめ方向と磁場の方向が垂直な時の電子g因子を直接求めることができる。

3-4. 歪系量子井戸の電子g因子

次に歪系について説明する[6]。量子井戸は二つの材料を利用するため、それぞれの材料の格子間隔が異なると歪みによる効果が現れる。そして、この効果により量子井戸における各層のエネルギーギャップや有効質量が変化する。このことは閉じこめエネルギーを変化させることになり、電子g因子の計算に大きく影響を与える。

以下では井戸層のみに、閉じこめ方向に対して平行に二軸性の応力が働いている場合を考える。まず、スピン状態をのぞいて縮退のない単一バンドである伝導帯における歪系量子井戸のエネルギーは次のように与えられる。

$$E_c(z) = \begin{cases} E_g + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & \text{井戸層} \\ E_g + \Delta E_c & \text{バリア層} \end{cases} \tag{48}$$

ただし、エネルギーは価電子帯の上端を基準としている。ここで、 $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = (a_0 - a)/a$ 、 $\varepsilon_{zz} = -2(C_{12}/C_{11})\varepsilon_{xx}$ であり、 a_0 はバリア層における格子定数、 a は井戸層の格子定数として C_{12}, C_{11} は井戸層の弾性係数である。また、エネルギーの次元を持つパラメータ a_c は伝導帯における歪ポテンシャルと呼ばれている。次に、スピン状態以外に縮退のある価電子帯における歪系量子井戸のエネルギーギャップは次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
 E_{hh}(z) &= \begin{cases} -P_s - Q_s & \text{井戸層} \\ -\Delta E_v & \text{バリア層} \end{cases} \\
 E_{lh}(z) &= \begin{cases} -P_s + \frac{1}{2} \left(Q_s - \Delta + \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_s + 9Q_s} \right) & \text{井戸層} \\ -\Delta E_v & \text{バリア層} \end{cases} \\
 E_{so}(z) &= \begin{cases} -P_s + \frac{1}{2} \left(Q_s - \Delta - \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta Q_s + 9Q_s} \right) & \text{井戸層} \\ -\Delta E_v & \text{バリア層} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{49}$$

ここで、 P_s, Q_s は歪みを考慮したときの Luttinger-Kohn ハミルトン行列における歪の行列要素であり次のように表される。

$$\begin{aligned}
 P_s &= -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\
 Q_s &= -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})
 \end{aligned} \tag{50}$$

ここで、 a_v, b は a_c と同様のパラメータである。また、閉じこめ効果によるエネルギーの変化を求める際には以下の歪みを考慮した有効質量を利用する。

$$\begin{aligned}
 m_e^* &= \begin{cases} m_e^w & \text{井戸層} \\ m_e^b & \text{バリア層} \end{cases} \\
 m_{hh}^z &= \begin{cases} \frac{m_0}{\gamma_{1w} - 2\gamma_{2w}} & \text{井戸層} \\ \frac{m_0}{\gamma_{1b} - 2\gamma_{2b}} & \text{バリア層} \end{cases}, \quad m_{lh}^z = \begin{cases} \frac{m_0}{\gamma_{1w} + f_+ 2\gamma_{2w}} & \text{井戸層} \\ \frac{m_0}{\gamma_{1b} + 2\gamma_{2b}} & \text{バリア層} \end{cases}, \quad m_{hh}^z = \begin{cases} \frac{m_0}{\gamma_{1w} + f_- 2\gamma_{2w}} & \text{井戸層} \\ \frac{m_0}{\gamma_{1b}} & \text{バリア層} \end{cases}
 \end{aligned}$$

ここで、 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ は各層の Luttinger パラメータであり、 f_+, f_- は以下のように定義されている。

$$f_{\pm}(\xi) \equiv \frac{2\xi \left[1 + \frac{3}{2} \left(\xi - 1 \pm \sqrt{1 + 2\xi + 9\xi^2} \right) \right] + 6\xi^2}{\frac{3}{4} \left(\xi - 1 \pm \sqrt{1 + 2\xi + 9\xi^2} \right) + \xi - 1 \pm \sqrt{1 + 2\xi + 9\xi^2} - 3\xi^2} \tag{51}$$

ただし、 $\xi \equiv Q_s/\Delta$ であり、 f_+, f_- は歪みが小さい極限 ($Q_s \rightarrow 0$) で $f_+ = 1, f_- = 0$ とする。

ここで、電子g因子の計算を行う際に歪の効果により図4のようにバンド構造が変化する

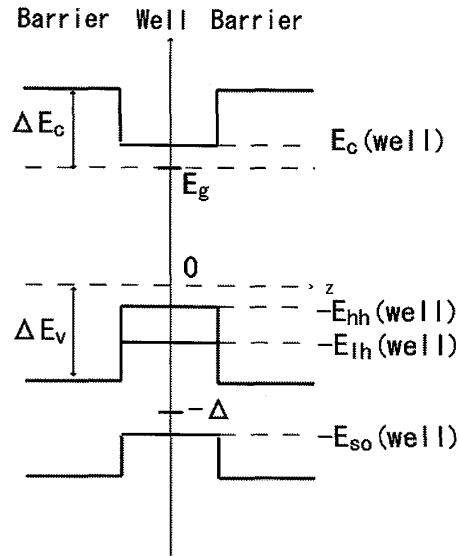


図4. 量子井戸の歪みの効果による伝導帯と価電子帯のバンド構造の変化。
 $E_c(\text{well})$, $E_{hh}(\text{well})$, $E_{lh}(\text{well})$, $E_{so}(\text{well})$ は井戸層の歪みの効果を考慮したエネルギー

る。この結果、量子井戸の電子g因子を、各層の電子g因子をそれぞれの層における電子の存在確率で重み付けする方法において、井戸層部分の計算式を修正しなければならない。ここで閉じこめ方向と磁場の方向が平行なときの井戸層部分の電子g因子の式(15)は

$$g_e^* = 2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(-\frac{1}{E_c + E_{hh}} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_c + E_{lh}} + \frac{2}{3} \frac{1}{E_c + E_{so}} \right) \quad (52)$$

また、井戸層部分の電子g因子の補正項 Δg は

$$\begin{aligned} \Delta g = & -\frac{8}{9} P_{cv}^2 \left(\frac{1}{E_{lh}^2} - \frac{2}{E_{lh} E_{so}} + \frac{1}{E_{so}^2} \right) \\ & - \frac{3}{2} \frac{m_0}{\hbar^2} P_{cv}^4 \left[\left(-\frac{1}{(E_c + E_{hh})^2} + \frac{1}{3} \frac{1}{(E_c + E_{lh})^2} + \frac{2}{3} \frac{1}{(E_c + E_{so})^2} \right) \left(\frac{2}{3} \frac{1}{E_c + E_{lh}} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_c + E_{so}} \right) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{1}{E_c + E_{hh}} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_c + E_{lh}} + \frac{2}{3} \frac{1}{E_c + E_{so}} \right) \left(\frac{2}{3} \frac{1}{(E_c + E_{lh})^2} + \frac{1}{3} \frac{1}{(E_c + E_{so})^2} \right) \right] \quad (53) \end{aligned}$$

とした。ここで、式(32)は歪の効果を考慮した量子井戸における各バンドのエネルギーで計算する。

$$g_{\parallel} - g_{\perp} = 2 \frac{m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(\frac{1}{E_c^w + \delta E_e + E_{hh}^w + \delta E_{hh}} - \frac{1}{E_c^w + E_g + \delta E_e + E_{lh}^w + \delta E_{lh}} \right) \quad (54)$$

ここで、 $E_c^w, E_{hh}^w, E_{lh}^w$ は井戸層のエネルギーギャップ、 $\delta E_e, \delta E_{hh}, \delta E_{lh}$ は各バンドの閉じこめ効果によるエネルギーの変化量とした。

一方、電子スピン上向き状態と下向き状態のエネルギー差より量子井戸における電子 g 因子を求める方法では、式(34),(47)に歪の効果を考慮した量子井戸の各バンドのエネルギーを利用して計算すればよい。

$$g_{\parallel} = 2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(-\frac{1}{E_c^w + E_{hh}^w + \delta E_e + \delta E_{hh}} + \frac{1}{3} \frac{1}{E_c^w + E_{lh}^w + \delta E_e + \delta E_{lh}} + \frac{2}{3} \frac{1}{E_c^w + E_{so}^w + \delta E_e + \delta E_{so}} \right) \quad (55)$$

$$g_{\perp} = 2 + \frac{2m_0}{\hbar^2} P_{cv}^2 \left(\frac{-2}{3(E_c^w + E_{lh}^w + \delta E_e + \delta E_{lh})} + \frac{2}{3(E_c^w + E_{so}^w + \delta E_e + \delta E_{so})} \right) \quad (56)$$

4. 計算結果および実験結果の考察

ここでは、これまで述べてきた電子 g 因子の計算を実際の実験により測定された電子 g 因子と比較する。実験における試料は GaAs を井戸層とし、 $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ をバリア層とした格子整合系の量子井戸および $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ を井戸層とし、GaAs をバリア層とした歪系の量子井戸を用いた。また、実験は観測方向が閉じこめ方向に平行で、磁場はこれらと垂直方向に印加するフォークト配置により測定した[9]。従って計算する電子 g 因子は g_{\perp} に対応する。以下ではそれぞれの量子井戸を GaAs/ $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -QW、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs -QW と記述する。また、電子 g 因子の構造依存性という側面では、GaAs/ $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -QW においては井戸幅に対する電子 g 因子を、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs -QW においては In 濃度 x に対する電子 g 因子を測定した。物性パラメータは文献[6]を参照した。各濃度に対する文献[6]に記載されていないパラメータは比例配分により求めた。また、それぞれの量子井戸におけるバンドオフセット値は GaAs/ $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -QW が $\Delta E_c = 0.67 E_g, \Delta E_v = 0.33 E_g$ [6]、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs -QW が $\Delta E_c = 0.6 E_g, \Delta E_v = 0.4 E_g$ [7] とした。また、量子井戸における各バンドのエネルギーギャップは各バンドの量子井戸構造から求めた。

図5の左図に GaAs/ $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ -QW における磁場の方向と閉じこめ方向が垂直の電子 g 因子の井戸幅依存性の計算結果および実験結果を示す。破線は Ivchenko らの方法（式(17), 式(32)) を用いて計算した結果であり、実線は式(47)を用いて計算した結果である。どちらの計算も実験結果の傾向を再現していることがわかる。ここで、式(32)および式(47)の P_{cv}^2 は量子井戸における各層の P_{cv}^2 を各層の電子の存在確率で重み付けしたものを利用した。また、各層の P_{cv}^2 は各層における材料の電子 g 因子の値を用いて式(16)から逆算した。例えば、GaAs の電子 g 因子は -0.44 より $P_{cv}^2 = 30.4[\text{eV}]$ と求めることができ、

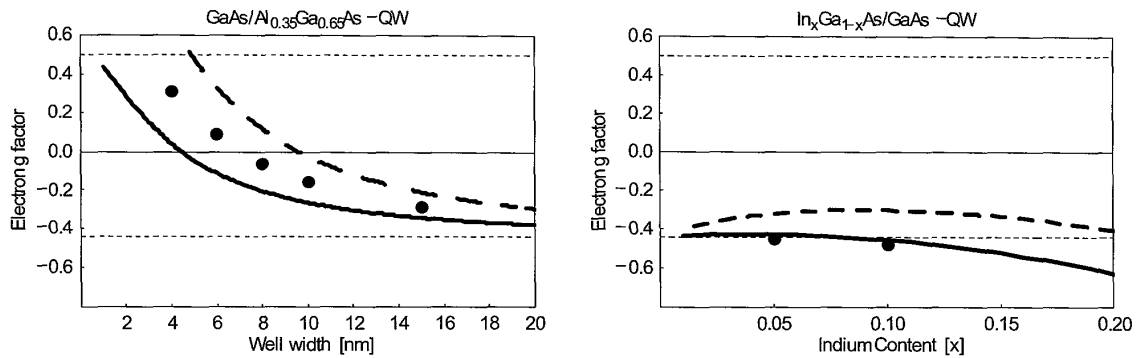


図5. 閉じこめ方向と磁場の方向が垂直であるときの電子g因子。左図はGaAs/
Al_{0.35}Ga_{0.65}As-QWにおける電子g因子の井戸幅依存性。右図はIn_xGa_{1-x}As/
GaAs-QWにおける電子g因子のIn濃度依存性。黒丸は実験値、破線は
Ivchenkoらの方法を用いた計算結果、実線は式(47)および式(56)の計算結
果。点線はGaAsの電子g因子の値-0.44とAl_{0.35}Ga_{0.65}Asの電子g因子の値
0.5を示す。

Al_{0.35}Ga_{0.65}Asでは電子g因子は0.5より $P_{cv}^2 = 32.9$ [eV]と求めることができる。これらの電子g因子の値は文献[1],[8]を参照した。また、図5の右図はIn_xGa_{1-x}As/GaAs-QWにおける磁場の方向と閉じこめ方向が垂直なときの電子g因子のIn濃度依存性を示した。図1の右図の破線はIvchenkoらの方法をもとに歪の効果を考慮した(式(17),式(54))計算結果であり、実線は式(56)を用いて計算した結果である。実線は実験結果をよく再現していることがわかる。ここで P_{cv}^2 はGaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As-QWのときと同様にして求めたが、井戸層の P_{cv}^2 には歪の効果を考慮していないものを利用した。In_xGa_{1-x}Asの P_{cv}^2 はGaAsとIn_{0.53}Ga_{0.47}Asの電子g因子より求めた P_{cv}^2 を比例配分することにより求めた。In_{0.53}Ga_{0.47}Asの電子g因子は文献[8]を参照した。

6. まとめ

今回我々は、半導体量子井戸における電子g因子の量子閉じこめによる影響を議論した。はじめに、Ivchenkoらの考え方をもとに電子g因子を計算した。具体的には量子井戸の各層のバルクにおける電子g因子をそれぞれの層の電子の存在確率で重み付けし、波数の補正項を $k \cdot p$ 摂動の4次の補正項まで計算することにより量子井戸構造における電子g因子を求めた。次に、電子g因子を求める異なるアプローチを議論した。この方法では量子井戸における閉じこめエネルギーを考慮したエネルギーバンドを用いることにより、 $k \cdot p$ 摂動において2次の補正項までの簡単な計算で量子井戸構造における電子g因子を求めることができた。ただし、この簡単な計算方法での量子井戸における波動関数については堅い閉じこめを仮定している。最後に、格子整合系であるGaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}Asおよび歪系であるIn_xGa_{1-x}As/GaAs量子井戸について実際に実験結果と計算結果を比較した。この結果、

異なるアプローチによる計算結果は、格子整合系量子井戸および歪系量子井戸における実験結果の傾向を再現することができた。よって、この方法を利用することにより他の材料系における電子 g 因子を簡単に見積もることが期待できる。

謝辞

本研究を進めるに当たり御協力、御討論していただいたNTT物性科学基礎研究所の鎌田秀彦主任研究員および後藤秀樹主任研究員に御礼申し上げます。

参考文献

- [1] E. L. Ivchenko and A. A. Kisely, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 827 (1992)
- [2] M.J. Snelling, E.Blackwood, C.J.McDonagh, and R.T.Harley, *Phys. Rev. B* **45**, 3992 (1992)
- [3] R.M.Hannak, M.Oestreich, A.P.Heberle, W.W.Rühle, and K.Köhler, *Solid State Commun.* **93**, 313 (1995)
- [4] A.Malinowski and R.T.Harley, *Phys. Rev. B* **62**, 2051 (2000)
- [5] K.Nishibayashi, T.Okuno, Y.Masumoto, and H.-W.Ren, *Phys. Rev. B* **68**, 03533 (2003)
- [6] S. L. Chuang, "Physics of Optoelectronic Device" (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1995)
- [7] J.-P. Reithmaier, R. Höger, and H. Riechert, *Appl. Phys. Lett.* **56**(6), 536 (1990)
- [8] H. Kosaka, A. A. Kisely, F. A. Baron, Ki Wook Kim and E. Yablonovich, *Electron. Lett.* **37**, 464 (2001)
- [9] T. Ito, W.Shichi, S. Morisada, M. Ichida, H. Gotoh, H. Kamada, and H. Ando, (*Phys. stat. sol. (C)* **3**, 3496 (2006)
- [10] Eougenious L. Ivchenko "Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures" (Alpha Science International Ltd. Harrow, UK, 2005)

Calculation of electron spin g-factor in semiconductor quantum wells by k·p perturbation method

W. Shichi¹, T. Ito², S. Morisada¹, Y. Nishioka¹,
M. Ichida^{1,2}, H. Ando^{1,2}

¹ Graduate school of natural science, Konan University, Kobe 658-8501, Japan

² Quantum Nano-technology Laboratory, Konan University, Kobe 658-8501, Japan

(Received October 12, 2006)

Abstract

Lande g-factor which characterizes the response of electrons to external magnetic field is one of the most important factors in semiconductor opto-magnetic effects. In this report effects of quantum confinements on the electron g-factor in semiconductor quantum wells are discussed. First we introduce Ivchenko's method of calculating g-factor based on k·p high-order perturbation method. Then we examine a simplified k·p method to obtain g-factor in quantum wells. It is found that the simplified method exhibits a good agreement with the experimental trends not only in the unstrained QWs but also in strained QWs.