

古典－量子クロスオーバー領域における
多電子波束ダイナミクス of 理論的研究

塩 川 太 郎

名古屋大学大学院博士課程後期課程

工学研究科博士論文

古典－量子クロスオーバー領域における
多電子波束ダイナミクス of 理論的研究

塩川 太郎

物質科学専攻

指導教員 白石 賢二

謝辞

本研究は、名古屋大学未来材料・システム研究所白石賢二教授の指導の下、研究室の方々をはじめ、多くの方々に支えられて行われたものです。白石教授には興味深い研究テーマを与えていただき、大変感謝しています。研究室へ配属されてすぐの頃から、最先端の研究に触れる機会を数多く与えていただきました。国内外の学会や研究会において様々な分野の専門家の方からの意見をいただけたことによって、大変有意義な研究生活を送ることができました。半導体物理学のみならず、産業界における半導体技術開発の重要性について深くご指導いただいたことは、私の進路選択において大きな影響を与えていただきました。加えて、博士前期課程修了後、株式会社東芝（現：キオクシア株式会社）に就職した私に対し、博士後期課程進学のかっかけを与えていただいたことに深く感謝いたします。社会人となって技術応用に注力していたところ、もう一度物理に立ち返って深く研究に取り組むことができたことは、会社での今後の技術開発にも極めて有用なものになると確信しています。

続いて、本論文の審査を引き受けていただきました、名古屋大学工学研究科電子工学専攻宮崎誠一教授、名古屋大学未来材料・システム研究所芳松克則准教授、北海道科学大学工学部電気電子工学科村口正和准教授に感謝いたします。宮崎教授には博士後期課程入学当初より、研究室セミナーの機会を与えていただくなど、私の研究に対し実験の視点から数多くの有益なご指導をいただきました。宮崎教授にご指導いただいたことで、本研究の目的をより明確なものとすることができました。芳松准教授には、会社の業務と学位論文執筆の両立に悩む私に、多くの励ましのお言葉をいただいたこと、深く感謝いたします。学位論文の作成にあたっては、丁寧なご指導をいただきました。心より感謝申し上げます。村口准教授には、学部時代から現在に至るまで、波束の時間発展について具体的手法のご指導を賜りました。札幌で長時間議論いただいたおかげで、研究の方向性を明確にすることができ、学位論文と、その根拠となる論文の作成を進められたものと思っています。

名古屋大学未来材料・システム研究所押山淳特任教授, 洗平昌晃助教, 原嶋庸介特任助教, 長川健太研究員をはじめとするフロンティア計算物質科学グループの皆様には, 研究室のコロキウム等の様々な機会に多くのご指導をいただきました. 様々な視点でのご指摘をいただくことで, 学位論文をより洗練することができたものと感じています. また, 秘書の細野香代子様には, 社会人博士後期課程学生として大学にいることの少ない私のため, 多くのご支援をいただきました. 心より感謝申し上げます.

キオクシア株式会社先端メモリ開発センターの皆さまには, 多忙な業務を抱える中で, 私の学位取得を力強く応援いただいたこと, 深く感謝しています.

全ての方を挙げることはできませんが, 本研究は数多くの方々に支えられて行われました. この場をお借りし, 改めて感謝申し上げます.

最後に, 私を励まし支え続けてくれた妻かおりに, 心からの感謝を伝えたいと思います.

要旨

現代の高度情報化社会を支える大規模集積回路 (VLSI: very large scale integrator) は、微細化によりコスト・性能の両面で飛躍的な成長を実現してきた。特に VLSI を構成する代表的素子である金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ (MOSFET: metal-oxide-semiconductor field effect transistors) に関して言えば、1960 年代の発明から現在に至るまで継続的な微細化が達成され、結果として Moore の法則に従う形で指数関数的に高集積化が進んできた。MOSFET の微細化は、同一基板から得られるダイの数を増加させることでコストの低減に寄与することに加え、MOSFET の性能向上にも直結する。等電界スケーリングに対する Dennard 則によれば、スケーリング係数を k として、トランジスタのサイズが $1/k$ となったとき MOSFET の消費電力および回路遅延はそれぞれ $1/k^2$, $1/k$ となり集積度の向上と性能向上が同時に達成される。これらの背景から、MOSFET の微細化は半導体産業の強い牽引力となってきた。

ところが、2000 年代に入り微細化による性能向上は限界を迎えようとしている。最新ロジックデバイスにおける MOSFET のチャネル長は 10 nm を下回り、室温における電子の平均自由行程より短いチャネルが実現されている。微細チャネルをもつデバイスにおいては、ゲート電極によるチャネル電位の制御性が課題となることから、チャネルを取り囲むようにゲート電極を形成する、GAA (gate all around) 型トランジスタや、ナノワイヤトランジスタ等の低次元微細チャネル構造が提案されている。このような低次元微細チャネルにおいては、ソースからチャネルに注入された電子はドレインに至るまでほとんど拡散されず、弾道的にチャネル中を輸送することが考えられる。この場合、従来伝導電子の輸送モデルとして用いられてきた古典的粒子描像ではその振る舞いを記述できず、量子効果を考慮した電子伝導の取り扱いが必要となる。一方で、MOSFET のソース・ドレイン間に印加される電位差はチャネル長のスケーリングほど顕著には進んでおらず、微細チャネル中では高電界が生じる。典型的な 10 nm の微細チャネルにおいて生じる電界は 1

MV/cm に迫ると考えられており、このような高電界下では量子波のコヒーレンスが保たれず、電子はむしろ古典粒子的に振る舞うことが考えられる。実際に、C. M. Puetter らの計算により電界の存在下で電子は粒子性を発現し、電子は古典的な描像で記述される方が自然であると指摘されている。

これらを総合的に考慮すると、微細チャネルにおける電子輸送問題はまさに古典論と量子論のクロスオーバー領域にあると考えられる。本研究では、量子効果を取り入れながら電子の粒子性に対しても議論することができる古典-量子の中間的な電子描像として、電子波束に着目した。本研究は計算物理学的手法を用いて電子波束描像による多電子のダイナミクスを追い、古典-量子クロスオーバー領域における電子輸送の物理学を明らかにすることを目的とする。

微細チャネルにおいて考慮すべき重要な効果として、長距離電子間相互作用が挙げられる。電子数密度を一定としてチャネルを微細化していくと、ある瞬間にチャネルに存在する電子の数は極めて少なくなる。電子が十分多数にある系においては、電子間にはたらく長距離相互作用はスクリーニング効果によって低減されるため、近接相互作用のみを考慮すればよい。一方、電子数が非常に少ない微細チャネルにおいては、電子のスクリーニングが不十分となって、離れた電子同士の直接的な長距離相互作用が電子伝導に対し主要な寄与をすると考えられる。ところが、長距離電子間相互作用を取り入れた多電子系の取り扱いの困難さから、過去に行われた多くの研究は量子力学的アプローチの中で多電子に対する長距離電子間相互作用を扱っていない。本研究では、2 電子系での厳密計算との比較により結果の妥当性を確認した上で、時間依存ハートリー・フォック近似を用いることで3 電子以上の多電子時間発展計算を行い、電子輸送特性に長距離電子間相互作用が与える影響を議論する。

本論文では、はじめに研究の背景と計算手法について述べる。本研究で長距離電子間相互作用を取り扱うために用いる時間依存ハートリー・フォック近似の導出を行い、計算モデルとハミルトニアン、また時間発展計算の手法について詳細に述べる。続いて、3 種類の系における多電子波束ダイナミクスの結果を示し、古典-量子クロスオーバー領域における電子の振る舞いを評価する。

第3章では、多電子波束ダイナミクスの手法を用いてクーロン・ブロッケイドの効果を数値的に考察した。まず、ハートリー・フォック近似により長距離電子間相互作用を取り入れたハミルトニアンに対して、時間に依存しないシュレーディンガー方程式を自己無

撞着に解き、量子井戸における固有波動関数とエネルギー固有値を求めた。ハートリー・フォック方程式の固有エネルギーに対し成り立つ関係として、クープマンズの定理が知られている。本研究では長距離電子間相互作用のない場合にクープマンズの定理が成り立つ一方、長距離電子間相互作用が強くなるに従い量子井戸の軌道準位が変化し、クープマンズの定理が成り立たなくなることを数値的に確認した。さらに、求めた固有波動関数を用いて量子井戸の中に電子を束縛した上で、その量子井戸にガウス型電子波束を外挿する時間発展計算を行うことで動的にクーロン・ブロッケイド現象を考察した。特に、量子井戸に束縛される電子数を変化させることで、外挿電子波束の反射率・透過率を評価した。その結果、量子井戸に束縛される電子数が増加するに従い外挿電子波束の反射率が向上し、透過率は低下することが示された。これらの結果は定性的に予想されるものと整合しており、本研究で用いる時間依存ハートリー・フォック近似の妥当性を指示するものと考えうる。

第4章では、一様電界下のガウス波束の時間発展計算を行い、電子の振る舞いの長距離電子間相互作用強度依存性を評価した。本研究では時間依存ハートリー・フォック近似を用いて5電子の時間発展計算を実行し、複数の電子が相互作用することによる振る舞いの変化を考察した。その結果、長距離電子間相互作用が強い場合には電子波束は強く反発し、独立した古典粒子的に振る舞う一方、長距離電子間相互作用が弱い場合には複数の電子が重なり合い、一体となって輸送することが示された。この、複数の電子が集合的に輸送する現象を、「多電子波束」という新たな電子描像として提案した。多電子波束は独立粒子である古典的描像と電子波がコヒーレントに重なった量子的描像の中間的描像であり、有限個の電子が固まりとなって集合的に輸送するモデルである。この結果は、次世代ナノデバイスにおける電子輸送について考察する上で、長距離電子間相互作用の効果を取り入れることの重要性を示し、かつ、多電子波束描像による電子輸送現象の記述の必要性を示唆しているものと考えられる。

一様電界下のガウス波束の時間発展計算で新たな描像として提案した多電子波束について、1つの多電子波束に含まれる電子数は電子間相互作用が強くなるに従い減少することが予想される。第5章では、さらなる多電子系かつ長時間の時間発展を行うことで、1つの多電子波束に含まれる電子数を評価した。一様電界の存在下で計算を行う系を拡大すると、計算コストが膨大となるだけでなく、散乱効果を取り入れない限り電子がブロッホ振動を起こし、本研究で用いる有効質量近似との整合性が破綻することが課題となる。そこで本

計算においては一次元円形鎖の系を用いて計算コストを低減した上、電子を仮想磁場により運動させることでブロッホ振動が起きないように計算モデルを取り入れた。多電子波束に含まれる電子数を議論するため、本計算においても時間依存ハートリー・フォック近似を用い、最大 30 電子の時間発展計算を行った。その結果、多電子波束に含まれる電子数は長距離電子間相互作用強度に強く依存し、電子間相互作用がない場合に平面波状態に近づく一方、電子間相互作用が強くなるに従い多電子波束に含まれる電子数が減少することが示された。さらに、系のサイズを変えた際に 1 つの多電子波束に含まれる電子数の変化についても考察し、1 つの多電子波束に含まれる電子数は系のサイズに依存せず電子間相互作用強度によって決まることを示した。先行研究において、デバイスの微細化に伴い、伝導キャリア数が減少することで、キャリアの離散性による本質的な電流揺らぎが課題となる可能性が示されている。本研究において提案した多電子波束描像では、1 つのキャリアが複数の電荷を輸送することから、キャリアの離散性に起因する電流揺らぎが悪化し、より低い動作周波数においても課題となる可能性を提示した。

第 6 章では、本研究に対し残された課題と今後の展望について述べる。本研究は一次元微細チャネルを想定したモデルにおいて、長距離電子間相互作用の基礎物理を検討した。この結果の実験的な確認や、現実のデバイスに対する応用については、次元の拡張や、電極・チャネル境界のモデル化等の課題を解決する必要がある。これらの課題を具体的に挙げたのち、今後の展望について提示する。

最後に、本論文を総括して結言をまとめる。本研究の結果は、長距離電子間相互作用の効果により、微細チャネル中で「多電子波束」と呼ばれる集合的な状態を形成して電子が輸送することを示しており、次世代デバイスの設計にあたり、「多電子波束」という新たな描像による考察が必要になることを指摘している。

目次

謝辞	i
要旨	iii
目次	ix
表目次	xi
図目次	xiv
第 1 章 序論	1
1.1 背景	1
1.2 微細チャネルにおける電子輸送描像	5
1.3 長距離電子間相互作用	7
1.4 これまでの研究	9
1.5 本研究の目的	10
1.6 本論文の構成	10
1.7 まとめ	12
第 2 章 計算手法	13
2.1 半導体結晶における波動関数の基本的性質	13
2.1.1 ブロッホの定理	14
2.1.2 タイトバインディング近似	18
2.1.3 有効質量近似	20
2.1.4 第二量子化	24

2.2	時間依存ハートリー・フォック方程式	30
2.2.1	導出	30
2.2.2	直交性の保存	32
2.2.3	電子密度	34
2.2.4	エネルギー保存	35
2.3	計算モデルとハミルトニアン	37
2.4	時間発展計算の方法	39
2.4.1	形式解の導出	39
2.4.2	時間発展演算子の展開	40
2.4.3	電子密度の定量化	41
2.4.4	パラメータの設定	41
2.5	まとめ	41
第 3 章	量子井戸の固有状態とクーロン・ブロッキングに対する考察	43
3.1	はじめに	43
3.2	自己無撞着なハートリー・フォック方程式の解	44
3.2.1	計算モデルと計算条件	44
3.2.2	計算結果と考察	47
3.3	クーロン・ブロッキングに対する波束ダイナミクスによる考察	51
3.3.1	計算モデルと計算条件	51
3.3.2	計算結果と考察	54
3.4	まとめ	58
第 4 章	一様電界下の多電子波束ダイナミクス	59
4.1	はじめに	59
4.2	計算モデルと計算条件	60
4.3	計算結果と考察	61
4.3.1	ガウス波束の時間発展	61
4.3.2	多電子波束描像の提案	64
4.4	まとめ	66

第 5 章	一次元鎖における多電子波束の長時間発展についての考察	67
5.1	はじめに	67
5.2	計算モデルと計算条件	68
5.3	計算結果と考察	71
5.3.1	基本条件 (100 nm, 20 電子) での計算結果	71
5.3.2	系のサイズ依存性についての考察	74
5.3.3	電流揺らぎに対する考察	78
5.4	まとめ	80
第 6 章	残された課題と今後の展望	81
第 7 章	結言	83
付録 A	MOSFET の動作原理	89
付録 B	グラム・シュミットの正規直交化法	91
参考文献		93
研究業績		99

表目次

2.1	計算に用いたパラメータ	41
3.1	自己無撞着に求めた量子井戸の固有エネルギーとクーブマンズの定理との比較	48

図目次

1.1	G. E. Moore による半導体集積回路の集積度予測 (1965 年時点, [23] より転載 ©1965 IEEE)	4
1.2	MPU ゲート長の微細化トレンドと予測 ([24] より作成)	5
1.3	チャネル長に依存して変化する電子描像の概念図	7
1.4	2 つの電子波束の時間発展計算 ([49] より転載, Copyright 2013 The Japan Society of Applied Physics)	8
1.5	ダブルゲート MOSFET における電子分布 ([33] より転載, Copyright 2011 The Japan Society of Applied Physics)	9
1.6	2 つのガウス型電子波束の時間発展 ([70] より転載)	11
3.1	量子井戸の固有状態における電子密度分布 ($U/\gamma = 0.4$)	49
3.2	量子井戸の固有状態における電子密度分布 ($U/\gamma = 1$)	50
3.3	電子間相互作用が $U/\gamma = 0.4$ の場合に, 井戸中に生じるポテンシャル構造	51
3.4	電子が束縛された量子井戸に対して電子波束を外挿した時間発展計算の モデル図	52
3.5	3 電子が束縛された量子井戸に外挿した電子波束の時間発展計算の結果 .	54
3.6	8 電子が束縛された量子井戸に外挿した電子波束の時間発展計算の結果 .	55
3.7	外挿電子波束の存在割合の時間変化	56
3.8	量子井戸中の電子数を変化させた場合の反射率と透過率	57
4.1	電子間相互作用が強い場合 ($U/\gamma = 10$) の 5 電子波束の時間発展	62
4.2	電子間相互作用が弱い場合 ($U/\gamma = 1$) の 5 電子波束の時間発展	63
4.3	多電子波束状態の波動関数	64

4.4	長距離電子間相互作用強度に特徴付けられる電子描像の概念図	65
5.1	円電流ダイナミクスモデル図	69
5.2	長距離電子間相互作用がない場合 ($U/\gamma = 0$) の電子分布の時間発展 . . .	72
5.3	弱い長距離電子間相互作用が存在する場合 ($U/\gamma = 0.5$) の電子分布の時 間発展	72
5.4	長距離電子間相互作用強度が δ ($U/\gamma = 1$) の場合の電子分布の時間発展 . .	73
5.5	自己相関関数の時間平均 $\overline{S(k, t)}$	74
5.6	自己相関関数の時間平均 $\overline{S(k, t)}$ の系のサイズおよび長距離電子間相互作 用依存性	75
5.7	変数変換を適用した自己相関関数の時間発展	77
5.8	粒子描像, 多電子波束描像による電流揺らぎの概念図	79
A.1	n 型金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ (MOSFET) の模式図 . .	90

第 1 章

序論

1.1 背景

現代の高度情報化社会を支える大規模集積回路 (VLSI: very large scale integrator) は、半導体デバイスの微細化によって性能・コストの両面で飛躍的な成長を遂げてきた。現在世界的に普及しているスマートフォンをとってみても、その内部に搭載されているマイクロプロセッサ (MPU: microprocessing unit), DRAM (dynamic random access memory) や NAND 型フラッシュメモリ等の記憶装置, あるいは通信用モデムやイメージセンサなどの主要部品はいずれも VLSI によりその機能が実現, 実装されたものである。さらに, VLSI はスマートフォンに限らず, パーソナルコンピュータやタブレット端末はもちろん, 家庭用電化製品や自動車に至るまで, 今やあらゆる“モノ”に搭載が進められており, 内閣府が推進する“Society 5.0”のキー技術である IoT (Internet of Things) の実現の屋台骨となっている [1]。このような背景により, 1940 年代に端を発した半導体市場の拡大はとどまるところを見せず, 2019 年現在において半導体産業の市場規模は 4500 億ドルを突破している [2]。さらに, 自動車や電化製品, インフラストラクチャー等の半導体が支える市場は AI (人工知能, artificial intelligence), 機械学習等の新規技術の実用化と相まってさらなる拡大を続けており, VLSI 技術は現代の産業を文字通り支えていると言える。

VLSI における最も代表的な素子として, 金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ (MOSFET: metal-oxide-semiconductor field effect transistors) が挙げられる。MOSFET は, ゲート電極の電位を制御することで酸化膜を介して半導体表面の電位を変化させ,

キャリア伝導度を制御するデバイスで、スイッチング素子や増幅素子として機能する。(MOSFETの動作原理については付録Aに示す。) MPU そのものや、その他の半導体デバイスにおける周辺回路などの論理回路の大部分はMOSFETを主素子とし、これに必要に応じて抵抗素子や容量素子を組み合わせることで実現されている。さらに、DRAMやNAND型フラッシュメモリについてもその記憶素子はMOSFETを拡張、応用したものであり、MOSFETはあらゆるVLSIにおいて最重要デバイスと言える。

電界効果型トランジスタの理論的提案は1920年代に遡る[3–5]。絶縁体を介してゲート電極の電位を半導体表面に伝え、半導体極表面を機能させる表面デバイスのアイデアはJ. E. Lilienfeld [6,7]により早期に提案されていたが、当時は半導体表面に高密度に存在する表面準位の影響を排除することができず、実験的に動作させることはできなかった。点接触型トランジスタ[8–11]や接合型トランジスタ[12,13]等の半導体産業上重要な発明を経て、最終的にD. KahngとM. M. AtallaによりSi MOSFETが発表されたのは1960年であった[14,15]。Si MOSFETが実現したのは、Si プレーナ型トランジスタ[16]の発明が大きく寄与している。高純度のSi単結晶表面を水蒸気雰囲気下で高温熱酸化することで、良質の酸化膜をSi基板表面に成膜することができるだけでなく、酸化膜の一部をエッチングすることで酸化膜を不純物拡散のマスクとして用いることができる。この技術の発明により、量産可能なトランジスタの製造プロセスを確立できたと言える。

Si MOSFETの発表以降、半導体デバイスは急速な高集積化、高性能化を実現する。Si MOSFETは高品質のゲート酸化膜を再現性良く形成できることをはじめ、バイポーラ型トランジスタと比較し簡易な製造プロセス、CMOS (complementary MOS) 構造[17]による超低消費電力等の特徴とし、集積回路の本流として発展してきた。リソグラフィ・拡散技術を用いることで同一基板上に同時にスイッチング素子・整流素子・抵抗素子・容量素子等の異なる素子を形成する集積電子回路はJ. S. Kilby [18]により初めて提案されたが、当初は素子間の干渉が極めて大きく量産に堪えるものではなかった。現在用いられているSiモノリシック集積回路はR. N. Noyce およびG. E. Moore [19,20]により提案されたもので、素子間を絶縁膜により分離してその上に金属蒸着により配線を形成することで高集積化と素子間干渉の低減を実現し、Kilby特許の課題を解決したものである。Noyce特許で提案された手法は現在に至っても半導体集積回路の基礎技術として活用されており、VLSI実現に大きく寄与した。

さて、Si MOSFETを用いた集積回路の基本技術が確立されて以降、集積回路は指数

関数的な集積度の向上を 1960 年代から現在に至る数十年にわたり継続することになる [21, 22]. 半導体集積回路の集積化の速度はよく知られた経験則, 「Moore の法則」に従う形で進んできた. G. M. Moore は 1965 年に論文 [23] の中で以下のように述べている.

The complexity for minimum component costs has increased at a rate of roughly a factor of two per year (see graph on next page). Certainly over the short term this rate can be expected to continue, if not to increase. Over the longer term, the rate of increase is a bit more uncertain, although there is no reason to believe it will not remain nearly constant for at least 10 years. That means by 1975, the number of components per integrated circuit for minimum cost will be 65,000.

(図 1.1 参照)

すなわち, Si MOSFET が発明された 1960 年からの数年間で半導体集積回路の集積度が 1 年に 2 倍の速度で向上してきたことを根拠に, その後の 10 年も同じペースで集積度が向上すると予言している. 集積度の向上速度は 18 ヶ月で 2 倍程度と緩やかになったものの, 驚くべきことに, 1965 年に行われたこの予測は, その後現在に至るまで技術開発の指標として用いられてきた. 図 1.2 に国際半導体技術ロードマップ (ITRS) により報告された MPU のゲート長の微細化トレンドを示す [24]. 2000 年頃から物理ゲート長の微細化は鈍化が見られるものの, 指数関数的な微細化が 1960 年代からおよそ 50 年にわたり継続してきたことを示している.

集積回路は一度のプロセスで同一基板上の全てのダイを加工することができることから, 集積度の向上は単位トランジスタあたりのコストの低下に直結する. 加えて, 高集積化に伴うトランジスタの微細化はトランジスタ性能そのものも向上させる. 1974 年に R. H. Dennard [25] が提示した等電界スケーリングによると, スケーリング係数を k としてトランジスタのサイズが $1/k$ になった場合には, 必要な電圧は $1/k$, 流れる電流は $1/k$ となるため, 消費電力は $1/k^2$ となる. 同時に回路遅延も $1/k$ となり, 集積度は k^2 となる. つまり, 仮にデバイス全体を $1/2$ の大きさにすると, 速度は 2 倍, 消費電力は $1/4$ となり, 同時に集積度を 4 倍に向上させることができるのである. このスケーリング則は Dennard 則と呼ばれ, Moore の法則と併せて半導体産業を牽引することになる.

ところが, Moore の法則に従った微細化による高集積化は限界を迎えようとしている.

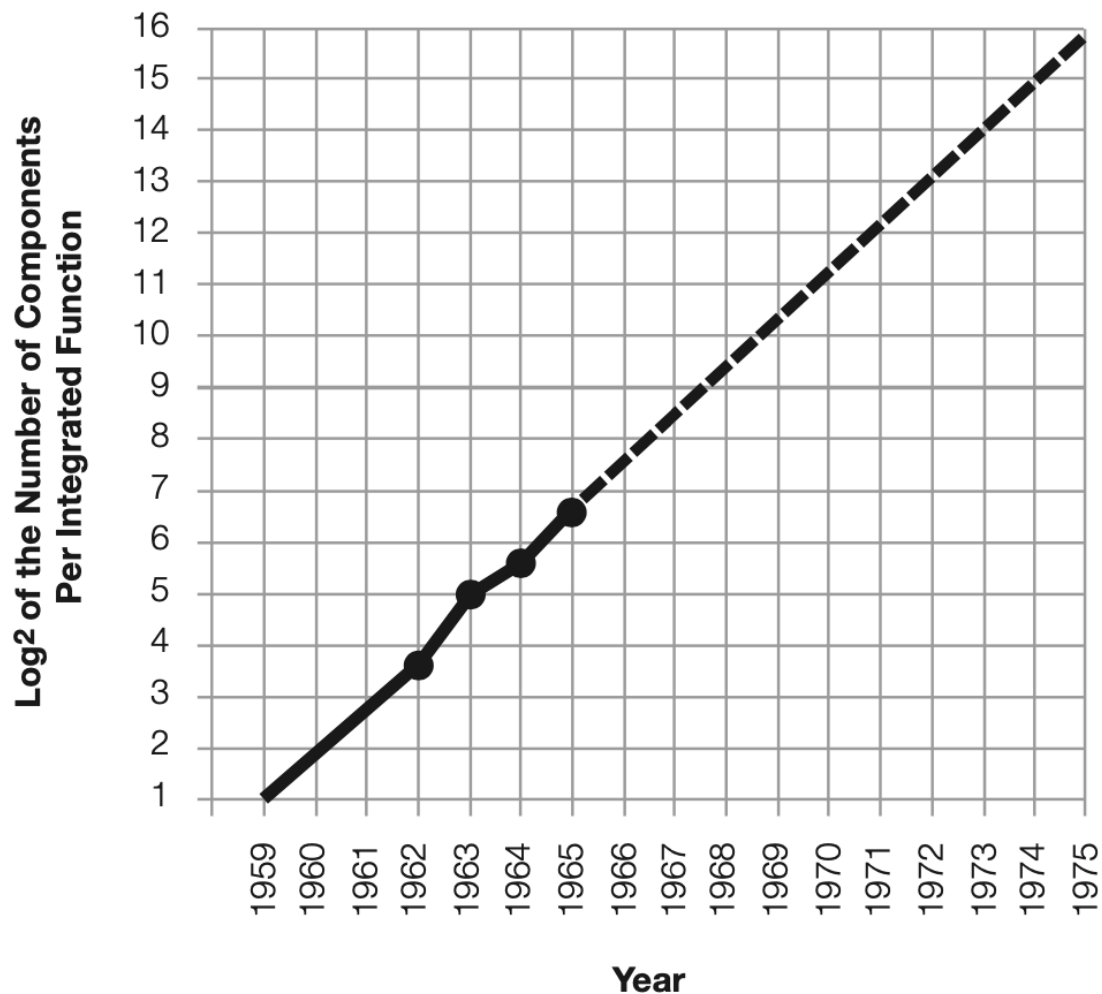


図 1.1 G. E. Moore による半導体集積回路の集積度予測 (1965 年時点, [23] より転載 ©1965 IEEE)

ITRS 2.0 による予測では, 2021 年頃にロジックデバイスの物理ゲート長は 10 nm に達するとされている [26]. 物理ゲート長が 10 nm まで微細化すると, チャンネルを流れる電子はその多くがチャンネル中の散乱要素により拡散されることなくドレインへ到達する, 弾道輸送が実現すると考えられている. このような系においては, もはや電子の振る舞いは古典的粒子描像による拡散モデルでは記述できず, 量子効果がその伝導に対して支配的となることで, これまでとは全く異なる現象が現れる可能性がある. 加えて, 微細チャンネルにおいてはゲート電極によるチャンネル電位の制御性が低下する [27] ことから, チャンネルを取り囲むようにゲート電極を形成する, GAA (gate all around) 型トランジスタ [28] や ナノワ

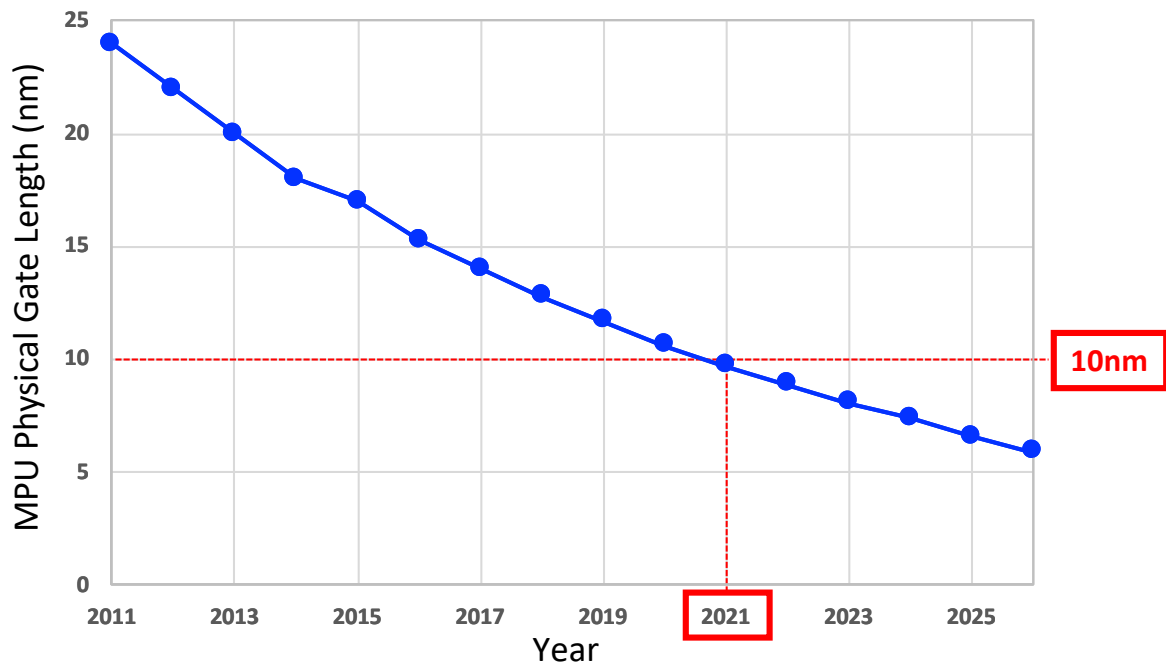


図 1.2 MPU ゲート長の微細化トレンドと予測. ([24] より作成)

イヤー型トランジスタ [29] 等, 従来の 2 次元構造チャネルではなく, より低次元な 1 次元チャネルを有するトランジスタが多く提案されている. すなわち, 次世代 VLSI に搭載される MOSFET における電子伝導に対しては, 量子力学的立場に基づいた低次元系における物理に対する理解が求められているのである.

1.2 微細チャネルにおける電子輸送描像

半導体電子デバイスにおける電子輸送の物理学については, 強く興味を持たれ, 多くの研究がなされてきた. 前節で述べたように, 電子デバイスは微細化により性能を向上させてきた背景があるが, デバイス中の電子の振る舞いはサイズの変化に伴い変化するため, デバイスのサイズ, 特にチャネル長によって異なる視点を用いて電子輸送問題を考察する必要がある.

電子の振る舞いを特徴付ける長さのひとつが平均自由行程である. チャネル長が電子の平均自由行程よりも十分長い場合には, 電子はチャネル中の不純物や格子のフォノン振動によって散乱されながら輸送する. この場合には, 電子は古典粒子として扱われ, 古典力学, 古典電磁気学の法則に従って運動する. 広く知られたドルーデの電子輸送理論は, この

ような粒子モデルによって導かれたものである [30, 31]. 現在に至るまで, 多くの研究やデバイスシミュレーションが古典粒子的電子モデルによってなされてきた [32, 33]. ところが, 微細化の進んだチャンネルにおいてはチャンネル長が電子の平均自由行程よりも短くなる. すなわち, 古典的粒子モデルによる電子輸送は論理的に限界を迎えることとなる. このような場合には電子は拡散して伝導するのではなく, 弾道的にドレイン電極へ到達する場合が多くなると考えられる [34–38]. 非常に微細なチャンネルにおける電子輸送については量子力学的立場からの研究も盛んに行われてきた. 代表的なものが, Landauer 公式 [39–41] や非平衡 Green 関数法 [42–44], Berry 位相 [45–47] による電子輸送理論である. これらは純粋量子力学的な立場から電流の輸送を議論しており, 実際にこれらを用いたデバイスシミュレーションなども行われるようになってきている [48]. 後述するように, これらのアプローチには長距離電子間相互作用を取り入れることが困難であるという課題がある.

次世代のデバイスにおいて実現するのは, まさに古典論と量子論のクロスオーバー領域であると考えられる (図 1.3). チャンネル長は電子の平均自由行程を下回り, 量子効果が電子輸送に与える影響が顕著になることは想像に難くない. 一方で, 先に述べた定電界スケーリングによればデバイスサイズの縮小に伴い電圧を下げることを求められているが, 実際には電圧のスケーリングはサイズのスケーリングほどは顕著に進んでおらず, 短チャンネルデバイスにおいてはチャンネル中に大きな電界が生じている. 典型的な数値を挙げると, ソース・ドレイン間に電位 0.7 V が印加された場合, 長さ 10 nm のチャンネルには 0.7 MV/cm という非常に大きな電界が現れることになる. このような場合には, 電子波はチャンネル中でコヒーレンスを保つことができず, 電子の粒子性が発現することが考えられる. 実際に, C. M. Puetter らによる報告 [49] では, 電界が存在する場合に電子は粒子性を発現し, 電子はより古典的な描像によって記述される方が自然であると指摘されている (図 1.4). このように, 次世代デバイスのチャンネルにおける電子描像は従来のものとは異なるものになると考えられる. 本研究では, 量子力学的効果を取り入れながら, 電子の粒子性も議論することができる, 古典-量子の中間的な電子の描像として, 電子波束に注目した. 本研究は計算物理学的手法を用いて電子波束描像による多電子のダイナミクスを追い, 古典-量子クロスオーバー領域の物理学を議論することを基本指針とする.

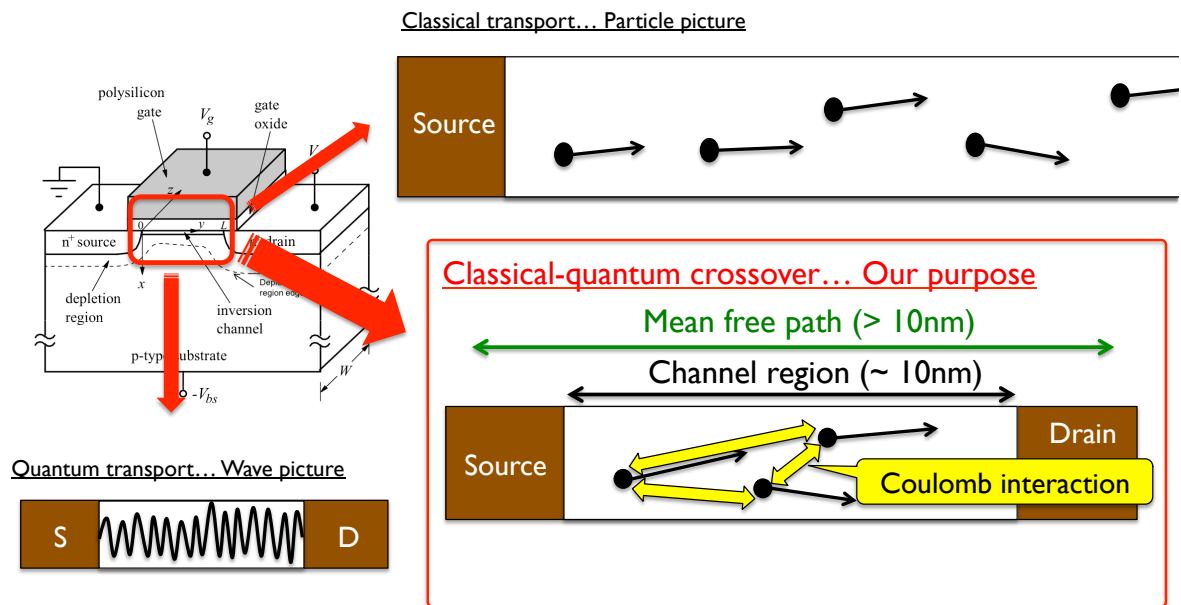


図 1.3 チャンネル長に依存して変化する電子描像の概念図. 右上: 古典的粒子描像, 左下: 量子波描像, 右下: 古典-量子クロスオーバー領域.

1.3 長距離電子間相互作用

続いて、微細チャンネル中で顕在化すると考えられる長距離電子間相互作用について議論する。チャンネル長、チャンネル幅がそれぞれ 10 nm という場合について考えてみると、チャンネル領域の電子数密度が典型的に $10^{12} \sim 10^{13}$ 個/cm² 程度であることから、チャンネル中に存在する電子数は 1 ～ 10 個となる。電子が多数存在する系においては、電子間にはたらく長距離相互作用はスクリーニング効果によって低減され、近接相互作用のみが電子間相互作用として主要な作用をすることになるが、本研究がターゲットとする微細チャンネルのように電子が非常に少ない系においては、むしろ長距離の電子間相互作用が主要な寄与をすると考えられる。

図 1.5 に、佐野により報告されたダブルゲート MOSFET モデルにおける 3 次元モンテ

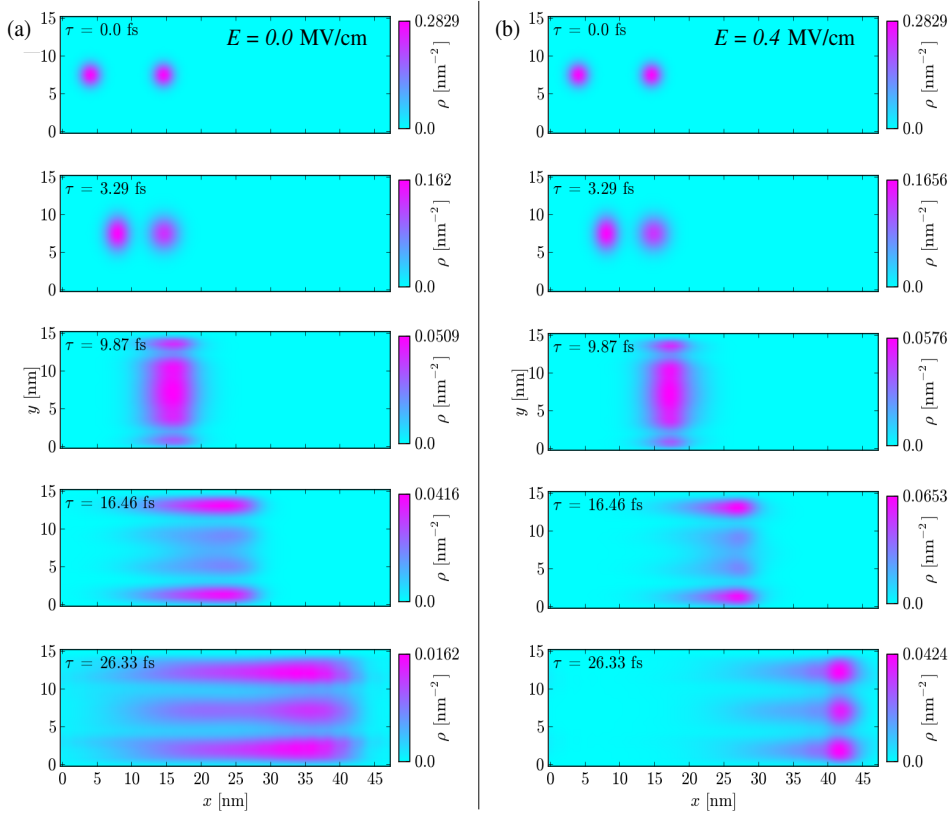


図 1.4 2つの電子波束の時間発展計算. (a) 電界が存在しない場合, (b) 電界が存在する場合. 電界が存在する場合に電子波束はより粒子的に振る舞うことがわかる. ([49]より転載, Copyright 2013 The Japan Society of Applied Physics)

カルロシミュレーションの結果を示す [33]. この研究ではチャネル長を 20 nm とし, 長距離電子間相互作用の有無による伝導電子の振る舞いを議論している. 図 1.5(a) は長距離電子間相互作用を考慮に入れた場合, (b) は長距離電子間相互作用を考慮に入れない場合の電子分布で, 縦軸は伝導帯下端を基準とした電子の運動エネルギーを示しており, 200 meV 以上の運動エネルギーを持つ電子を赤色でプロットしている. 長距離電子間相互作用がある場合 (a) の結果を見ると, 電子はソース・チャネル・ドレインのいずれの領域においても非常に強いエネルギーばらつきを持ち, チャネル中にはソースから見たドレイン電位に対応するエネルギーを超えた, 高いエネルギーを持つ電子が存在し, かつドレインに至っても高いエネルギーを持ったままの電子が多いことがわかる. 一方長距離電子間相互作用を考慮しない場合 (b) の結果を見ると, 伝導電子の持つエネルギーはソース・ドレインの電位差によりほぼ説明でき, 長距離電子間相互作用が存在する場合のような高いエ

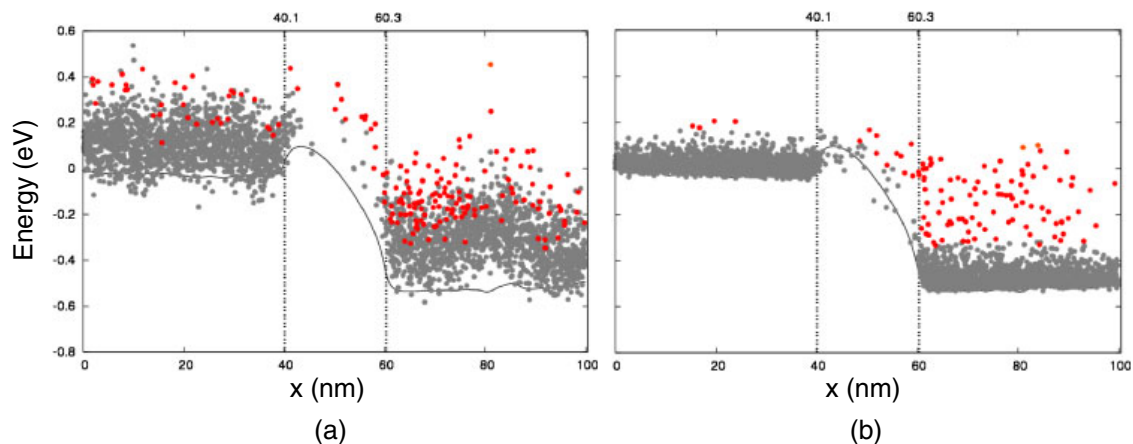


図 1.5 ダブルゲート MOSFET における電子分布. (a) 電子間相互作用を考慮に入れた自己無撞着なモンテカルロ計算の結果, (b) 固定ポテンシャルにおける計算結果. 縦軸は伝導帯下端を基準とした電子の運動エネルギーを示す. ([33] より転載, Copyright 2011 The Japan Society of Applied Physics)

エネルギーを持った電子はチャネル中にほとんど存在しないことがわかる. この結果は, 微細チャネルにおける伝導電子の振る舞いを議論する上で, 長距離電子間相互作用を考慮することが重要であることを示唆していると考えられる.

ところが, 現在までに行われてきた多くの研究は量子力学的アプローチの中で多電子に対する長距離電子間相互作用を扱っていない [50–69]. これは長距離電子間相互作用を取り入れた多電子系の取り扱いの困難さに起因する. 本研究では, 2 電子系での厳密計算との比較により結果の妥当性を比較した上で, 時間依存ハートリー・フォック近似を用いることにより 3 電子以上の多電子時間発展計算を行い, 電子輸送特性に長距離電子間相互作用が与える影響について議論する.

1.4 これまでの研究

長距離電子間相互作用を考慮した波束ダイナミクスについて, 高田らにより 2 電子の結果が報告されている [70]. これは, 2 つのガウス型波束を初期状態とした時間発展を 2 種類の手法を用いて計算したものである. 1 つは多体基底を用いて長距離電子間相互作用を直接的に扱い, 多体問題として解く手法, もう 1 つは長距離電子間相互作用項に時間依存ハートリー・フォック近似を用いる手法である. 図 1.6 に 2 種類の長距離電子間相互作用

強度のもとで行われた計算結果を示す。まず、いずれの長距離電子間相互作用強度に対しても多体問題として解いた場合と時間依存ハートリー・フォック近似を用いた場合で大きな差異は見られず、時間依存ハートリー・フォック近似がよい近似であるということが定性的に示されている。また、長距離電子間相互作用が弱い場合 (図 1.6 (a)) と長距離電子間相互作用が強い場合 (図 1.6 (b)) の結果の比較から、長距離電子間相互作用が強い場合に電子波束はより長い時間その形を保ち、長い寿命をもつ傾向があることが分かる。これは、長距離電子間相互作用が強い場合に電子は粒子性を発現するということを示していると考えられる。

本研究では、この研究を礎とし、3 電子以上の多電子系について波束ダイナミクスの計算を行う。先に述べたように、長距離電子間相互作用を考慮した多体問題を直接解くことは計算コスト上不可能であるが、時間依存ハートリー・フォック近似を用いることで乱雑位相近似と同等の多体相関を扱えることが示されている [71–74]。さらに、高田らの結果から時間依存ハートリー・フォック近似を用いた電子波束の時間発展計算の妥当性が示されており、本研究においても時間依存ハートリー・フォック近似を適用することで多電子系の波束ダイナミクスの計算を遂行する。

1.5 本研究の目的

本研究は微細チャネルにおける電子輸送の物理学を計算科学的手法によって解明することを目的とする。ここまで、電子伝導の物理学に関する先行研究を取り上げてきた。それらには、大きく分けて 2 つのアプローチ、古典的アプローチと量子的アプローチがある。ところが、これらの中間にあたる、古典-量子クロスオーバー領域の多電子輸送問題に対してはほとんど議論されていない。そこで、本研究では次世代デバイスの微細チャネルにおいて現れると考えられる古典-量子クロスオーバー領域の電子輸送を電子波束ダイナミクスの手法によって明らかにし、その性質を定性的に議論することで、次世代デバイスの設計指針を提案することを目指す。

1.6 本論文の構成

本論文は全 7 章で構成されている。第 1 章では研究の背景、および本研究が解決しようとする課題とアプローチについて述べてきた。第 2 章では本研究で用いた数値的計算手法

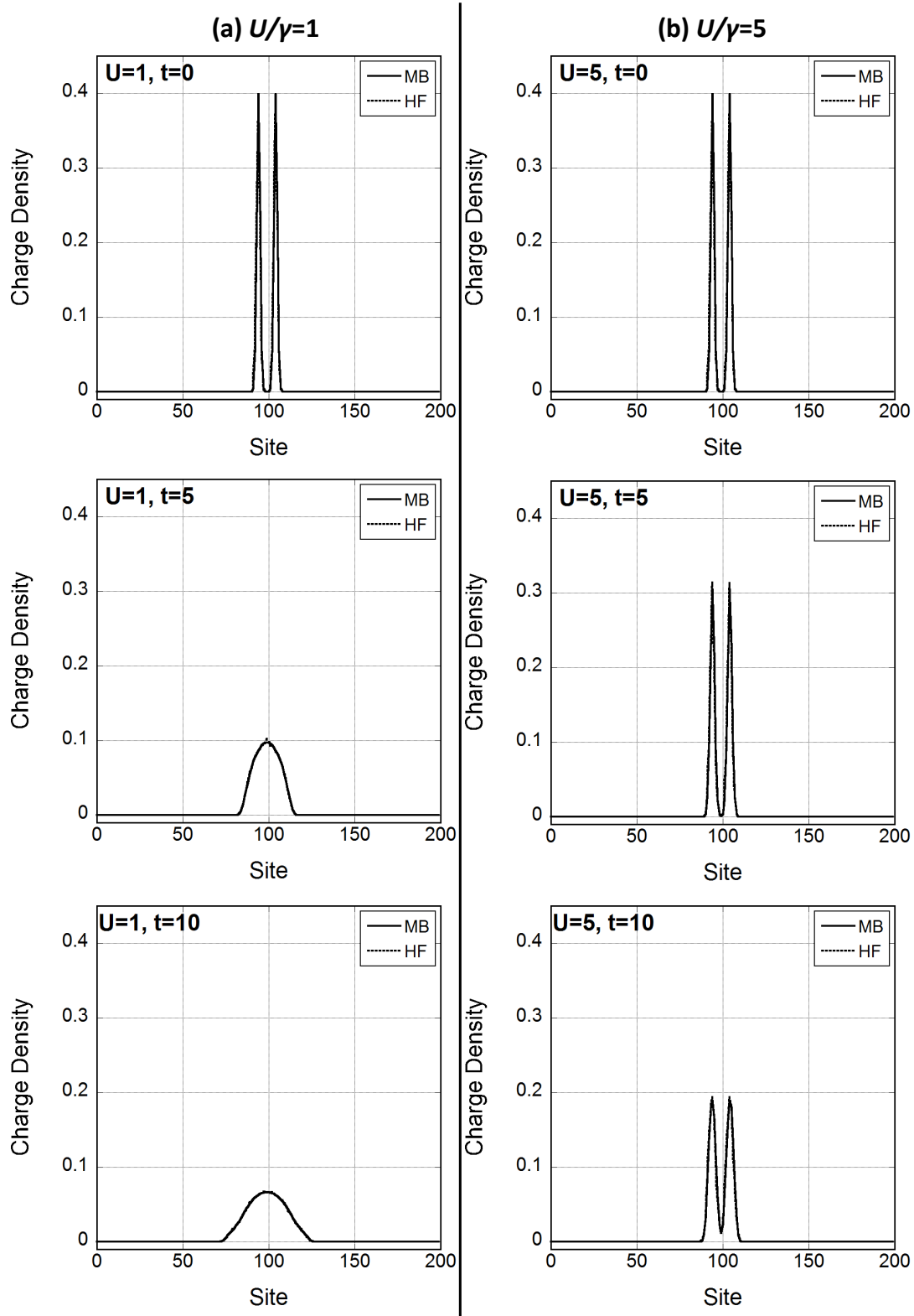


図 1.6 2つのガウス型電子波束の時間発展. (a) 長距離電子間相互作用が弱い場合, (b) 長距離電子間相互作用が強い場合の結果を示す. また, 多体相互作用を直接解いた結果 (MB) は実線, 時間依存ハートリー・フォック近似を用いた結果 (HF) は破線で示されている.

について述べる．第 3 章では量子井戸をモチーフとし，ハートリー・フォック近似のもと量子井戸の固有状態を求めることで，井戸に束縛される電子数を求め，その量子井戸に対しガウス型電子波束を外挿することでクーロン・ブロッケイドについて動的に考察を行う．第 4 章では 5 電子のガウス型波束のダイナミクスの計算結果から，多電子波束による電子輸送描像について考察する．第 5 章では一次元円形鎖モデルを用いて長時間の時間発展計算を行う中で，多電子波束描像による電子輸送について長距離電子間相互作用強度依存性を評価する．第 6 章で本研究に残された課題と今後の展望を述べ，第 7 章にて本論文を総括し結言を述べる．

1.7 まとめ

本章では，本研究の背景と現状の課題，目的について述べた．MOSFET に代表される半導体デバイスは微細化が進み，チャネル中の電子輸送は量子力学的効果が主要となる領域に到達している．ところが，これまで行われてきた理論的研究はそのほとんどが古典的描像を用いているもの，あるいは 1, 2 電子の少数電子系を扱ったものであり，次世代デバイスでの電子輸送問題を考察する上で重要な量子効果と長距離電子間相互作用を取り扱った多体計算がほとんど行われていない．そこで本研究では，古典-量子クロスオーバー領域の電子輸送問題について，多電子波束ダイナミクスの手法をもってアプローチし，その特性を考察することで次世代デバイスの設計指針を提案することを目的とする．

第 2 章

計算手法

本章では本研究に用いた数値計算手法について述べる．長距離電子間相互作用を及ぼし合う量子多体系の計算は一般に計算コストの観点で困難であり，厳密計算によるダイナミクスの計算は 2 電子までが限度である．そこで本研究では長距離電子間相互作用項にハートリー・フォック近似を用いた，時間依存ハートリー・フォック方程式 (TDHF 方程式: time-dependent Hartree-Fock equation) を数値的に解くことにより考察を行う．時間依存ハートリー・フォック方程式は短時間の極限で乱雑位相近似 (RPA: random phase approximation) と同等であることから，RPA の範囲で多体相関を取り入れた多電子伝導シミュレーションを行うことができる．

2.1 半導体結晶における波動関数の基本的性質

半導体結晶格子中を運動する電子は，原子核と価電子が作るポテンシャルの影響を受ける．このため，伝導帯に励起された電子は真空中と全く同じ運動をするのではなく，媒質である結晶格子に依存した振る舞いを見せる．結晶格子を構成する電子の数は伝導電子と比較して圧倒的に多く，この影響を直接的に計算することは不可能と言ってよい．そこで，結晶格子の対称性に着目し，結晶の作るポテンシャルの影響を最小の繰り返し単位である格子定数によって特徴付けられる逆格子空間での有限波数の問題に落としこむ．

2.1.1 ブロッホの定理

本節では、結晶格子の対称性を利用した波動関数の取り扱いの基本となるブロッホの定理を導出する [76]. 簡単のため、一次元結晶をモデルとして考える. シュレーディンガー方程式は,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

と書ける. ここで $V(x)$ は結晶格子のポテンシャルである. 格子定数 a の結晶格子の作るポテンシャルは、結晶格子の持つ並進対称性から

$$V(x+a) = V(x) \quad (2.2)$$

という周期性を持つと考えられる. 格子の周期性 (2.2) から、 $\psi(x)$ が 1 つの解である場合、格子定数だけ並進移動した $\psi(x+a)$ もまた解となる. いま、式 (2.1) が 2 階の微分方程式であることから、2 つの独立解をもつことを考慮し、2 つの独立した実数解を $f(x)$, $g(x)$ とおく. このとき、 $f(x+a)$, $g(x+a)$ もまた解となるが、これらは $f(x)$ と $g(x)$ の 1 次結合で表されるはずであるから、

$$\begin{aligned} f(x+a) &= \alpha_1 f(x) + \alpha_2 g(x), \\ g(x+a) &= \beta_1 f(x) + \beta_2 g(x) \end{aligned} \quad (2.3)$$

と書ける. ここで $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ は E の実数関数である.

また、 $\psi(x)$ が 1 つの解であるとする、 $\psi(x)$ も $f(x)$, $g(x)$ の 1 次結合で表される. すなわち、

$$\psi(x) = Af(x) + Bg(x). \quad (2.4)$$

ここで A, B は実数または複素数の定数である. 式 (2.3) を用いて、 $\psi(x+a)$ は以下のよう表現できる.

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= Af(x+a) + Bg(x+a) \\ &= A(\alpha_1 f(x) + \alpha_2 g(x)) + B(\beta_1 f(x) + \beta_2 g(x)) \\ &= (A\alpha_1 + B\beta_1)f(x) + (A\alpha_2 + B\beta_2)g(x). \end{aligned} \quad (2.5)$$

いま, A と B の比を以下の式が成り立つように選んでも一般性は失われない.

$$\begin{aligned} A\alpha_1 + B\beta_1 &= \lambda A, \\ A\alpha_2 + B\beta_2 &= \lambda B \end{aligned} \quad (2.6)$$

式 (2.3), (2.5), (2.6) より,

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= (A\alpha_1 + B\beta_1)f(x) + (A\alpha_2 + B\beta_2)g(x) \\ &= \lambda Af(x) + \lambda Bg(x) \\ &= \lambda(Af(x) + Bg(x)) \\ &= \lambda\psi(x) \end{aligned} \quad (2.7)$$

となり, λ を求めることで波動関数の並進操作に対する変化を知ることができる.

λ は式 (2.6) より,

$$\begin{aligned} (\alpha_1 - \lambda)A + \beta_1 B &= 0, \\ \alpha_2 A + (\beta_2 - \lambda)B &= 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

を満たす. A と B がともに 0 でないとき,

$$\begin{vmatrix} \alpha_1 - \lambda & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

が成り立つ必要があることから, λ についての以下の 2 次方程式

$$(\alpha_1 - \lambda)(\beta_2 - \lambda) = \alpha_2 \beta_1 \quad (2.10)$$

を解くことで λ が得られる. 式 (2.10) の 2 つの解を λ_1, λ_2 と置くと,

$$\psi_1(x+a) = \lambda_1 \psi_1(x), \quad (2.11)$$

$$\psi_2(x+a) = \lambda_2 \psi_2(x) \quad (2.12)$$

と書ける.

周期ポテンシャル $V(x)$ の原点は任意にとることができるため,

$$V(x) = V(-x) \quad (2.13)$$

が成り立つようにとると, シュレーディンガー方程式 (2.1) の x に関する対称性から

$\psi_1(-x)$ も解となる. 式 (2.12) において x を $x - a$ で置きかえて,

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \lambda_1 \psi_1(x - a) \\ \therefore \psi_1(x - a) &= \frac{1}{\lambda_1} \psi_1(x)\end{aligned}\tag{2.14}$$

さらに x を $-x$ とおくと,

$$\psi_1(-(x + a)) = \frac{1}{\lambda_1} \psi_1(-x)\tag{2.15}$$

となる. 式 (2.15) と式 (2.7) を比べると, $\psi_1(-x)$ は式 (2.7) の性質を $\lambda = 1/\lambda_1$ として満たすことがわかる. さらに, λ に対する 2 次方程式 (2.10) は 2 つの解のみを持つことから, $\psi_1(-x)$ は $\psi_2(x)$ の定数倍となっている必要がある. C を定数として $\psi_1(-x) = C\psi_2(x)$ と書くと, 式 (2.15) は

$$\begin{aligned}C\psi_2(x + a) &= \frac{1}{\lambda_1} C\psi_2(x) \\ \therefore \psi_2(x + a) &= \frac{1}{\lambda_1} \psi_2(x)\end{aligned}\tag{2.16}$$

となる. 式 (2.12) との比較により,

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= \frac{1}{\lambda_1} \\ \therefore \lambda_1 \lambda_2 &= 1\end{aligned}\tag{2.17}$$

を得る.

さて, 式 (2.10) において $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ はいずれも実数であることから, λ_1, λ_2 は片方が実数であればもう一方も実数, また, 片方が複素数であればもう一方も複素数となる. λ_1, λ_2 が実数である場合, 式 (2.17) より μ を実数として,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= e^{\mu a}, \\ \lambda_2 &= e^{-\mu a}\end{aligned}$$

と書ける. このとき, 式 (2.7) は,

$$\psi(x + a) = e^{\pm \mu a} \psi(x)\tag{2.18}$$

となる. このとき, 周期 a を持ち波数 k に依存する関数 $u_k(x)$ を導入することにより, 波

動関数は

$$\psi(x) = e^{\pm\mu x} u_k(x) \quad (2.19)$$

と書くことができる。これは,

$$\begin{aligned} \psi(x+a) &= e^{\pm\mu(x+a)} u_k(x+a) \\ &= e^{\pm\mu(a+x)} u_k(x+a) \\ &= e^{\pm\mu a} e^{\pm\mu x} u_k(x) \\ &= e^{\pm\mu a} \psi(x) \end{aligned} \quad (2.20)$$

とすることで容易に確認できる。ここで $u_k(x)$ の性質

$$u_k(x+a) = u_k(x) \quad (2.21)$$

を用いた。

ところが、この解は x が大きくなると波動関数が指数関数的に増大するか、または減少してしまう形であり、結晶格子に存在する伝導電子の波動関数としては適さないことから、 λ_1, λ_2 が実数の場合は考えないこととする。

一方 λ_1, λ_2 が複素数である場合、同様の議論により、波動関数は実数 k を用いて

$$\psi(x+a) = e^{\pm ika} \psi(x), \quad (2.22)$$

$$\psi(x) = e^{\pm ikx} u_k(x) \quad (2.23)$$

と書ける。ハミルトニアンが並進対称性を持つ時に成立するこの関係は 3 次元系に容易に拡張できて、ブロッホの定理と呼ばれ、ブロッホの定理を満たす波動関数はブロッホ関数と呼ばれる。ブロッホの定理により、結晶格子における電子波動関数は格子周期での並進対称性を持つ関数 $u_k(x)$ と、その位相 $e^{\pm ikx}$ によって記述できることが示される。

さらに、実際には結晶は有限個の原子から成り立っていることから、次の周期的境界条件を考慮する必要がある。

$$\psi(x) = \psi(x+Na). \quad (2.24)$$

ここで N は結晶が含む原子数である。ブロッホの定理より、

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \psi(x + Na) \\ &= e^{ikNa}\psi(x),\end{aligned}\tag{2.25}$$

すなわち、

$$e^{ikNa} = 1\tag{2.26}$$

が成り立つ必要がある。したがって、

$$k = \frac{2\pi}{Na} \times l\tag{2.27}$$

となる。ここで $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2$ である。このように、とりうる波数として許される k は有限の個数 N 個に限定される。それぞれの k に対しスピンに対する自由度が許されることから、 N 個の原子から成り立つ結晶に対して許される状態が $2N$ 個となることが分かる。結晶格子に対し許される k で貼る空間は逆格子空間と呼ばれ、 k は2次元以上で逆格子ベクトルと呼ばれる量に他ならない。

以上に示されるように、結晶格子の並進対称性と周期的境界条件を考慮することで、実空間で結晶を構成する無限の電子を、逆格子空間における有限の波数の問題に帰着できる。

2.1.2 タイトバインディング近似

結晶格子によるポテンシャルが周期的であるという前提の下、波動関数はブロッホの定理を満たすことを前節で示した。結晶格子によるポテンシャルの影響を伝導電子の運動エネルギーと比べた際の大小関係により、2種類の近似法が知られている。連続的なエネルギー準位をもつ自由な伝導電子から議論を始め、結晶格子による摂動を受けるという立場で、伝導電子の運動エネルギーと比べ結晶格子のポテンシャルが極めて小さいと見る手法は、ほとんど自由な電子 (nearly-free-electron) の近似として知られて、例えば典型金属中の電子の運動に対する記述手法として用いられている。一方、これと対照的に結晶格子のポテンシャルが極めて強いと考え、原子における離散的なエネルギー準位を前提とし、波動関数を原子軌道関数の重ね合わせで表現する手法があり、タイトバインディング (tight-binding) 近似あるいは強結合近似と呼ばれている。本研究では半導体における電子の伝導現象を議論するという目的から、タイトバインディング近似を用いて議論を進める。

並進対称性 $V(x) = V(x + a)$ を有する格子ポテンシャルにおける波動関数は、ブロッホの定理 (2.23) によって、

$$\psi_{nk}(x + a) = e^{ika} \psi_{nk}(x) \quad (2.28)$$

を満たすことが要請される。式 (2.28) を満たす関数として、結晶格子を構成する各原子に局在した関数であるワニエ関数 $w_n(x - X_j)$ を基底とした波動関数を考える。すなわち、

$$\psi_{nk}(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikX_j} w_n(x - X_j) \quad (2.29)$$

とする。ここで、 n は電子軌道に対する添字、 N は原子の総数、 X_j は j 番目の原子の位置である。式 (2.29) に示される波動関数を a だけ並進移動すると、

$$\begin{aligned} \psi_k(x + a) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikX_j} w(x + a - X_j) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ik(X_j + a)} w(x + a - (X_j + a)) \\ &= e^{ika} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikX_j} w(x - X_j) \\ &= e^{ika} \psi_k(x) \end{aligned} \quad (2.30)$$

となる。ここで、原子に対する添字 j に関する和について、

$$\sum_j e^{ikX_j} w(x - X_j) = \sum_j e^{ik(X_j + a)} w(x - (X_j + a)) \quad (2.31)$$

とできることを用いた。式 (2.30) より、式 (2.29) に示される波動関数はブロッホの定理を満たすため、結晶格子における電子の波動関数を表現することができるがわかる。

原子間距離が極めて広い場合には各原子は孤立しているとみなすことができ、各原子の最外殻軌道に対応する波動関数 $\phi_\alpha(x - X_j)$ とその固有値 ε_α は、

$$\mathcal{H}_{\text{atom}} \phi_\alpha(x - X_j) = \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(x - X_j) \quad (2.32)$$

を解くことで得られる。ここで $\mathcal{H}_{\text{atom}}$ は原子のハミルトニアンである。さて、結晶中の原子間距離が小さくなってきた場合、隣接する原子の最外殻軌道は相互に干渉し重なりあう。一方、内殻の電子波動関数については最外殻のそれと比較して無視できるほどに原子間干

渉に対する寄与は少ないと考えられる。隣接原子と干渉した最外殻軌道の波動関数はもはや式 (2.32) で記述されるものとは大きく異なるものとなると想定される。そこで、この最外殻原子の波動関数の基底となるワニエ関数を孤立原子系における最外殻電子の原子軌道波動関数 $\phi_\alpha(x - X_j)$ の線型結合 (LCAO: linear combination of atomic orbital) で展開する。すなわち、

$$w_n(x) = \sum_{\alpha=s, p_x, \dots} c_n^\alpha \phi_\alpha(x) \quad (2.33)$$

となる。ここで、最外殻の電子軌道を表す量子数 α については各軌道 s, p_x, p_y, p_z, \dots に対して和を取っている。式 (2.33) を式 (2.29) に代入することにより、タイトバインディング近似における波動関数

$$\psi_{nk}(x) = \sum_{\alpha=s, p_x, \dots} \sum_j e^{ikX_j} c_n^\alpha \phi_\alpha(x - X_j) \quad (2.34)$$

を得る。さらに、Dirac の記法を用いて

$$|nk\rangle = \sum_{\alpha} c_n^\alpha |\chi_k^\alpha\rangle, \quad (2.35)$$

$$|\chi_k^\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikX_j} |\alpha, j\rangle \quad (2.36)$$

と書くこともできる。ここで $|\chi_k^\alpha\rangle$ はブロッホ和と呼ばれる。

2.1.3 有効質量近似

ここまで、結晶格子のポテンシャルの扱いについて議論を進めてきた。本節では、結晶格子のポテンシャルに加え電場、磁場、不純物などの外場ポテンシャルが加わった場合の扱いについて述べる。外場ポテンシャル $V_{\text{ext}}(x)$ が結晶格子ポテンシャル $V(x)$ に対し十分ゆるやかに変化するような関数の場合には、有効質量近似の方法を用いることができる。

外場ポテンシャルの加わった一次元シュレーディンガー方程式を

$$(\mathcal{H} + V_{\text{ext}}(x)) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (2.37)$$

とする。ここで \mathcal{H} はこれまで扱ってきた結晶場でのハミルトニアンで、

$$\mathcal{H} |nk\rangle = E_{nk} |nk\rangle \quad (2.38)$$

を満たす．完全結晶の固有状態 $|nk\rangle$ は、フニエ関数を用いて

$$|nk\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikX_j} |w_n, j\rangle \quad (2.39)$$

と展開できる．この式の逆変換は、

$$|w_n, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikX_j} |nk\rangle \quad (2.40)$$

である．

フニエ関数は完全規格直交系をなすため、 $\mathcal{H} + V_{\text{ext}}(x)$ の固有状態 $|\psi\rangle$ もまた、フニエ関数で展開できる．すなわち、

$$|\psi\rangle = \sum_{n,j} f_n(X_j) |w_n, j\rangle. \quad (2.41)$$

ここで、式 (2.41) を式 (2.37) に代入すると、

$$(\mathcal{H} + V_{\text{ext}}(x)) \sum_{n,j} f_n(X_j) |w_n, j\rangle = E \sum_{n,j} f_n(X_j) |w_n, j\rangle. \quad (2.42)$$

さらに、左から $\langle w_{n'}, j'|$ をかけると、

$$\langle w_{n'}, j'| (\mathcal{H} + V_{\text{ext}}(x)) \sum_{n,j} f_n(X_j) |w_n, j\rangle = \langle w_{n'}, j'| E \sum_{n,j} f_n(X_j) |w_n, j\rangle. \quad (2.43)$$

$\langle w_{n'}, j'| \sum_{n,j} f_n(X_j) |w_n, j\rangle = f_{n'}(X_{j'})$ であることに気を付けて、

$$\sum_{n,j} f_n(X_j) \langle w_{n'}, j'| (\mathcal{H} + V_{\text{ext}}(x)) |w_n, j\rangle = E f_{n'}(X_{j'}) \quad (2.44)$$

を得る. 一方, 式 (2.38), (2.39), (2.40) より,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} |w_n, j\rangle &= \mathcal{H} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikX_j} |nk\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikX_j} \mathcal{H} |nk\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikX_j} E_{nk} |nk\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikX_j} E_{nk} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j''} e^{ikX_{j''}} |w_n, j''\rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{j''} \sum_k e^{-ik(X_j - X_{j''})} E_{nk} |w_n, j''\rangle
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

となることから, 式 (2.44) 左辺第1項は,

$$\begin{aligned}
 \sum_{n,j} f_n(X_j) \langle w_{n'}, j' | \mathcal{H} |w_n, j\rangle &= \sum_{n,j} f_n(X_j) \langle w_{n'}, j' | \frac{1}{N} \sum_{j''} \sum_k e^{-ik(X_j - X_{j''})} E_{nk} |w_n, j''\rangle \\
 &= \sum_{n,j} f_n(X_j) \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(X_j - X_{j'})} E_{nk} \\
 &= \sum_{n,j} E_{n,j-j'} f_n(X_j)
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

とかける. ここで,

$$E_{n,j-j'} = \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(X_j - X_{j'})} E_{nk} \tag{2.47}$$

とおいた. 以上により, 式 (2.44) は,

$$\sum_{n,j} \{\delta_{nn'} E_{n,j-j'} + \langle w_{n'}, j' | V_{\text{ext}}(x) |w_n, j\rangle\} f_n(X_j) = E f_{n'}(X_{j'}) \tag{2.48}$$

と書くことができる. なお, 式 (2.48) には近似を含まない.

さて, 式 (2.47) の逆変換

$$E_{nk} = \sum_j E_{n,j} e^{ikX_j} \tag{2.49}$$

において, $k = -i\partial_x = -i\partial/\partial x$ とおくと,

$$\begin{aligned} E_n(k = -i\partial_x) &= \sum_j E_{n,j} e^{X_j \partial_x} \\ &= \sum_j E_{n,j} \left(1 + X_j \partial_x + \frac{1}{2!} (X_j \partial_x)^2 + \cdots \right) \end{aligned} \quad (2.50)$$

となる. ところで, 任意関数 $f(x)$ を $x + X_j$ の周りで展開すると,

$$\begin{aligned} f(x + X_j) &= f(x) + X_j \partial_x f(x) + \frac{1}{2!} (X_j \partial_x)^2 f(x) + \cdots \\ &= \left(1 + X_j \partial_x + \frac{1}{2!} (X_j \partial_x)^2 + \cdots \right) f(x) \end{aligned} \quad (2.51)$$

となることを用いると, 式 (2.50) に表される演算子を $f(x)$ に作用させることで,

$$\begin{aligned} E_n(k = -i\partial_x) f(x) &= \sum_j E_{n,j} \left(1 + X_j \partial_x + \frac{1}{2!} (X_j \partial_x)^2 + \cdots \right) f(x) \\ &= \sum_j E_{n,j} f(x + X_j) \end{aligned} \quad (2.52)$$

という恒等式を得る. 式 (2.52) を用いると,

$$\begin{aligned} \sum_j E_{n,j-j'} f_n(X_j) &= \sum_l E_{n,l} f_n(X_{j'} + X_l) \\ &= \sum_l E_{n,l} f_n(x + X_l) \Big|_{x=X_{j'}} \\ &= E_n(k = -i\partial_x) f(x) \Big|_{x=X_{j'}} \end{aligned} \quad (2.53)$$

とかける. ただし $l = j - j'$ とおいた.

式 (2.53) を式 (2.48) に代入すると,

$$E_{n'}(-i\partial_x) f(x) \Big|_{x=X_j} + \sum_{n,j} \langle w_{n'}, j' | V_{\text{ext}}(x) | w_n, j \rangle f_n(X_j) = E f_{n'}(X_{j'}) \quad (2.54)$$

を得る. 式 (2.54) もまた, 近似を含まない.

さて, ここから外場ポテンシャル $V_{\text{ext}}(x)$ に対して次の近似を考える.

1. 外場ポテンシャルによるバンド間遷移は無視する. すなわち, $\langle w_{n'}, j' | V_{\text{ext}}(x) | w_n, j \rangle$ は対角成分のみを持つ.

2. 外場ポテンシャル $V_{\text{ext}}(x)$ は、結晶格子のポテンシャル $V(x)$ と比べて十分ゆっくりと変化する.

こうすることにより、式 (2.54) における外場ポテンシャル項は、

$$\langle w_{n'}, j' | V_{\text{ext}}(x) | w_n, j \rangle = \delta_{nn'} \delta_{jj'} V_{\text{ext}}(X_j) \quad (2.55)$$

とかける.

さらに、これまで結晶格子に対応した離散座標 X_j で定義されていた関数 f_n を連続変数に対して再定義する. すなわち、 f_n の包絡関数を改めて f_n と定義することにする. これにより、式 (2.54) は、

$$E_n(-i\partial_x)f_n(x) + V_{\text{ext}}(x)f_n(x) = Ef_n(x) \quad (2.56)$$

とすることができ、離散格子にマッピングされた包絡関数である f_n に対する方程式である式 (2.56) は有効質量方程式と呼ばれ、また、そのハミルトニアン $E_n(-i\partial_x) + V_{\text{ext}}$ は有効質量ハミルトニアンと呼ばれる.

ここで、伝導帯端近傍では電子のエネルギー分散が有効質量 m_e を用いて

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (2.57)$$

とかけることから、式 (2.56) は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) \right\} f_n(x) = Ef_n(x) \quad (2.58)$$

となる. この式は、電子の質量を有効質量 m_e で置き換えた時の1電子1次元のシュレーディンガー方程式と全く同じ形をしている. 今後数値計算によりこの方程式を解くことで電子の振る舞いを議論するが、式 (2.58) を解いて得られる波動関数は真の波動関数ではなく、波動関数を離散格子に局在したワニエ関数で展開した時の展開係数の包絡関数であることに注意する必要がある.

2.1.4 第二量子化

本節では、量子多体問題を議論するのに一般的に用いられる第二量子化の手法について簡単に述べる. 量子力学で考える粒子は交換対称性を持つボース粒子と反対称性を持つ

フェルミ粒子に分類される。電子はフェルミ粒子に分類され、同種粒子の交換に対し波動関数の符号が入れ替わる特徴をもつ。ここではボース粒子を起点として第二量子化の議論を進め、1粒子状態の占有数の制限という条件からフェルミ粒子に対する第二量子化の手法を導入する [74]。

1粒子の完全規格直交系 $|\nu\rangle$ から議論を始める。直交系、完全系であることはそれぞれ

$$\langle \nu | \nu' \rangle = \delta_{\nu \nu'}, \quad (2.59)$$

$$\sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu| = 1 \quad (2.60)$$

と表現される。 ν は量子数に対応し、例えば空間座標や準位などに対応させることができる。例えば、ある状態 $|\nu\rangle$ について、 \mathbf{r} を空間座標、 s をスピン自由度とした時の座標表示との対応は、

$$\phi_{\nu}(1) = \phi_{\nu}(\mathbf{r}_1, s_1) = \langle \mathbf{r}_1, s_1 | \nu \rangle \quad (2.61)$$

とかくことができる。

さて、1粒子状態から出発して、交換対称性をもつ N 体波動関数

$$\Phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(1, \dots, N) = A \sum_P P \{ \phi_{\nu_1}(1) \dots \phi_{\nu_N}(N) \} \quad (2.62)$$

を構成することができる。ここで A は正規化定数であり、和は全ての $(\nu_1 \dots \nu_N)$ の置換に対してとる。交換対称性をもつ任意の N 体波動関数はこの基底を用いてかくことができ、

$$\Psi(1, \dots, N) = \sum_{\nu_1 \dots \nu_N} a_{\nu_1 \dots \nu_N} \Phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(1, \dots, N) \quad (2.63)$$

となる。さらに、それぞれの1粒子状態に対して数字 $\nu = 1, 2, \dots$ を与えることで、波動関数 $\Phi_{\nu_1 \dots \nu_N}$ を1つの状態を占める粒子の数、すなわち占有数 $\{n_{\nu}\}$ に対応させることができる。すべての状態にある粒子数を足し合わせると系の粒子数に一致するため、

$$\sum_{\nu} n_{\nu} = N \quad (2.64)$$

が成り立つ。また,

$$\begin{aligned}\Phi_{\{n_\nu\}}(1, \dots, N) &= \Phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(1, \dots, N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_N!}} \sum_P P \{ \phi_{\nu_1}(1) \dots \phi_{\nu_N}(N) \} \quad (2.65)\end{aligned}$$

とかける。最後の式変形において波動関数の正規化定数は N 粒子の置換に対する場合の数が全部で $N!$ 通りであることを用いて決めた。式 (2.65) はボース粒子系の波動関数を記述することができる。

粒子の交換に対し反対称である場合について全く同じ議論を行うことで、フェルミ粒子系の波動関数を求めることができる。ふたたび 1 粒子状態から出発し、反対称性ををもつ N 体波動関数を書き下すと,

$$\Phi_{\nu_1 \dots \nu_N}(1, \dots, N) = A \sum_P \text{sign}(P) \{ \phi_{\nu_1}(1) \dots \phi_{\nu_N}(N) \}. \quad (2.66)$$

ここで $\text{sign}(P)$ は符号関数で、 P が奇置換の場合には -1 、偶置換の場合には $+1$ となる関数である。また、同じ量子状態に複数の粒子があることを許さないフェルミ粒子の要請から、各状態の占有数 $n_\nu = 0, 1$ に限定される。すなわち各状態を占める場合の数 $n_1!, n_2!, \dots$ はいずれも 1 となる。

したがって、反対称な N 体粒子系を記述する波動関数は,

$$\Phi_{\{n_\nu\}}(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sign}(P) P \{ \phi_{\nu_1}(1) \dots \phi_{\nu_N}(N) \} \quad (2.67)$$

とかける。式 (2.67) はスレーター行列式と呼ばれ、フェルミ粒子系の波動関数の記述に用いられる。

さて、こうして得られた波動関数を、多体基底 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ を用いて占有数で特徴付けられるヒルベルト空間で表現することを考える。式 (2.65), (2.67) は,

$$\Phi_{\{n_\nu\}}(1, \dots, N) = \langle 1, \dots, N | n_1, n_2, \dots \rangle \quad (2.68)$$

とかくことができ、これらの状態は直交性

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\nu \dots | n_1, n_2, \dots, n_\nu \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_\nu n'_\nu} \dots \quad (2.69)$$

を満たす。

まず, ボース粒子系における消滅演算子 B_ν を以下によって定義する.

$$B_\nu |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu} |n_1, n_2, \dots, n_\nu - 1, \dots\rangle. \quad (2.70)$$

B_ν をある状態に作用させることで, 状態 ν の粒子がひとつ減少する. これにより, N 体系は $N - 1$ 体系へ変化する. B_ν の行列要素は,

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\nu, \dots | B_\nu | n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots \rangle = \sqrt{n_\nu} \delta_{n_1 n'_1} \dots \delta_{n'_\nu n_\nu - 1} \dots \quad (2.71)$$

とかける. さらに, B_ν のエルミート共役 B_ν^\dagger を用いると式 (2.71) は, 以下のようにかくこともできる.

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots | B_\nu^\dagger | n'_1, n'_2, \dots, n'_\nu, \dots \rangle = \sqrt{n_\nu + 1} \delta_{n_1 n'_1} \dots \delta_{n'_\nu n_\nu + 1} \dots \quad (2.72)$$

式 (2.72) は $|n_1, n_2, \dots\rangle$ でかける全ての基底に対して成り立つため,

$$B_\nu^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} |n_1, n_2, \dots, n_\nu + 1, \dots\rangle \quad (2.73)$$

という形で, 状態 ν の粒子をひとつ増加させる, 生成演算子 B_ν^\dagger を定義することができる.

続いて, 定義した消滅演算子, 生成演算子の交換関係を調べておく. 多体基底 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ に B_μ, B_ν^\dagger の交換子を作用させると,

1) $\nu \neq \mu$ のとき,

$$\begin{aligned} & (B_\mu B_\nu^\dagger - B_\nu^\dagger B_\mu) |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots, n_\mu, \dots\rangle \\ &= (\sqrt{n_\nu + 1} \sqrt{n_\mu} - \sqrt{n_\mu} \sqrt{n_\nu + 1}) |n_1, n_2, \dots, n_\nu + 1, \dots, n_\mu - 1, \dots\rangle \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.74)$$

2) $\nu = \mu$ のとき,

$$\begin{aligned} & (B_\nu B_\nu^\dagger - B_\nu^\dagger B_\nu) |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots\rangle \\ &= (\sqrt{n_\nu + 1} \sqrt{n_\nu + 1} - \sqrt{n_\nu} \sqrt{n_\nu}) (|n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots\rangle \\ &= |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (2.75)$$

すなわち, 交換関係は

$$[B_\mu, B_\nu^\dagger] = B_\mu B_\nu^\dagger - B_\nu^\dagger B_\mu = \delta_{\mu\nu} \quad (2.76)$$

と求められる.

同様にして,

$$\begin{aligned}
 & (B_\mu B_\nu - B_\nu B_\mu) |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots, n_\mu, \dots\rangle \\
 &= (\sqrt{n_\nu} \sqrt{n_\mu} - \sqrt{n_\mu} \sqrt{n_\nu}) |n_1, n_2, \dots, n_\nu - 1, \dots, n_\mu - 1, \dots\rangle \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

$$\begin{aligned}
 & (B_\mu^\dagger B_\nu^\dagger - B_\nu^\dagger B_\mu^\dagger) |n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots, n_\mu, \dots\rangle \\
 &= (\sqrt{n_\nu + 1} \sqrt{n_\mu + 1} - \sqrt{n_\mu + 1} \sqrt{n_\nu + 1}) |n_1, n_2, \dots, n_\nu + 1, \dots, n_\mu + 1, \dots\rangle \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{2.78}$$

となることは容易にわかる. すなわち,

$$[B_\mu, B_\nu] = [B_\mu^\dagger, B_\nu^\dagger] = 0. \tag{2.79}$$

ここで, 真空状態, すなわちどの状態にも粒子が含まれない状態を以下のように定義する.

$$|0\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle \tag{2.80}$$

真空状態に消滅演算子を作用させると, 全ての ν に対して,

$$B_\nu |0\rangle = 0 \tag{2.81}$$

となる. また, 真空状態 $|0\rangle$ と生成演算子 B_ν^\dagger を用いて多体基底を定義することができる.

$$|n_1, n_2, \dots, n_\nu, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_\nu! \dots}} \prod_\mu (B_\mu^\dagger)^{n_\mu} |0\rangle. \tag{2.82}$$

さらに, $B_\nu^\dagger B_\nu$ は状態 ν における数演算子と呼ばれ,

$$B_\nu^\dagger B_\nu |n_1, \dots, n_\nu, \dots\rangle = n_\nu |n_1, \dots, n_\nu, \dots\rangle \tag{2.83}$$

が成り立つ. すなわち, 状態 ν に含まれる粒子数 n_ν を固有値としてもつ.

さて, ここまでボース粒子系で行ってきた議論をフェルミ粒子系に置き換える. フェルミ粒子系ではそれぞれの状態にある粒子数は 0 または 1 であることから, 消滅演算子 c_ν

に対し,

$$c_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = c_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle, \quad (2.84)$$

$$c_\nu |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = 0 \quad (2.85)$$

がそれぞれ成り立つ. また, 消滅演算子のエルミート共役として生成演算子 c_ν^\dagger も定義することができて,

$$c_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle, \quad (2.86)$$

$$c_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = 0 \quad (2.87)$$

となる.

フェルミ粒子系の生成消滅演算子の反交換関係は,

$$[c_\mu, c_\nu^\dagger]_+ := c_\mu c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\mu = \delta_{\mu\nu}, \quad (2.88)$$

$$[c_\mu, c_\nu]_+ = [c_\mu^\dagger, c_\nu^\dagger]_+ = 0 \quad (2.89)$$

と求められる. さらに, フェルミ粒子系においても真空状態 $|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle$ に対し消滅演算子を作用させると全ての ν に対し

$$c_\nu |0\rangle = 0 \quad (2.90)$$

となり, ボース粒子の場合と同様に, N 体基底を

$$|n_1, \dots, n_\nu, \dots\rangle = \prod_\mu (c_\mu^\dagger)^{n_\mu} |0\rangle = c_{\nu_1}^\dagger \cdots c_{\nu_N}^\dagger |0\rangle \quad (2.91)$$

とかくことができる.

2.2 時間依存ハートリー・フォック方程式

前節までに、計算を進めるための準備が整った。ここから、本研究で用いるモデルや時間発展手法についての具体的説明を進めていく。本節では、多電子系の計算を進める上で課題となる長距離電子間相互作用の取り扱いのため導入した、時間依存ハートリー・フォック方程式 (TDHF 方程式, time-dependent Hartree-Fock equation) について述べる。時間依存ハートリー・フォック方程式は 1930 年に P. A. Dirac [77] により初めて導出され、その後核物理学や物性物理学の分野で広く用いられている。

2.2.1 導出

時間依存ハートリー・フォック方程式では、多体電子系を N 粒子のスレーター行列式 $|\rangle = |\alpha_1 \cdots \alpha^N\rangle$ で表現することから始める。 N 粒子のスレーター行列式を用いると、 N 粒子の波動関数をひとつのスレーター行列式を用いた形で以下のように近似できる。

$$|\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger \cdots c_N^\dagger |0\rangle. \quad (2.92)$$

上式において、 $|0\rangle$ は真空状態を表している。次にハミルトニアンを以下のように書く。

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{T} + \mathcal{V}, \quad (2.93)$$

$$\mathcal{T} = \sum_{\alpha, \alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'} c_\alpha^\dagger c_{\alpha'}, \quad (2.94)$$

$$\mathcal{V} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta\alpha'\beta'} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_{\beta'} c_{\alpha'}. \quad (2.95)$$

\mathcal{T} は運動項、 \mathcal{V} は電子間相互作用項に対応する。ここで、

$$\gamma_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \gamma | \beta \rangle, \quad (2.96)$$

$$\begin{aligned} v_{\alpha\beta\alpha'\beta'} &= \langle \alpha\beta | v | \alpha'\beta' \rangle \\ &= \langle \alpha^{(i)} \beta^{(j)} | V(i, j) | \alpha'^{(i)} \beta'^{(j)} \rangle - \langle \alpha^{(i)} \beta^{(j)} | V(i, j) | \beta'^{(j)} \alpha'^{(i)} \rangle \end{aligned} \quad (2.97)$$

である。

まず, 系の全エネルギー $E_{HF} = \langle |\mathcal{H}_T| \rangle$ を求める. 運動項については,

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{T}| \rangle &= \sum_{\alpha, \alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'} \langle |c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha'}| \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \alpha'} \gamma_{\alpha\alpha'} \delta_{\alpha\alpha'} \theta_{\alpha} \\ &= \sum_i^N \gamma_{ii} \end{aligned} \quad (2.98)$$

となる. ここで θ_{α} は階段関数である.

続いて電子間相互作用項については,

$$\begin{aligned} \langle |\mathcal{V}| \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} v_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \langle |c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\beta'} c_{\alpha'}| \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^N v_{ijij} \langle |c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_j c_i| \rangle + \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^N v_{jii j} \langle |c_j^{\dagger} c_i^{\dagger} c_j c_i| \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^N (v_{ijij} - v_{jii j}) \langle |c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_j c_i| \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N v_{ijij} \end{aligned} \quad (2.99)$$

と求められる. 以上より, 全エネルギーは,

$$E_{HF} = \sum_i^N \gamma_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N v_{ijij} \quad (2.100)$$

となる. 全エネルギーを最小化させる一粒子状態を求めるために, 時間依存シュレーディンガー方程式の変分方程式を考える.

$$\delta(E_{HF} - i \frac{\partial}{\partial t} \langle r|r \rangle) = 0. \quad (2.101)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \delta E_{HF} &= \langle \delta\phi | \gamma | r \rangle + \frac{1}{2} \sum_{h=1}^N \langle \delta\phi, h | v | r, h \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \langle k, \delta\phi | v | k, r \rangle \\ &= \langle \delta\phi | \gamma | r \rangle + \sum_{h=1}^N \langle \delta\phi, h | v | r, h \rangle. \end{aligned} \quad (2.102)$$

すなわち,

$$\langle \delta\phi | \gamma | r \rangle + \sum_{h=1}^N \langle \delta\phi, h | v | r, h \rangle = i \frac{\partial}{\partial t} \langle \delta\phi | r \rangle \quad (2.103)$$

となる. 上式より, 次の TDHF 方程式を得る.

$$\mathcal{H}_T | r \rangle = i \frac{\partial}{\partial t} | r \rangle. \quad (2.104)$$

2.2.2 直交性の保存

次に, 初期状態で直交している波動関数はその直交性を保つことを示す. TDHF 方程式を直交した波動関数を初期状態として用いた形で書きかえると,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q^I | r \rangle &= \int \langle q^I | \mathcal{H}_0 | q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II} | r \rangle \\ &+ \sum_s \int \langle q^I | \mathcal{B}_{ss} | q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II} | r \rangle - \sum_s \int \langle q^I | \mathcal{B}_{sr} | q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II} | s \rangle, \end{aligned} \quad (2.105)$$

$$\langle q^I | \mathcal{B}_{sr} | q^{II} \rangle = \iint \langle s | q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^I q^{III} | \mathcal{V} | q^{II} q^{IV} \rangle dq^{IV} | r \rangle. \quad (2.106)$$

式 (2.105) の右辺において, 第 1 項は運動項であり, 第 2 項, 第 3 項はそれぞれハートリー項, フォック項と呼ばれる. 式 (2.105) の左辺を計算すると,

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \langle u|q^I \rangle q^I \langle q^I|r \rangle \\
&= \int \langle u|q^I \rangle dq^I \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q^I|r \rangle \right] - \int \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q^I|r \rangle \right] dq^I \langle dq^I|r \rangle \\
&= \iint \langle u|q^I \rangle dq^I \langle q^I|\mathcal{H}_0 + \mathcal{B}_{ss}|q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II}|r \rangle \\
&\quad - \sum_s \iint \langle u|q^I \rangle dq^I \langle q^I|\mathcal{B}_{sr}|q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II}|s \rangle \\
&\quad - \iint \langle u|q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II}|\mathcal{H}_0 + \mathcal{B}_{ss}|q^I \rangle dq^I \langle q^I|r \rangle \\
&\quad - \sum_s \iint \langle u|q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II}|\mathcal{B}_{rs}|q^I \rangle dq^I \langle q^I|s \rangle \\
&= - \sum_s \iiint \langle u|q^I \rangle dq^I \langle s|q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^I q^{III}|\mathcal{V}|q^{II} q^{IV} \rangle dq^{IV} \langle q^{IV}|r \rangle dq^{II} \langle q^{II}|s \rangle \\
&\quad + \sum_s \iiint \langle u|q^{II} \rangle dq^{II} \langle s|q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^{II} q^{III}|\mathcal{V}|q^I q^{IV} \rangle dq^{IV} \langle q^{IV}|r \rangle dq^I \langle q^I|s \rangle \\
&= - \sum_s \iiint \langle u|q^{III} \rangle dq^{III} \langle s|q^I \rangle dq^I \langle q^{III} q^{II}|\mathcal{V}|q^{IV} q^I \rangle dq^I \langle q^I|r \rangle dq^{IV} \langle q^{IV}|s \rangle \\
&\quad + \sum_s \iiint \langle u|q^{III} \rangle dq^{III} \langle s|q^I \rangle dq^I \langle q^{III} q^I|\mathcal{V}|q^{IV} q^{II} \rangle dq^{II} \langle q^{II}|r \rangle dq^{IV} \langle q^{IV}|s \rangle.
\end{aligned} \tag{2.107}$$

ただし,

$$\langle q_1^I q_1^I|\mathcal{V}|q_2^{II} q_2^{II} \rangle = \langle q_2^I q_1^I|\mathcal{V}|q_2^{II} q_1^{II} \rangle \tag{2.108}$$

であることを用いた. 式 (2.107) の最後の 2 項は打ち消しあうため, 最終的に

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \langle u|q^I \rangle dq^I \langle q^I|r \rangle = 0, \tag{2.109}$$

$$\int \langle u|q^I \rangle dq^I \langle q^I|r \rangle = C \tag{2.110}$$

となる. ここで C は定数である. 式 (2.110) は, TDHF 方程式による時間発展によって波動関数の直交性が保存することを示している.

2.2.3 電子密度

定義により, 電子密度の総和は以下の式で表される.

$$\langle q^I | \rho | q^{II} \rangle = \sum_r \langle q^I | r \rangle \langle r | q^{II} \rangle. \quad (2.111)$$

この量は以下に示すように自乗によって変化しない.

$$\begin{aligned} \langle q^I | \rho^2 | q^{II} \rangle &= \int \langle q^I | \rho | q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^{III} | \rho | q^{II} \rangle \\ &= \sum_{rs} \int \langle q^I | r \rangle \langle r | q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^{III} | s \rangle \langle s | q^{II} \rangle \\ &= \sum_{rs} \langle q^I | r \rangle \delta_{rs} \langle s | q^{II} \rangle \\ &= \langle q^I | \rho | q^{II} \rangle. \end{aligned} \quad (2.112)$$

これは波動関数の正規直交性によるものである. $\rho^2 = \rho$ という式は, 基底状態においては $\rho = 0$ または $\rho = 1$ であることと等価である.

2.2.4 エネルギー保存

次に, 電子密度 ρ の運動方程式を求める.

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q^I | \rho | q^{II} \rangle &= \sum_r \left(\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle q^I | r \rangle \right] \langle r | q^I \rangle - \langle q^I | r \rangle \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle r | q^{II} \rangle \right] \right) \\
&= \sum_r \left(\int \langle q^I | \mathcal{H}_0 + \mathcal{B}_{ss} | q^{III} \rangle \langle q^{III} | r \rangle \langle r | q^{II} \rangle dq^{III} \right. \\
&\quad - \sum_s \int \langle q^I | \mathcal{B}_{sr} | q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^{III} | s \rangle \langle r | q^{II} \rangle \\
&\quad - \int \langle q^I | r \rangle \langle r | q^{III} \rangle \langle q^{III} | \mathcal{H}_0 + \mathcal{B}_{ss} | q^{II} \rangle dq^{III} \\
&\quad \left. + \sum_s \int \langle q^I | r \rangle \langle s | q^{III} \rangle \langle q^{III} | \mathcal{B}_{rs} | q^{II} \rangle dq^{III} \right) \\
&= \int \langle q^I | \mathcal{H}_0 + \mathcal{B}_{ss} | q^{III} \rangle \langle q^{III} | \rho | q^{II} \rangle dq^{III} \\
&\quad - \iiint \langle q^I q^V | \mathcal{V} | q^{III} q^V \rangle dq^{IV} dq^V dq^{III} \langle q^{III} | \rho | q^{IV} \rangle \langle q^V | \rho | q^{II} \rangle \\
&\quad - \int \langle q^I | \rho | q^{III} \rangle \langle q^{III} | \mathcal{H}_0 + \mathcal{B}_{ss} | q^{II} \rangle dq^{III} \\
&\quad - \iiint \langle q^{III} q^V | \mathcal{V} | q^{II} q^{IV} \rangle dq^{III} dq^{IV} dq^V \langle q^I | \rho | q^V \rangle \langle q^{IV} | \rho | q^{III} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.113}$$

式 (2.107) の値を \mathcal{B}_{sr} に代入し, 式 (2.108) を用いて式を整理すると, 第 2 項は,

$$\begin{aligned}
& - \sum_{rs} \iiint \langle q^I q^{IV} | \mathcal{V} | q^{III} q^V \rangle dq^{III} dq^{IV} dq^V \langle q^{III} | s \rangle \langle s | q^{IV} \rangle \langle q^V | r \rangle \langle r | q^{II} \rangle \\
&= - \sum_{rs} \iiint \langle s | q^{IV} \rangle dq^{IV} \langle q^I q^{IV} | \mathcal{V} | q^{III} q^V \rangle dq^V \langle q^V | r \rangle \langle q^{III} | s \rangle \langle r | q^{II} \rangle dq^{III} \\
&= - \sum_{sr} \int \langle q^I | \mathcal{B}_{sr} | q^{III} \rangle \langle q^{III} | s \rangle \langle r | q^{II} \rangle dq^{III} \\
&= - \int \langle q^I | \mathcal{A} | q^{III} \rangle \langle q^{III} | \rho | q^{II} \rangle,
\end{aligned} \tag{2.114}$$

第 4 項は,

$$\int \langle q^I | \rho | q^{III} \rangle dq^{III} \langle q^{III} | \mathcal{A} | q^{II} \rangle \tag{2.115}$$

となる．ここで， \mathcal{A} は以下に表される行列である．

$$\begin{aligned}\langle q^I | \mathcal{A} | q^{II} \rangle &= \iint \langle q^I q^{IV} | \mathcal{V} | q^{III} q^{II} \rangle dq^{III} dq^{IV} \langle q^{III} | \rho | q^{IV} \rangle \\ &= \iint \langle q^{III} q^I | \mathcal{V} | q^{II} q^{IV} \rangle dq^{III} dq^{IV} \langle q^{IV} | \rho | q^{III} \rangle\end{aligned}\quad (2.116)$$

これらの結果は次のように書き表される．

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{B} - \mathcal{A})\rho - \rho(\mathcal{H}_0 + \mathcal{B} - \mathcal{A}). \quad (2.117)$$

ただし， \mathcal{B} は次式によって表現される行列である．

$$\langle q^I | \mathcal{B}_{ss} | q^{II} \rangle = \langle q^I | \mathcal{B} | q^{II} \rangle = \iint \langle q^I q^{III} | \mathcal{V} | q^{II} q^{IV} \rangle dq^{III} dq^V \langle q^{IV} | \rho | q^{III} \rangle \quad (2.118)$$

以上，式 (2.116), (2.117), (2.118) にそれぞれ表される方程式により，電子密度に対する運動方程式を得た．これによって，個々の電子の波動関数によらず，全電子密度 ρ を扱うことによって電子の分布を知ることができる． ρ に対する運動方程式 (2.117) は，ハミルトニアン \mathcal{H} によって量子力学の基本方程式となる．

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{B} - \mathcal{A}. \quad (2.119)$$

このハミルトニアンは， ρ に依存しない項 \mathcal{H}_0 と，線形に依存する項 $\mathcal{B} - \mathcal{A}$ とによって成る．

電子間相互作用をこの方程式に取り入れた場合， \mathcal{V} は，

$$\langle q_1^I q_2^I | \mathcal{V} | q_1^{II} q_2^{II} \rangle = \frac{e^2}{x(q_1^I) - x(q_2^I)} \delta(q_1^I - q_1^{II}) \delta(q_2^I - q_2^{II}) \quad (2.120)$$

となり， \mathcal{B} および \mathcal{A} は，

$$\langle q^I | \mathcal{B} | q^{II} \rangle = e^2 \delta(q^I - q^{II}) \int \frac{\langle q^{III} | \rho | q^{III} \rangle}{x(q^I) - x(q^{III})} dq^{III}, \quad (2.121)$$

$$\langle q^I | \mathcal{A} | q^{II} \rangle = e^2 \frac{\langle q^I | \rho | q^{II} \rangle}{x(q^I) - x(q^{II})}. \quad (2.122)$$

\mathcal{B} (ハートリー項) は全電子分布によるポテンシャルであり， \mathcal{A} (フォック項) は電子の交換効果を表現する．

2.3 計算モデルとハミルトニアン

本研究では N 電子が互いに長距離電子間相互作用を及ぼし合う 1 次元系を扱う。これを表現するハミルトニアンとして、長距離電子間相互作用および外場ポテンシャルを考慮した有効質量ハミルトニアンを考える。なお、本研究では電子スピンは同種であるとし、スピン間相互作用は考慮していない。スピン自由度を考慮しないことから 1 つの状態に含むことのできる電子は 1 つである。

このハミルトニアンを書き下すと、

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{origin}} = - \sum_i \left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx_i^2} + V_{\text{ext}}(x_i) \right] + \sum_{i < j} \frac{U}{r_{ij}} \quad (2.123)$$

となる。ここで m^* は電子の有効質量、 V_{ext} は有効外場ポテンシャル、 r_{ij} は空間座標 i, j 間の距離である。本研究では特に、多電子ダイナミクスの電子間相互作用強度依存性を考察する。電子間相互作用強度はパラメータ U によって表現される。実験的には、 U の強度は物質の誘電率の逆数に比例する量であり、物質によって U の大きさは種々の値をとる。また U は微視的にはスクリーニング効果の強度を示していると考えられる。電子密度が低くスクリーニングが主要な寄与をしない場合は、長距離電子間相互作用が系において主要となり U は大きくなる。

次に、数値計算を行うために有効質量ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\text{origin}}$ を格子定数 a の離散格子サイト上にマッピングし、最近接のタイトバインディング近似を適用する。まず、空間に対する 2 階微分を空間差分形式に近似する。

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x_i) \rightarrow \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{a^2}. \quad (2.124)$$

ただし、有効質量近似における最小空間差分は結晶格子であることから、微分の空間刻み幅は a とした。式 (2.123), (2.124) により、タイトバインディングハミルトニアンは第二量子化表示を用いて

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{T}} = -\gamma \sum_i (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + h.c.) + \sum_i V_{\text{ext}}(x_i) \hat{n}_i + \sum_{i < j} \frac{U}{r_{ij}} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (2.125)$$

と書き下される [70, 85, 86]。ここで $\gamma = \hbar^2/(2m^*a^2)$ はホッピング定数であり、物質のバ

ンド幅に比例する．また, $h.c.$ は前項のエルミート共役を表す．本研究では周期的境界条件を用いるため, 1次元の円周上における電子の位置に対応させて長距離電子間相互作用を考える．この場合の電子間距離は簡単な計算によって求められ,

$$r_{ij} = a \frac{\sin(|x_i - x_j|\pi/L)}{\sin(\pi/L)} \quad (2.126)$$

となる． L は全体の格子数である．以下, 簡単のために, $\hat{\mathcal{H}}_T$ における項を 1 電子項 $\hat{\mathcal{T}}(i)$ と相互作用項 $\hat{\mathcal{G}}(i, j)$ を用いて書き換える．それぞれの項は

$$\hat{\mathcal{T}}(i) = -\gamma \sum_i (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + h.c.) + \sum_i V_{\text{ext}}(x_i) \hat{n}_i, \quad (2.127)$$

$$\hat{\mathcal{G}}(i, j) = \sum_{i < j} \frac{U}{r_{ij}} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (2.128)$$

となる．なお, 全ての計算において原子単位系 $\hbar = e = 1$ を用いることとする．

まず, タイトバインディングハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_T$ を用いた時間依存シュレーディンガー方程式は,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} |\psi_r(t)\rangle &= \hat{\mathcal{H}}_T |\psi_r(t)\rangle \\ &= (\hat{\mathcal{T}}(i) + \hat{\mathcal{G}}(i, j)) |\psi_r(t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.129)$$

ここで r は電子軌道に対する添字である．多電子の時間発展を計算するため, 前述のように長距離電子間相互作用項 $\hat{\mathcal{G}}(i, j)$ に対してハートリー・フォック近似を用いる．タイトバインディングハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_T$ を $\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}$ に置き換えると, 式 (2.129) は

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} |\psi_r(t)\rangle &= \hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} |\psi_r(t)\rangle \\ &= \hat{\mathcal{T}}(i) |\psi_r(t)\rangle + \sum_s \langle \psi_s^{(j)}(t) | \hat{\mathcal{G}}(i, j) | \psi_r^{(i)}(t) \psi_s^{(j)}(t) \rangle \\ &\quad - \sum_s \langle \psi_s^{(j)}(t) | \hat{\mathcal{G}}(i, j) | \psi_s^{(i)}(t) \psi_r^{(j)}(t) \rangle \end{aligned} \quad (2.130)$$

と書き下される．ここで右辺第 2 項のハートリー項は, 平均場近似による電子間相互作用, 右辺第 3 項のフォック項は電子の交換相互作用にそれぞれ対応する．

なお, 式 (2.130) の積分表示は以下に示される.

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} \psi_r(x_i) &= \hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} \psi_r(x_i) \\
 &= \hat{\mathcal{T}}_i \psi_r(x_i) + \left[\sum_s \sum_j \frac{U}{r_{ij}} |\psi_s(x_j)|^2 \right] \psi_r(x_i) \\
 &\quad - \sum_s \left[\sum_j \psi_s^*(x_j) \frac{U}{r_{ij}} \psi_r(x_j) \right] \psi_s(x_i). \tag{2.131}
 \end{aligned}$$

この近似では電子の長距離電子間相互作用および交換効果を取り入れることができるが, 多体相関の効果は無視することになる. ただし, 時間依存ハートリー・フォック近似は短時間極限において乱雑位相近似と等価であることが知られており, 時間依存ハートリー・フォック方程式を解くことにより, 乱雑位相近似の範囲で相関効果を取り入れることが可能である. 加えて, 第 1 章でも述べたように, 高田らによる 2 電子系における厳密計算と時間依存ハートリー・フォック近似との比較により, 電子間相互作用が弱い範囲においては時間依存ハートリー・フォック近似はよい近似であり, 定性的な結果を変えないということが報告されている [70].

2.4 時間発展計算の方法

2.4.1 形式解の導出

時間依存ハートリー・フォック方程式を数値的に解くために, 時間依存ハートリー・フォック方程式 (2.130) の形式解を求める [87]. ハミルトニアンが時間に依存しないという仮定のもとに時間微分を差分表示すると,

$$i \frac{|\psi_r(t+\tau)\rangle - |\psi_r(t)\rangle}{\tau} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} |\psi_r(t)\rangle. \tag{2.132}$$

これを $|\psi_r(t+\tau)\rangle$ について解いて,

$$\begin{aligned}
 |\psi_r(t+\tau)\rangle &= |\psi_r(t)\rangle - i \hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} \tau |\psi_r(t)\rangle \\
 &= (I + (-i \hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} \tau)) |\psi_r(t)\rangle. \tag{2.133}
 \end{aligned}$$

ここで I は単位行列である．すなわち， τ の時間発展は，元の時刻の波動関数 $|\psi_r(t)\rangle$ に $(I - i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\tau)$ を作用させることで得られることがわかる．これを繰り返し用いることで，時刻 $t + M\tau$ の波動関数は，

$$|\psi_r(t + M\tau)\rangle = (I + (-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\tau))^M |\psi_r(t)\rangle \quad (2.134)$$

とかける．ここで $\tau = \Delta t/M$ において分割数 M を大きくした $\tau \rightarrow 0$ の極限をとると，

$$\lim_{M \rightarrow \infty} (I + X/M)^M = e^X \quad (2.135)$$

であることを用いて，

$$|\psi_r(t + \Delta t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t} |\psi_r(t)\rangle \quad (2.136)$$

となり，時間依存ハートリー・フォック方程式の形式解を得る．実際にはハミルトニアンは時間依存性をもつが，時間刻み Δt を十分に小さくとり，ハミルトニアンの変化が準静的であるとみることの出来る範囲で計算を行う．

2.4.2 時間発展演算子の展開

式 (2.136) に示した時間発展演算子 $e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t}$ を波動関数に作用させることを考える．時間依存ハートリー・フォック近似においては式 (2.130) に示すようにフォック項について非対角成分が主要であることから対角化の計算コストが極めて高く，さらに前節で示したように時間発展における時間刻み Δt を十分に小さくとる必要があることから，逐次対角化計算が現実的ではない．そこで本研究ではテイラー展開により時間発展演算子を展開し，時間発展計算を行う [78]．

時間発展演算子の4次のテイラー展開は，

$$e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t} \rightarrow 1 + (-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t) + \frac{1}{2!}(-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t)^2 + \frac{1}{3!}(-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t)^3 + \frac{1}{4!}(-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\Delta t)^4 \quad (2.137)$$

となる．テイラー展開は波動関数のノルムを保たないため，時間発展計算において各電子のノルムが許容できる範囲で保存し，かつ時間刻みをより詳細にしても結果が定性的に変わらないことを確認する．

2.4.3 電子密度の定量化

時間依存ハートリー・フォック近似における電子密度は、各軌道の波動関数の自乗和として計算でき、

$$\rho(t) = \sum_r |\psi_r(t)|^2 \quad (2.138)$$

と表される。計算結果としては主に電子密度の時間発展を考察し、さらに必要に応じて他の物理量の計算を行うこととする。

2.4.4 パラメータの設定

全ての計算に用いたパラメータを表 2.1 に示す。特に、エネルギーの単位としてはホッピング定数 γ を用いることとする。

格子定数 (a)	0.5 nm
ホッピング定数 (γ)	1 eV
有効質量 (m^*)	0.15 m_0

表 2.1 計算に用いたパラメータ

2.5 まとめ

本章では、本研究に用いた計算手法の概要を導入し、具体的な時間発展手法について述べた。まず、半導体結晶格子における波動関数にブロッホの定理が成り立つことを示し、タイトバインディング近似および有効質量近似を導出した。さらに、多体基底の記述方法としての第二量子化について述べた。続いて、本研究で長距離電子間相互作用の取り扱いにおいて主要である時間依存ハートリー・フォック方程式を導出し、その性質を示した。これらの数学的・物理的準備のもとに、本研究で用いる計算モデルとハミルトニアンを示し、時間発展計算の方法について述べた。

次章以降、本章で述べた手法を基とし、必要に応じて拡張しながら計算を行った結果を示す。

第 3 章

量子井戸の固有状態とクーロン・ブロッキングに対する考察

3.1 はじめに

本章では、まず電子波束に対する長距離電子間相互作用の効果を理解するため、一次元量子井戸に束縛される電子数の電子間相互作用依存性を、ハートリー・フォック方程式を自己無撞着に解くことにより評価する。クープマンズの定理 [88] によると、電子数により軌道エネルギーが変化しない近似のもとで、ハートリー・フォック近似において系に束縛しうる最大個数の電子が束縛されている場合の最も高い占有準位のエネルギー E_{HOS} は、最大個数の電子を束縛している場合の系の全エネルギー E_N とこの系から電子を 1 つ取り去った際の全エネルギー E_{N-1} との差分と一致する ($\Delta E = E_N - E_{N-1} = E_{\text{HOS}}$)。長距離電子間相互作用が存在する場合、軌道エネルギーが変化することからクープマンズは成立しなくなるものと考えられ、過去に S. Levit ら [89] によりその結果が考察されている。本研究ではこれを数値的計算により確認する。

さらに、複数の電子が束縛された一次元量子井戸に対して電子波束を外挿し、量子井戸に束縛された電子数に対する電子波束の振る舞いを考察する。量子井戸に電子の外挿を試みた際に生じる現象はクーロン・ブロッキングとして知られている。量子井戸に電子によって占められていないエネルギー準位が残存する場合には外挿電子は量子井戸に侵入可能な一方、量子井戸のエネルギー準位が全て電子によって占められている場合、外挿電子は量子井戸に侵入することが出来ない。この現象は単原子トランジスタ [90–92] 等に既に

応用されているものの、長距離電子間相互作用を考慮した上で電子が束縛された量子井戸に対し電子を外挿した多体系の時間発展計算については先行研究がなく、数値的に現象を理解することが重要と考えられる。本研究では時間依存ハートリー・フォック近似のもと多体系のダイナミクスを計算し、外挿電子波束の振る舞いを量子井戸に束縛された電子数依存性という観点で議論する [93]。

3.2 自己無撞着なハートリー・フォック方程式の解

3.2.1 計算モデルと計算条件

本節では、一次元量子井戸に束縛される電子数の長距離電子間相互作用強度依存性を考察することを目的とし、時間に依存しないハートリー・フォック方程式の自己無撞着な解を求めるための数値計算手法について述べる。

時間に依存しないハートリー・フォック方程式を以下のようにかく。

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}\psi_r(x_i) = \varepsilon_r\psi_r(x_i). \quad (3.1)$$

続いて、ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}}$ を以下の4項に分解する。

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} = \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{V}} + \hat{\mathcal{G}} - \hat{\mathcal{F}}. \quad (3.2)$$

ここで $\hat{\mathcal{T}}, \hat{\mathcal{V}}, \hat{\mathcal{G}}, \hat{\mathcal{F}}$ はそれぞれ運動項、外場ポテンシャル項、ハートリー項、フォック項に対応する。それぞれの表式は、

$$\hat{\mathcal{T}}\psi_r(x_i) = -\gamma(\psi_r(x_{i+1}) + \psi_r(x_{i-1}) - 2\psi_r(x_i)), \quad (3.3)$$

$$\hat{\mathcal{V}}\psi_r(x_i) = V_{\text{ext}}(x_i)\psi_r(x_i), \quad (3.4)$$

$$\hat{\mathcal{G}}\psi_r(x_i) = \left[\sum_s \sum_s \frac{U}{r_{ij}} |\psi_s(x_j)|^2 \right] \psi_r(x_i) := G(x_i)\psi_r(x_i), \quad (3.5)$$

$$\hat{\mathcal{F}}\psi_r(x_i) = \sum_s \left[\sum_s \psi_s^*(x_j) \frac{U}{r_{ij}} \psi_r(x_j) \right] \psi_s(x_i) \quad (3.6)$$

となる。ここで γ はホッピング定数、 V_{ext} は有効外場ポテンシャル、 U は長距離電子間相互作用強度、 r_{ij} はサイト i, j 間の距離である。すぐにわかるように、外場ポテンシャル、ハートリー項はいずれも対角成分であり固有値・固有ベクトルを求める上で障害にならない。また、ホッピング項についても定数であり対角化において大きな問題は生じない。計

算上丁寧に扱う必要があるのは非対角成分を含むフォック項のみである。

式 (3.1) のフォック項に関する成分を以下のように整理する。

$$\sum_s \sum_j \psi_s^*(x_j) U_{ij} \psi_r(x_j) \psi_s(x_i) = \varepsilon_r \psi_r(x_i). \quad (3.7)$$

ただし, $U_{ij} = U/r_{ij}$ とした. 和の順序を入れ替えて,

$$\sum_j \sum_s \psi_s^*(x_j) U_{ij} \psi_r(x_j) \psi_s(x_i) = \varepsilon_r \psi_r(x_i). \quad (3.8)$$

波動関数の積の順序を入れ替えて,

$$\sum_j \sum_s (\psi_s^*(x_j) U_{ij} \psi_s(x_i)) \psi_r(x_j) = \varepsilon_r \psi_r(x_i). \quad (3.9)$$

これを行列形式でかくと,

$$\begin{pmatrix} \sum_s (\psi_s^*(x_1) U_{11} \psi_s(x_1)) & \sum_s (\psi_s^*(x_2) U_{21} \psi_s(x_1)) & \cdots & \sum_s (\psi_s^*(x_N) U_{N1} \psi_s(x_1)) \\ \sum_s (\psi_s^*(x_1) U_{12} \psi_s(x_2)) & \sum_s (\psi_s^*(x_2) U_{22} \psi_s(x_2)) & \cdots & \sum_s (\psi_s^*(x_N) U_{N2} \psi_s(x_2)) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_s (\psi_s^*(x_1) U_{1N} \psi_s(x_N)) & \sum_s (\psi_s^*(x_2) U_{2N} \psi_s(x_N)) & \cdots & \sum_s (\psi_s^*(x_N) U_{NN} \psi_s(x_N)) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_r(x_1) \\ \vdots \\ \psi_r(x_N) \end{pmatrix} = \varepsilon_r \begin{pmatrix} \psi_r(x_1) \\ \vdots \\ \psi_r(x_N) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

となる. ここで N は系全体のサイト数である. 左辺の行列はエルミート行列なので対角化の際には上三角行列のみを用いればよい. また, 対角項 $\sum_s (\psi_s^*(x_i) U_{nn} \psi_s(x_i))$ はハートリー項と打ち消し合うため無視してよい. 左辺の行列を改めて $\hat{\mathcal{F}}'$ とかくと, ハートリー・フォック方程式の固有状態を求めるために,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} \psi_r(x_i) = (\hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{V}} + \hat{\mathcal{G}} - \hat{\mathcal{F}}') \psi_r(x_i) \quad (3.11)$$

を解けばよいことがわかる.

これを行列形式で書き下すと,

$$\begin{pmatrix} 2\gamma + V_1 + G_1 - F'_{11} & -\gamma - F'_{21} & \cdots & -F'_{N1} \\ -\gamma - F'_{12} & 2\gamma + V_2 + G_2 - F'_{22} & \cdots & -F'_{N2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -F'_{1N} & -F'_{2N} & \cdots & 2\gamma + V_N + G_N - F'_{NN} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_r(x_1) \\ \vdots \\ \psi_r(x_N) \end{pmatrix} = \varepsilon_r \begin{pmatrix} \psi_r(x_1) \\ \vdots \\ \psi_r(x_N) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

を得る. ただし, V_i, G_i は \hat{V} および \hat{G} のサイト x_i における対角成分, F'_{ij} は $\hat{\mathcal{F}}'$ の ij 成分である.

式 (3.12) は解析的に解けないため, 適当な初期値を与えて収束問題として数値的に解く必要がある. 初期波動関数として適当な正規直交系を用い, 上の方程式を数値的に対角化してエネルギー固有値の小さな方から電子数分の固有波動関数を選び, それを用いて新たなハミルトニアンを作る. (たとえば電子数が5個なら $\varepsilon_1 \sim \varepsilon_N$ からエネルギーの小さなもの5つ選び, それに対応する $\psi(x_i)$ を用いる) ただし, 新たなハミルトニアンを作る際には古い波動関数に新しい波動関数を適当な割合 p で加える. すなわち,

$$\psi_{\text{new}} = \psi_{\text{old}} \times (1 - p) + \psi_{\text{new}} \times p. \quad (3.13)$$

この演算を繰り返すことで, 最終的に自己無撞着な波動関数を求める.

以上の計算に基づき数値的に求めた固有関数が, 真に固有関数となっているかの確認は, 時間発展の計算を行っても変化がないということを確認することで行う.

また, 固有状態を求める系としては, 幅 25 nm, 高さ 500 meV の量子井戸を用いる.

3.2.2 計算結果と考察

図 3.1 に長距離電子間相互作用が弱い場合 ($U/\gamma = 0.4$) に求めた固有状態における電子密度分布を示す. 井戸中の電子数が少ない場合には電子は井戸中に束縛されるが, 井戸の高さが有限であるために, 電子数が増えた場合には電子が井戸中に残ることが出来ず, 外に出る様子がわかる. 計算の結果から, この長距離電子間相互作用強度, 井戸の幅・深さの条件では 8 電子が井戸中に束縛され, 9 番目以降の電子は井戸の外に出ていることから, この量子井戸の容量は 8 電子であり, 最大 8 電子が井戸に束縛されることがわかる. なお, 本計算の 9 電子の場合について, 固有波動関数の空間非対称性が見られているが, これは系の非対称性によるものであり, 量子井戸に束縛された電子の波動関数を以降の考察に用いることとする.

長距離電子間相互作用を強くした場合には, 井戸中の電子が互いに反発し合うことにより, 量子井戸に束縛される電子数は減少する. 図 3.2 に示される電子間相互作用強度が $U/\gamma = 1$ の場合の結果を見ると, 同じ形状の井戸に対して束縛されるのは 6 電子であり, 7 番目以降の電子は井戸の外に出ることがわかる.

クーブマンズの定理によると, 固定軌道近似のもとで井戸に束縛される電子の中で最も大きなエネルギーをもつ電子のエネルギー E_{HOS} は, i 電子系の全エネルギー E_i と $i-1$ 電子系の全エネルギー E_{i-1} との差 $\Delta E = E_i - E_{i-1}$ と等しくなる. また, 幅 25 nm, 高さ 500 nm の量子井戸に束縛される電子数, すなわち井戸の容量 N_C は固有状態計算から得られる. 長距離電子間相互作用強度 U を変化させながら N_C と $\Delta E, E_{\text{HOS}}$ を比較したのが表 3.1 である. この結果によると, 長距離電子間相互作用が弱い場合は, ΔE と E_{HOS} はよく一致しており, クーブマンズの定理を数値的に再現できていることが示されている. 一方, 長距離電子間相互作用が強い場合は, ΔE と E_{HOS} が差は大きくなることがわかる. 本計算においては, 長距離電子間相互作用強度が異なる系に対してそれぞれ自己無撞着な波動関数を求めていることから, 長距離電子間相互作用が強い場合にエネルギー準位が広くなり, 固定軌道近似との差異が生じることが想定される. S. Levit らの報告 [89] においても, 電子間相互作用が強い系において, クーブマンズの定理が成り立たなくなることが示されており, 本計算においてもこれを再現しているものと考えられ, 数値計算手法の妥当性を支持するものと考えられる.

U	N_C	$\Delta E = E_i - E_{i-1}$	E_{HOS}	$\Delta E - E_{\text{HOS}}$
0	≥ 10	349	349	0
0.1	≥ 10	446	446	0
0.2	≥ 10	542	540	2
0.3	9	537	533	4
0.4	8	511	504	7
0.5	8	581	569	12
0.6	7	524	507	17
0.7	7	580	558	22
0.8	7	636	607	29
0.9	6	538	505	33
1.0	6	582	542	40

表 3.1 幅 25 nm, 深さ 500 meV の井戸の容量 N_C , i 電子系の全エネルギー E_i と $i - 1$ 電子系の全エネルギー E_{i-1} との差 $\Delta E = E_i - E_{i-1}$, 井戸中の束縛電子の最大エネルギー E_{HOS} をそれぞれの電子間相互作用強度 U に対して書き下した.

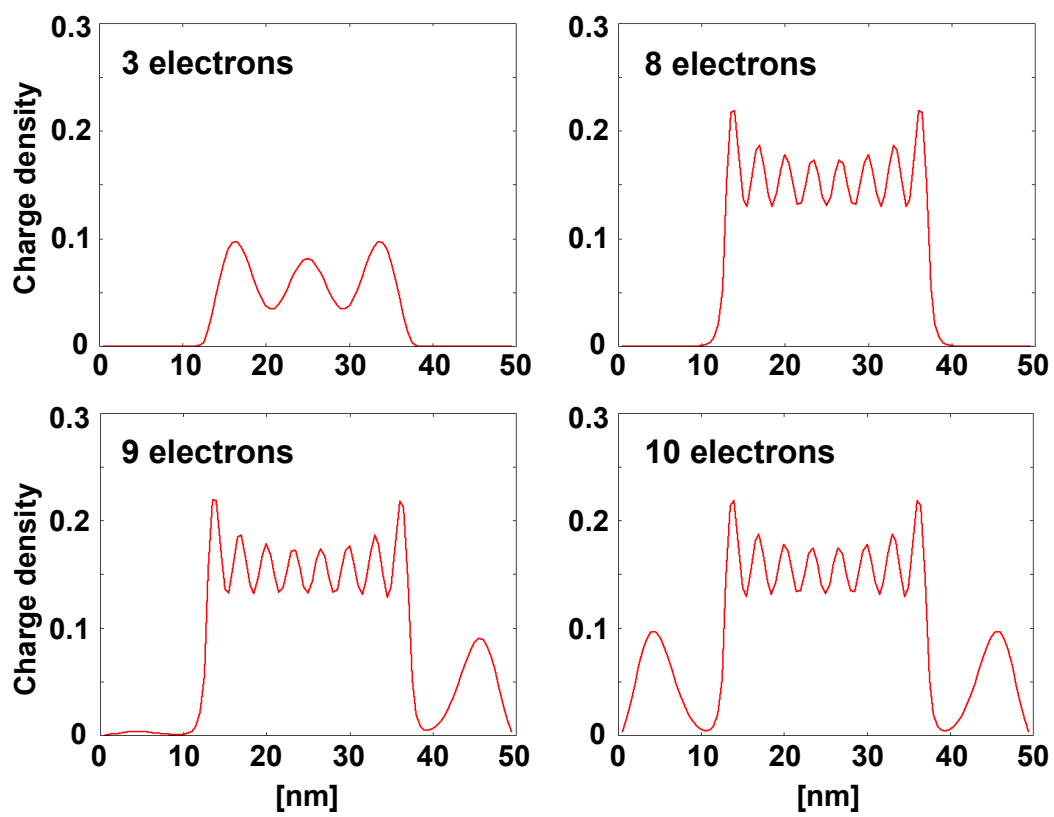


図 3.1 量子井戸の固有状態における電子密度分布 ($U/\gamma = 0.4$). 電子数は 3, 8, 9, 10 である. 8 電子は量子井戸に束縛されるが, 9 番目の電子はエネルギーが高く井戸の外に出る.

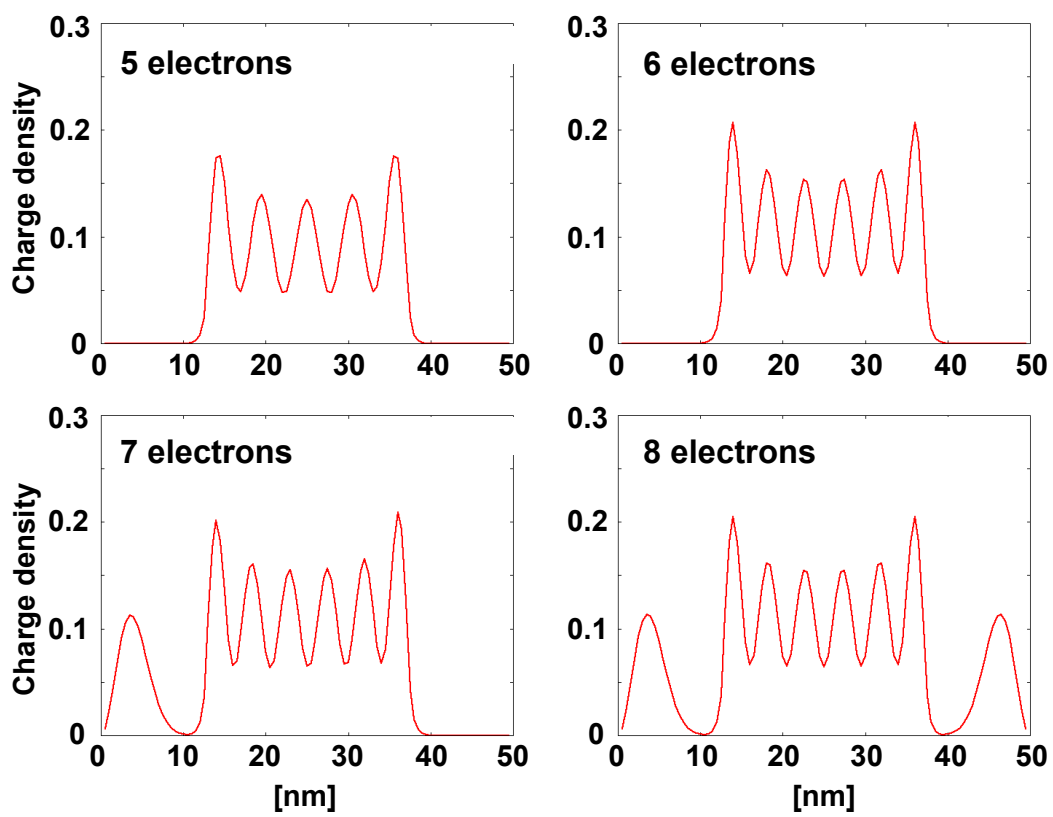


図 3.2 量子井戸の固有状態における電子密度分布 ($U/\gamma = 1$). 電子数は 5, 6, 7, 8 である. 6 電子は量子井戸に束縛されるが, 7 番目の電子はエネルギーが高く井戸の外に出る.

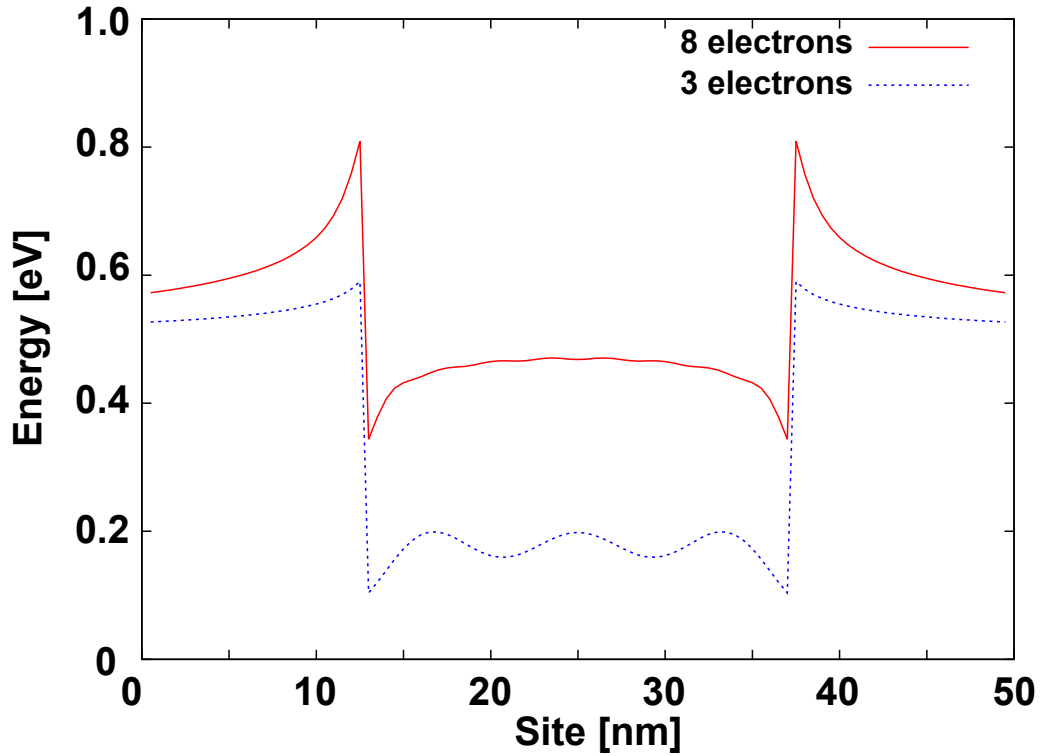


図 3.3 電子間相互作用が $U/\gamma = 0.4$ の場合に、井戸中に生じるポテンシャル構造.

3.3 クーロン・ブロッケイドに対する波束ダイナミクスによる考察

3.3.1 計算モデルと計算条件

続いて、前節で求めた電子が束縛された量子井戸に対して電子波束を外挿した場合の時間発展計算について述べる. $U/\gamma = 0.4$ の場合について、3 電子、8 電子がそれぞれ束縛されている量子井戸 (幅 25 nm, 深さ 500 meV) のまわりに生じるポテンシャル構造を図 3.3 に示す. 3 電子が束縛されている場合に対して、8 電子が束縛されている場合の方が、井戸中の電子による高いポテンシャルが井戸端に現れている様子が見て取れる. ここに電子波束を外挿した場合には、井戸中の電子数によって異なるポテンシャルにより、外挿電子波束の振る舞いに変化することが考えられる.

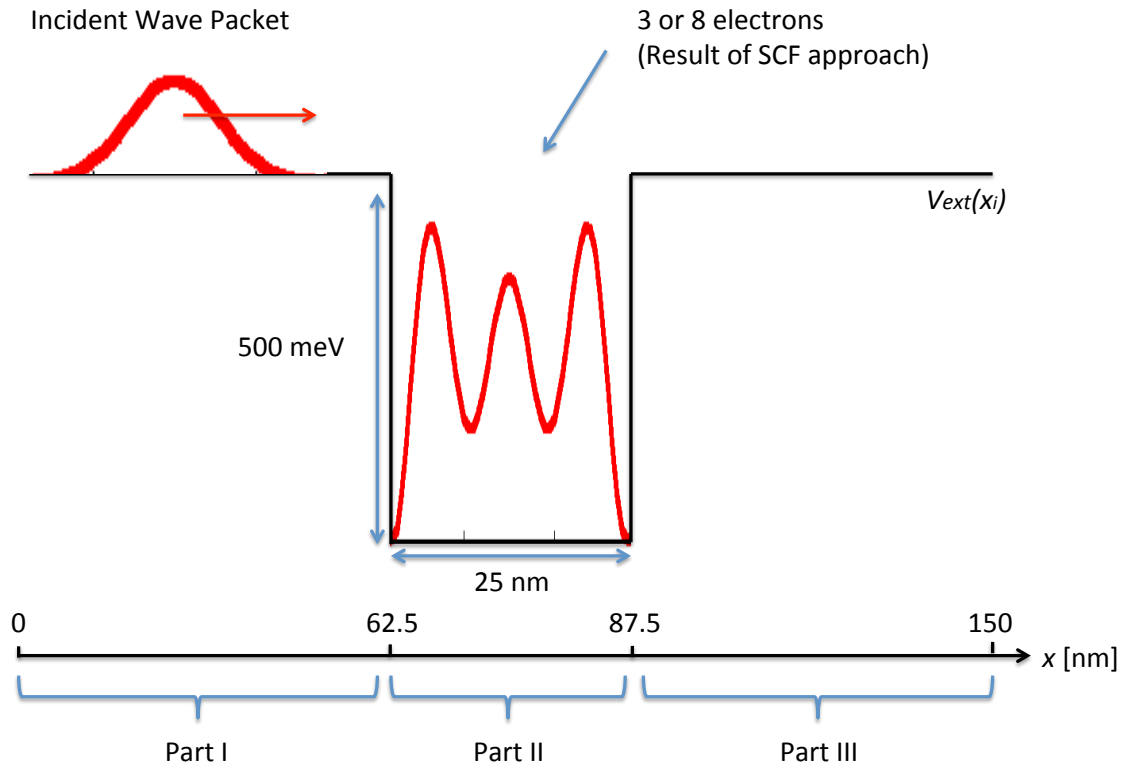


図 3.4 電子が束縛された量子井戸に対して電子波束を外挿した時間発展計算のモデル図. 井戸中の電子の状態は固有状態を求めた自己無撞着計算 (SCF: self-consistent field 計算) の結果を用いる.

図 3.5 および図 3.6 に, 3 電子, 8 電子が深さ 500 meV の井戸に束縛されている場合に電子波束を外挿した時間発展計算の結果を示す. なお, 電子間相互作用強度は $U/\gamma = 0.4$ に固定した. 外挿した電子波束には, 以下に示されるようなガウス型の電子波束を用いた.

$$\psi_r(t=0) \propto \sum_k \exp \left[-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma^2} \right] \exp[ik(x-x_0)] \quad (3.14)$$

この外挿波束は波数空間におけるガウス波束の和を取る中心を $k_0 = (4/15)\pi a$ とすることで初速度を与え, 波束の幅は波数空間で $\sigma = 0.05$ と定義した. また, 時間発展計算を行うために, 系のサイズを 150 nm に固定し, 周期的境界条件を課した. 計算のモデル図を図 3.4 に示す. また, 外挿電子波束の振る舞いを考察するため, 系を 3 つの部分に分割してそれぞれにおける外挿波束の存在割合を求める. 井戸の左側 ($x = 0 \text{ nm} \sim 62.5 \text{ nm}$) を Part I, 井戸部分 ($x = 62.5 \text{ nm} \sim 87.5 \text{ nm}$) を Part II, 井戸の右側 ($x = 87.5 \text{ nm} \sim 150 \text{ nm}$)

を Part III として, それぞれにおける外挿電子波束の存在割合を時間発展とともに追う. 外挿電子波束は井戸の左側 ($x = 37.5 \text{ nm}$) から初速度をもって井戸に向かうことになる.

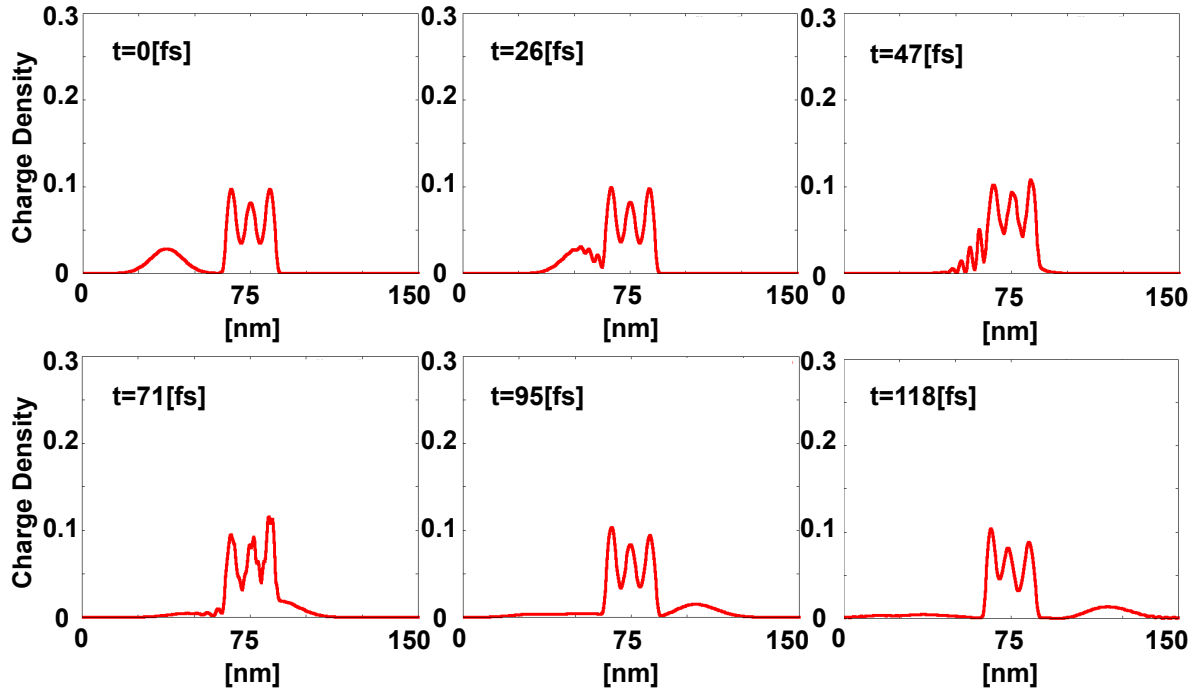


図 3.5 3 電子が束縛された量子井戸に外挿した電子波束の時間発展計算の結果.

3.3.2 計算結果と考察

図 3.5 に示される結果では, 3 電子が井戸に束縛されており, 外挿波束が初速度をもって井戸の左側から井戸に向かって運動する. この場合には, 井戸中の電子によるポテンシャルが高くないために, 外挿波束は大部分が井戸を通り過ぎて井戸の右側まで透過している様子がみてとれる. 一方, 外挿波束には井戸中に束縛されたり, 井戸に跳ね返されている成分も存在する. 図 3.6 には井戸中に 8 電子を束縛している場合の結果が示されている. 固有状態計算の結果より, この井戸の容量は 8 電子でありこれ以上の電子が井戸中に入るとはできないということが分かっている. 時間発展に伴い, 外挿波束は量子井戸へ向かって運動していくが, 大部分が井戸中の電子がつくるポテンシャルによって跳ね返されることがわかる.

図 3.7(a) および図 3.7(b) に時間発展における各時刻で, 外挿電子波束の存在割合を領

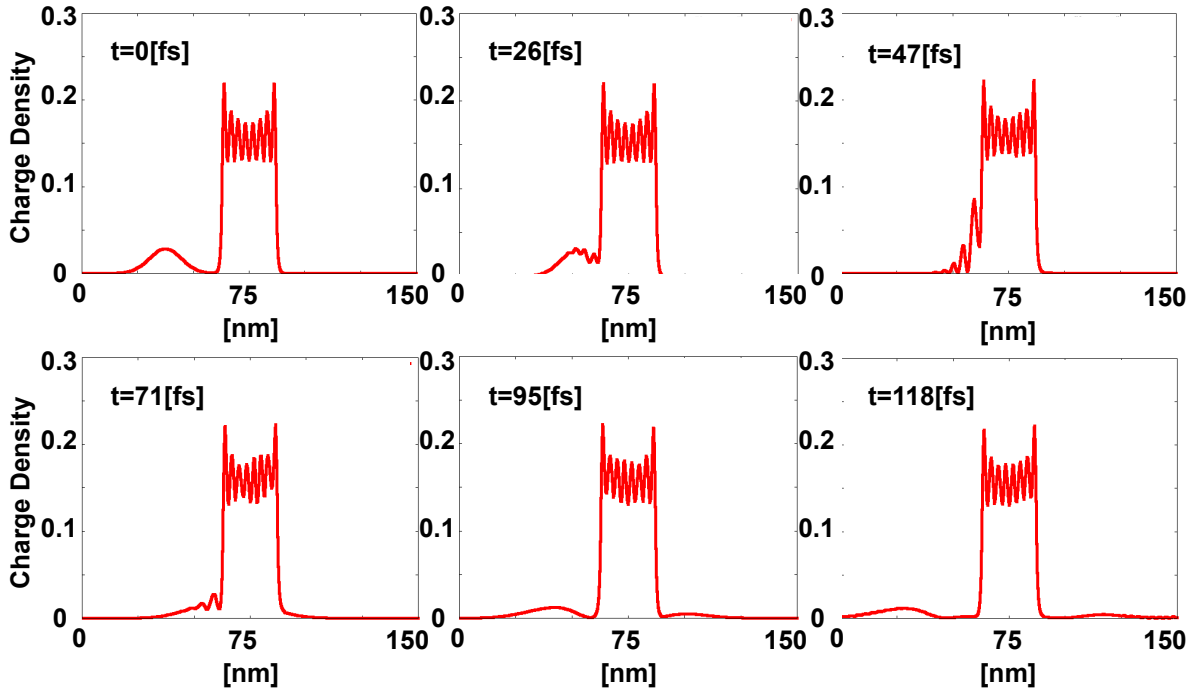
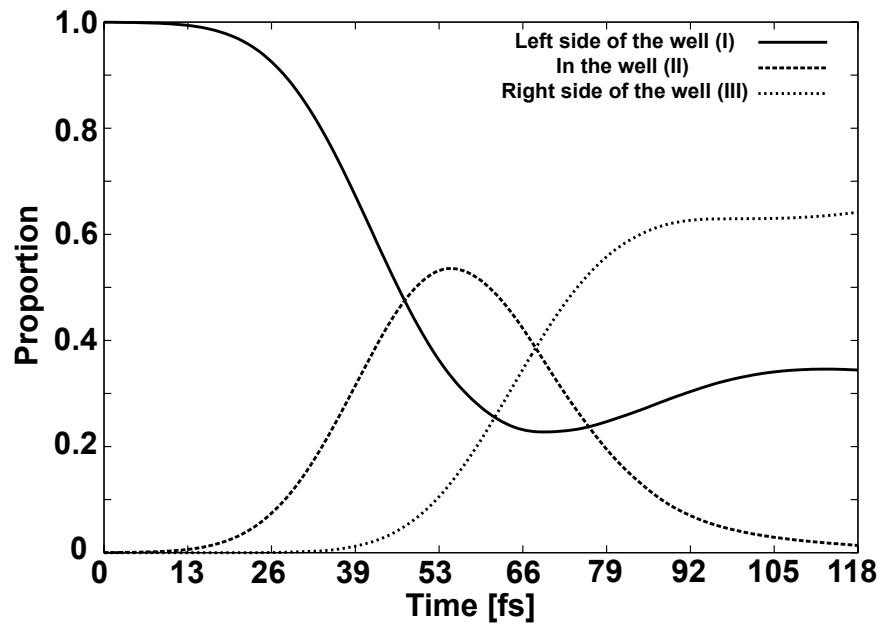


図 3.6 8 電子が束縛された量子井戸に外挿した電子波束の時間発展計算の結果.

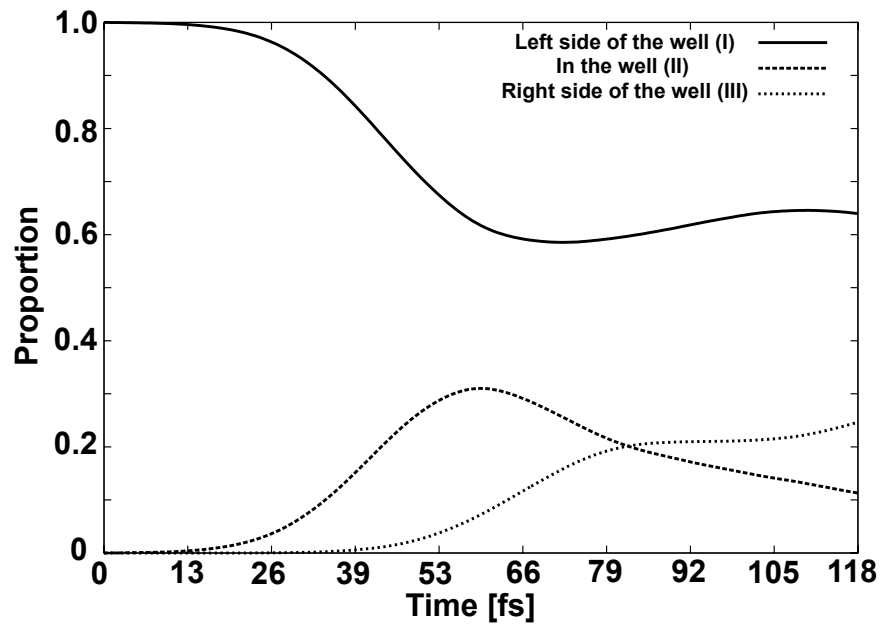
域別にプロットしたものを示す. 図 3.7(a) は 3 電子が井戸中に束縛されている場合の結果である. 初期状態においては, 外挿電子波束は全体が井戸の左側に存在することが分かる. 時間発展に伴い電子波束は井戸の方へすすみ, 井戸中の電子波束の割合が増加していく. さらに時間が経過すると, 外挿電子波束が井戸を透過することにより, 井戸の右側の割合が増加していくことが分かる. 結果として, $t = 118$ [fs] においてはおよそ 35 % の波束が反射し, 60 % 以上が井戸の右側 (Part III) に透過したことがこの図より読み取れる. 井戸中に残ったのはわずか 1 % 程度であった.

井戸中に 8 電子が束縛されている場合の結果が図 3.7(b) に示されている. 井戸中に電子が多いために外挿電子波束はより強く跳ね返され, 時間発展後には 60 % 以上が反射し, 透過したのは 25 % 程度にとどまった. また, 井戸両端の高いバリアにより, およそ 11 % が井戸中に残るといった結果となった.

井戸中の電子数を変化させた場合に外挿電子波束の反射率・透過率をプロットしたのが



(a) 3 電子が井戸に束縛されている場合



(b) 8 電子が井戸に束縛されている場合

図 3.7 外挿電子波束の存在割合の時間変化.

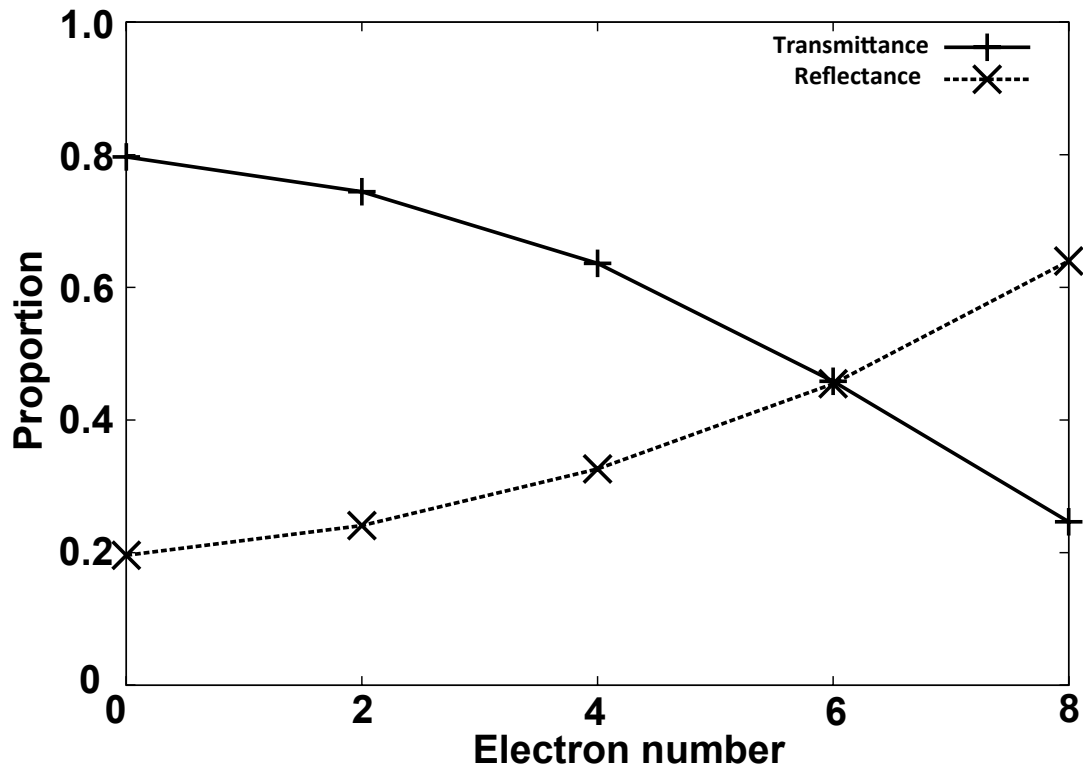


図 3.8 量子井戸中の電子数を変化させた場合の反射率と透過率.

図 3.8 である. 反射率・透過率はそれぞれ $t = 118$ fs における井戸の左側 (Part I), 右側 (Part III) に存在する外挿電子波束の割合により定義している. 井戸中の電子数が増加するに従い, 透過率は減少し, 反射率が増加する. 本計算で取り扱った量子井戸は固有状態計算の結果から 8 電子がその容量と見積もられていたが, 量子井戸に 6 電子が束縛されている時にほぼ反射率と透過率は一致し, それ以上の個数の電子が井戸に束縛されている時に反射率が透過率を上回ることがわかる.

これらの結果は, 量子ドットを用いて広く実験的に研究されているクーロン・ブロッケイド現象と対応するものと考えられる. クーロン・ブロッケイド現象を説明するためには, 量子効果を取り入れた多電子系に対し長距離電子間相互作用の効果を考慮することが不可欠である. 本研究では時間依存ハートリー・フォック近似の手法を用いることで相互作用する多電子系の計算を実現し, クーロン・ブロッケイドによる電子波束の振る舞いの変化を数値的に評価することを可能とした.

3.4 まとめ

本章では、長距離電子間相互作用を考慮した波束ダイナミクスの手法を用いて、クーロン・ブロッケイドの効果を数値的に考察した。

まず、ハートリー・フォック方程式の固有状態を数値的に求めることで、ハートリー・フォック近似の下で一次元量子井戸に束縛される電子の波動関数を求め、電子間相互作用の弱い場合にクーブマンズの定理が成立すること、また電子間相互作用の強い場合にクーブマンズの定理が成り立たなくなることを示した。この結果は先行研究と整合するものである。さらに、量子井戸に束縛される電子数の電子間相互作用依存性を評価し、電子間相互作用の強い系において量子井戸に束縛される電子数が減ることを示した。

さらに、先に求めた量子井戸の固有状態を用いて、複数の電子が束縛された量子井戸に対して電子波束を外挿したダイナミクスにおける量子井戸に束縛された電子数依存性を評価した。その結果、外挿電子の振る舞いは量子井戸に含まれる電子数に強く影響され、量子井戸に含まれる電子数が多い場合に電子波束の透過率が低下することを示した。この結果は量子井戸に対するクーロン・ブロッケイド現象と量子井戸に束縛される電子数の効果を動的に示したものである。

第 4 章

一様電界下の多電子波束ダイナミクス

4.1 はじめに

一様電界が印加された散乱のない完全結晶における単電子の時間発展は解析的に解くことができ、ブロッホ振動として知られている．ところが、相互作用する複数電子の振る舞いは、たとえ 2 電子であっても解析的に解くことは困難で、特に長距離電子間相互作用を考慮した解析解は未だ求められていない．計算科学的アプローチについても、過去に行われた研究は単電子のダイナミクス、あるいは多電子を平面波として扱ったもの、または古典的粒子描像を基本としたものであり、長距離電子間相互作用を及ぼし合う多電子のダイナミクスについてはその重要性にも関わらず深い理解がされていない．

本研究では波束描像を用いて、長距離電子間相互作用を考慮した上で多電子のダイナミクスを数値計算により考察する．長距離電子間相互作用を考慮した 2 電子ダイナミクスを議論した過去の研究 [70] では、一様電界下のガウス波束の時間発展について時間依存ハートリー・フォック近似および多体厳密計算で評価している．この報告では、長距離電子間相互作用強度に従って電子波束の寿命が伸長し、電子がより古典粒子的に振る舞うことが報告されている．また、二次元系でも一様電界下の 2 電子波束ダイナミクスについては C. M. Christoph らの多体厳密計算 [49] によるシミュレーション結果が報告されており、電界の強度の向上に伴い波束寿命が伸長し、電子波束は波動よりむしろ粒子的に振る舞う傾向があることが報告されている．

本章では過去の研究から電子数を増やし、一次元系の一様電界下での5電子ガウス波束のダイナミクスを計算することにより、複数の電子が同時に伝導する際の相互作用による振る舞いの変化を考察する [94].

4.2 計算モデルと計算条件

本計算では、一次元スピンレスタイトバインディングモデルに有効質量近似を適用したハミルトニアンに一様電界および長距離電子間相互作用の項を加え、

$$\hat{\mathcal{H}} = -\gamma \sum_i (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + h.c.) + \sum_i V_{\text{ext}}(x_i) \hat{n}_i + \sum_{i < j} \frac{U}{r_{ij}} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (4.1)$$

とする. ここで $\gamma = \hbar^2 / (2m^* a^2)$ はホッピング定数, \hat{c}_i^\dagger および \hat{c}_i はそれぞれサイト x_i における消滅演算子と生成演算子, $\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ はそれに対応する数演算子, m^* は電子の有効バンド質量, a は格子定数である. $V_{\text{ext}}(x_i)$ はサイト x_i における有効外場ポテンシャル, U は長距離電子間相互作用強度, r_{ij} はサイト x_i, x_j 間の距離を表す. 本ハミルトニアンを用いて r 番目の電子に対する時間依存シュレーディンガー方程式を書き下すと、

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_r(x_i) = \hat{\mathcal{H}} \psi_r(x_i). \quad (4.2)$$

先述のように、多電子の時間発展において長距離電子間相互作用を直接取り扱うことは困難であるため、長距離電子間相互作用項にハートリー・フォック近似を適用する.

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi_r(x_i) &= \hat{\mathcal{H}}_{\text{HF}} \psi_r(x_i) \\ &= \hat{\mathcal{T}}_i \psi_r(x_i) + \left[\sum_s \sum_j \frac{U}{r_{ij}} |\psi_s(x_j)|^2 \right] \psi_r(x_i) \\ &\quad - \sum_s \left[\sum_j \psi_s^*(x_j) \frac{U}{r_{ij}} \psi_r(x_j) \right] \psi_s(x_i). \end{aligned} \quad (4.3)$$

ここで $\hat{\mathcal{T}}_i = -\gamma \sum_i (\hat{c}_{i+1}^\dagger \hat{c}_i + h.c.) + \sum_i V_{\text{ext}}(x_i) \hat{n}_i$ は1電子項であり、右辺第2項は平均場のエネルギーを表現するハートリー項、右辺第3項は交換エネルギーを表現するフォック項である. また、一様電界として外場ポテンシャルを

$$V_{\text{ext}}(x_i) \propto -\mathcal{E} x_i \quad (4.4)$$

という形で与える．ここで \mathcal{E} はポテンシャル勾配である．本計算では長距離電子間相互作用以外の散乱を考慮していないため，非現実的なブロッホ振動が見えないよう，ポテンシャル勾配は $\mathcal{E} = 0.01$ とした．これは電界強度に換算すると 0.2 MV/cm に対応する．

時間発展計算は，式 (4.3) に表される時間依存ハートリー・フォック方程式の形式解に 4 次のテイラー展開を適用することで行う．テイラー展開はノルムの保存性を保証しないため，時間刻み Δt は十分に小さく取り，さらに小さな時間刻みに対しても定性的な結果が変化しないことを確認している．

本計算では初期状態として 5 電子分のガウス型電子波束を等間隔に配置する．初期状態の波動関数は

$$\psi_r(t=0) \propto \sum_k \exp\left[-\frac{k^2}{2\sigma^2}\right] \exp[ik(x - x_{r0})] \quad (4.5)$$

とする．ここで σ は波数空間におけるガウス波束の幅， x_{r0} は r 番目の波束の初期位置であり，初期状態における波束の間隔は 10 nm とする．波数空間で定義したガウス波束からフーリエ変換により実空間のガウス波束を形成することにより，波束が複数のエネルギー状態の重ね合わせとして表現され，波束のエネルギーや初速度を与えることが容易となる．本計算においては波数空間におけるガウス波束の幅を $\sigma = 0.5$ とした．さらに，初期配置したガウス波束はそれぞれを数値的に正規化して係数を与えた上，グラム・シュミット直交化法 (付録 B) を用いて互いに直交させている．

系のサイズは周期的境界が波束の運動に影響を与えないよう十分に大きくとり，時間発展計算は $t = 0 \text{ [fs]}$ から $t = 50 \text{ [fs]}$ の範囲で行う．

4.3 計算結果と考察

4.3.1 ガウス波束の時間発展

まず，5 電子のガウス波束の時間発展の結果を示す．図 4.1 は運動エネルギーに対し長距離電子間相互作用の強い寄与がある場合 ($U/\gamma = 10$) の，実空間における電子波束の時間発展の，各瞬間における電子密度分布 (スナップショット) である． $t = 0 \text{ [fs]}$ における波動関数は式 (4.5) で表され，5 つのガウス波束が等間隔に並んでいる．電界強度 0.2 MV/cm に対応するポテンシャル勾配を図面右側が高電位となるように与えており，電子は電界の効果を受けて高電位側へ運動する．結果を見ると，時間発展に伴い，ガウス波束は崩れなが

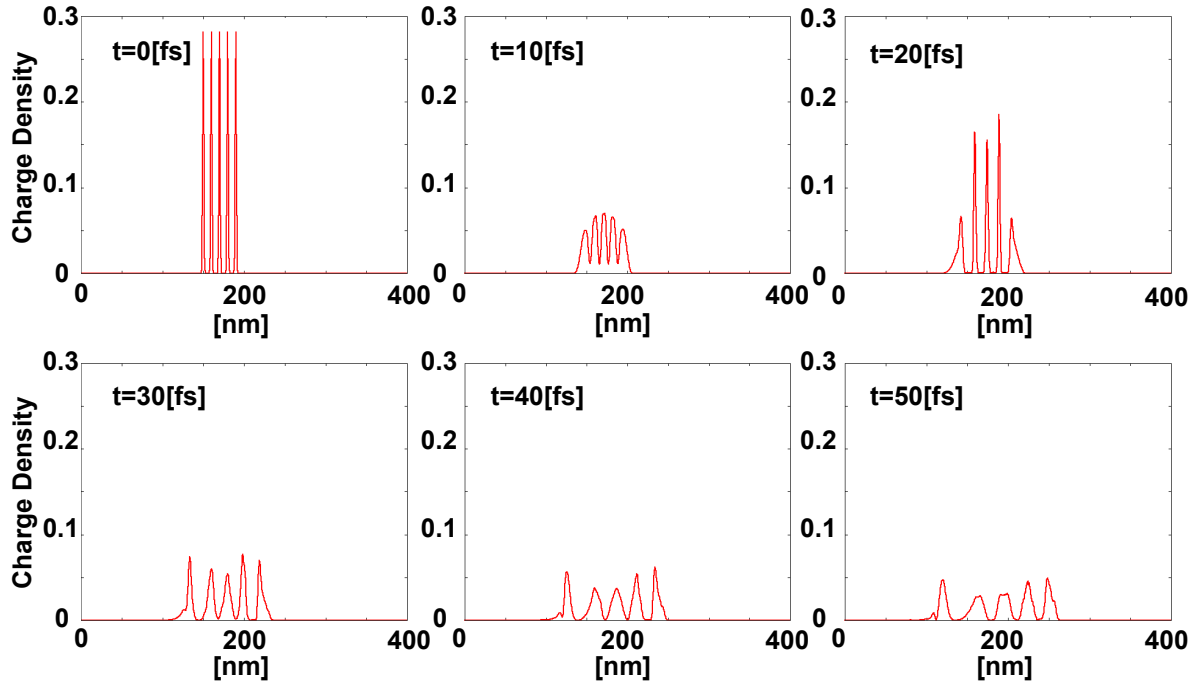


図 4.1 電子間相互作用が強い場合 ($U/\gamma = 10$) の 5 電子波束の時間発展.

らも強い長距離電子間相互作用の効果を受けて互いに強く反発し、さらに電界の作用を受けて全体としては右側へ移動している様子が見て取れる。過去の 2 電子での計算結果 [70] と同様、電子波束は重なり合うよりむしろ独立に運動する様子が見てとれ、古典的粒子性が発現していると考えられる。

続いて、長距離電子間相互作用が比較的弱く、運動エネルギーの尺度 γ と同等である場合 ($U/\gamma = 1$) の電子波束の時間発展の結果を図 4.2 に示す。時間発展に従いガウス波束は崩れるが、先に示した長距離電子間相互作用の強い場合に見られた電子同士の強い反発は見られず、互いに重なり合っている様子が見て取れる。加えて、ポテンシャル勾配の効果を受けて、5 電子の波動関数が重なり合って一体となり図面右側へ伝導していることが分かる。長距離電子間相互作用が強い場合に見られたような古典的粒子性は明らかに見られず、一方でブロッホ波に代表されるような量子的平面波とも異なり、一体となった状態を保持したまま輸送するように見える。

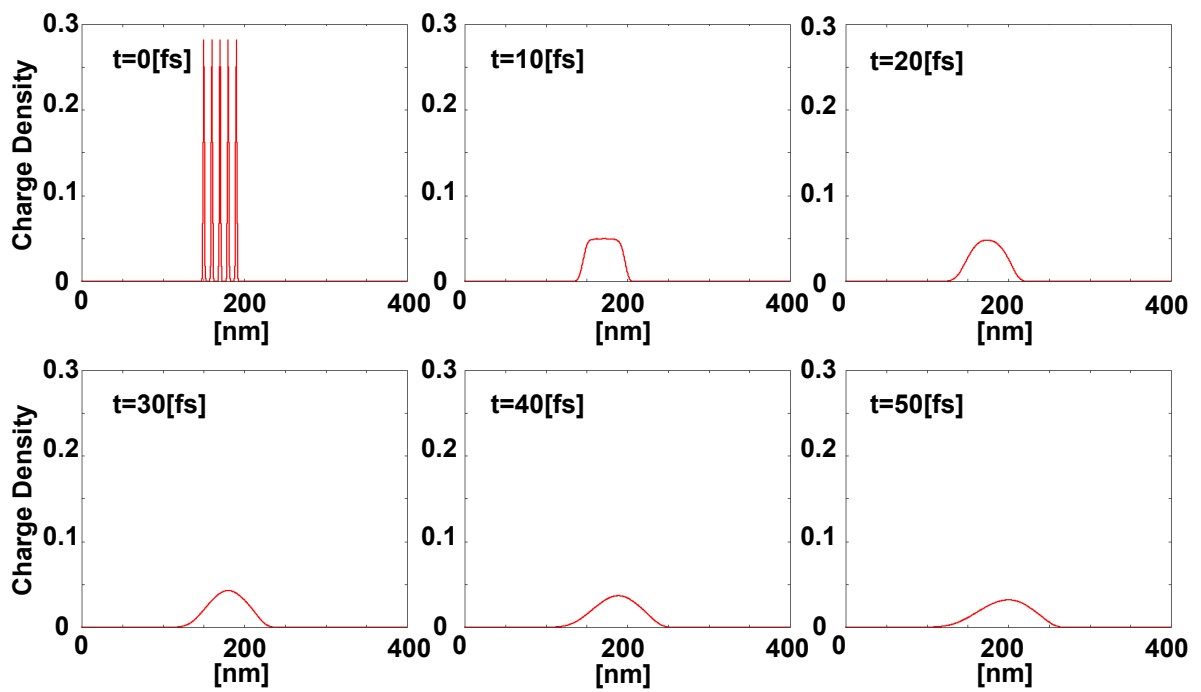


図 4.2 電子間相互作用が弱い場合 ($U/\gamma = 1$) の 5 電子波束の時間発展.

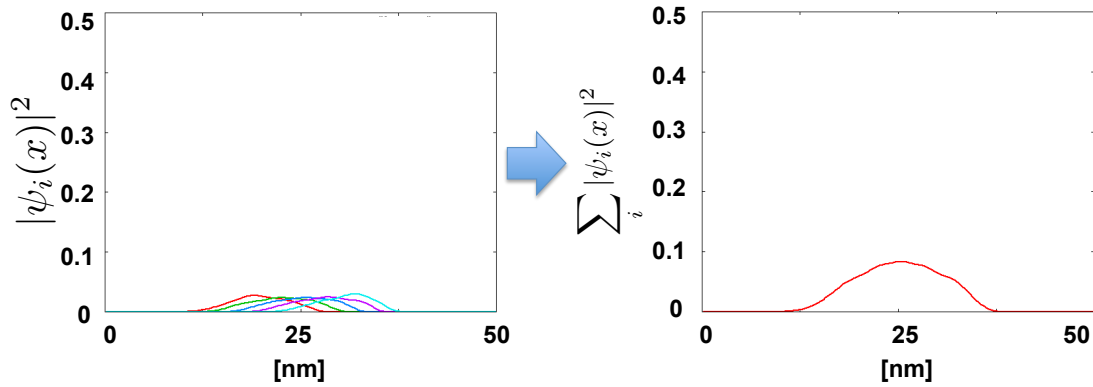


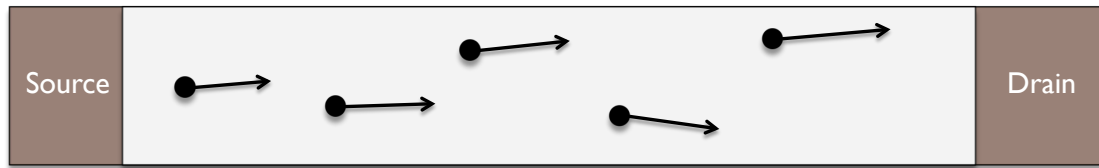
図 4.3 左図：ある瞬間におけるそれぞれの電子の波動関数の自乗。右図：同時点における各電子の波動関数の自乗和，すなわち電子密度。5 電子の波動関数が固まり，多電子波束の状態となっていることがわかる。

4.3.2 多電子波束描像の提案

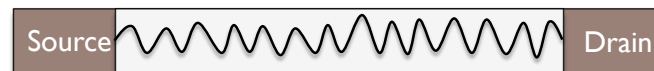
長距離電子間相互作用はマクロな視点では誘電率と紐づけられる。例えば Si の場合には，誘電率から見積もられる長距離電子間相互作用の寄与は比較的弱く ($U/\gamma \sim 0.25$)，ナノデバイスのチャネルにおける電子の輸送状態は本計算で言うところの長距離電子間相互作用の弱い場合に対応すると考えられ，現実のデバイスにおいても電子が重なりあうという現象が起きる可能性があると考えられる。図 4.3 に 5 電子のガウス波束の時間発展における，ある瞬間の各電子波動関数の自乗と，その和である電子密度を示す。長距離電子間相互作用の弱い場合にはこの図に示されるように各電子の波動関数は近接する電子から離れるよりも重なり合った状態で拡散する方がエネルギー的に利得を得られる場合が考えられ，この場合電子は重なり合っただけとして輸送する。本論文では，複数の電子が重なって一体となり輸送する，新たな電子描像を提案し，多電子から構成される波束，すなわち「多電子波束」と呼ぶこととする。

多電子波束は古典的粒子と量子的波動の中間的な状態で，図 4.4 に概念的に示されるように長距離電子間相互作用強度によって特徴付けられる。長距離電子間相互作用が強い場合，個々の電子は強く反発し独立に伝導する。一方，長距離電子間相互作用が無視できる場合には量子力学的平面波でその振る舞いを記述できる。ところが，現実の電子デバイスの微細チャネルではちょうどこの中間的な状態である多電子波束状態をとって電子は輸送す

Classical transport... Particle picture (Strong Coulomb interaction)



Quantum transport... Wave picture (Without Coulomb interaction)



Classical-quantum crossover... Multi-electron wave packets (Realistic Coulomb interaction)

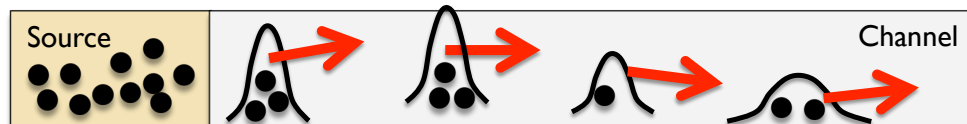


図 4.4 電子輸送の概念図. 上図: チャンネルが長い場合, 電子は古典的に振るまう. 電子間相互作用が強い場合にはこのモデルに近くなる. 中図: チャンネルが極めて短く, 電子間相互作用が存在しない場合, 電子は量子波的に振るまう. 下図: チャンネルが短く, 電子間相互作用が存在する場合, 電子は多電子波束を形成する.

るものと考えられる. さらに, 個々の多電子波束に含まれる電子の個数は長距離電子間相互作用強度により変化することが予想され, ナノデバイスにおける電子の振る舞いを考察する上で長距離電子間相互作用の効果を考慮することの重要性を示唆している. また, 本研究で取り扱っている 1 次元系では 2 次元系と比較し長距離電子間相互作用の効果がより顕著になることに加え, 電子に許される自由度が減ることから, 電子が集合的に輸送する多電子波束の形成はより顕著に見られる可能性がある. 現在検討されている次世代デバイスの多くは低次元構造を有する形で検討されており, 次元性の観点でも次世代デバイスでは長距離電子間相互作用の寄与の顕在化, および多電子波束の形成を考慮する必要があるものと考えられる.

4.4 まとめ

本章では一次元系の一様電界下における 5 電子のガウス波束の時間発展を計算し, 長距離電子間相互作用依存性を評価した. その結果, 強い長距離電子間相互作用の存在下においては電子は強く反発して古典粒子的に振る舞う一方, 現実的な弱い長距離電子間相互作用の存在下では複数の電子が一体となり「多電子波束」の状態をとって集合的に輸送することを示した. 多電子波束は古典的粒子と量子的平面波の中間的状態にあたる新しい電子描像であり, 長距離電子間相互作用強度により特徴付けられる. この結果は, 次世代ナノデバイスにおける電子輸送について考察する上で, 電子が集合的に輸送する多電子波束描像を用いることの必要性を示唆しているものと考えられる.

第 5 章

一次元鎖における多電子波束の長時間発展についての考察

5.1 はじめに

前章までに、電界が印加された微細チャネル中で電子が集合的に輸送するという「多電子波束」描像を議論してきた。一般に、電子伝導の描像は電子間相互作用強度によって特徴づけられ、電子間相互作用が無視できるほど弱い系においては電子はブロッホ波状態をとる。一方、電子間相互作用が強い極限においては電子は互いに強く干渉して局在する [95–98]。本研究でも波束ダイナミクスの計算によりこの結果を再現している一方で、現実的な弱い電子間相互作用が無視できないような場合、ブロッホ波状態と局在状態の中間的状态にあたる「多電子波束」が存在することを示している。これは、独立粒子である古典的描像と電子波がコヒーレントに重なった量子的描像の中間的描像であり、有限の電子が固まりとなって集合的に輸送する新たなモデルを提示している。

宮崎らによる Si 量子ドットを用いた実験 [99–101] によると、Si 量子ドットを用いた n 型 MOSFET のドレイン電流が連続的ではなく段階的な振る舞いをすることが報告されている。これは電子が単体ではなくある程度の個数で集合的に輸送することを示唆する結果であり、電子の集合的な輸送モデルに対して考察することがますます重要であることを示していると考えられる。

低次元系における電子が集合的に輸送する描像として知られているのが電荷密度波 (CDW: charge density wave) である [102–107]。CDW 理論では、電子は定在波として記

述され、系に印加された電界が不純物等によるポテンシャル変調により局所的に強くなり、定在波が崩れることで伝導電子が生じる。特に、伝導電子を生む電界はツェナートンネリングを生じさせる閾値電圧 E_T によって特徴付けられる。系の電界強度が E_T と同等かそれより小さい場合、CDW 理論による定在波を基礎とした電子伝導の記述は適切であると考えられる。一方、10 nm を下回るような非常に短いチャンネルにおいては、系に生じる電界は E_T より遥かに大きく、CDW 理論における定在波からツェナートンネリングにより伝導電子を生むのがもはや稀な現象ではなく、非常に高頻度で生じているような状況が考えられる。このような場合、定在波を前提とした CDW の理論はもはや適切ではなく、チャンネル中のあらゆる箇所で定常的に伝導電子が生じ、電子は揺らぎを持った準定常状態をとっていると考えられる。本研究ではこの準定常状態の電子伝導について、一次元鎖における多電子波束の時間発展計算によりアプローチする。

本章では主として1つの多電子波束に含まれる電子数の電子間相互作用依存性を時間発展計算により議論する。多電子波束に含まれる電子数は電子間相互作用が強くなるに従い減ることが想定されるが、その程度を見積もるとともに、系の電子数・系のサイズを変えた際に1つの多電子波束に含まれる電子数の変化についても考察する。多電子波束に含まれる電子数を議論するため、本計算においても時間依存ハートリー・フォック近似を用い、20 電子以上の多電子時間発展を計算する [108]。

5.2 計算モデルと計算条件

長時間の時間発展を議論する際に課題となるのは計算コストである。直線型の系を用いた場合に長時間の時間発展を扱おうとすると、非常に大きな系が必要となるため計算コストの問題をクリアできない。そこで、円形の系を採用し、比較的小さな系の中で電子が長時間運動することを可能とする。また、電子を運動させる際に電界による加速を行うと、散逸の項を入れない限り電子の速度が非現実的なほど大きくなったり、あるいは電子がブロッホ振動を起こす問題がある。この問題を解決するため、本計算では仮想磁場を導入することにより等速で長時間電子を運動させる、円電流ダイナミクスによる考察を行う。

本計算におけるハミルトニアンは、

$$\hat{\mathcal{H}} = -\gamma \sum_i \left(e^{i\theta} \hat{c}_{i+1}^\dagger \hat{c}_i + e^{-i\theta} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} \right) + \sum_{i < j} \frac{U}{r_{ij}} \hat{n}_i \hat{n}_j. \quad (5.1)$$

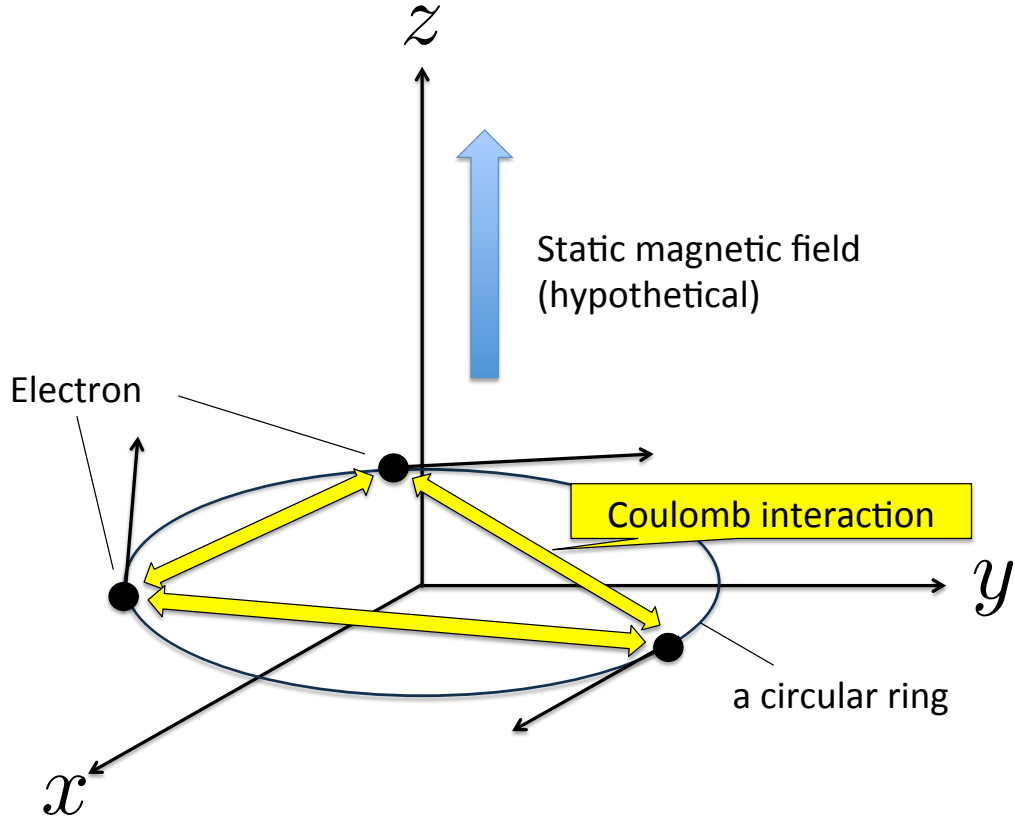


図 5.1 円電流ダイナミクスのモデル図. 電子は円形の系を, そこに仮想的に導入された静磁場によって運動する.

ここで $\gamma = \hbar^2/(2m^*a^2)$ はホッピング定数, $\hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger$ はそれぞれサイト x_i における消滅演算子および生成演算子, $\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ はそれに対応する数演算子, m^* は電子の有効質量, a は格子定数, r_{ij} はサイト x_i, x_j 間の距離である. U は長距離電子間相互作用の強度を表す.

一次元円鎖において仮想磁場により電子を運動させるため, 運動項に対し Pierels 位相 $e^{i\theta}$ を導入する [109, 110]. ここで $\theta = (2\pi/N)(\phi/\phi_0)$, $\phi_0 = h/e$ とし, 系のサイズによらず電子を一定の速度で運動させるため, 磁場の強さ ϕ は系のサイズ N に比例する形で設定し, $\theta = \pi/10$ が常に成り立つような ϕ を選ぶ.

前章までと同様, 時間発展計算は時間依存ハートリー・フォック方程式を数値的に解くことで行う. 長時間の時間発展にあたってはテイラー展開による計算精度の低下が起きないよう, 時間刻みは十分に小さく取り, 時間発展後のノルムおよび系の総エネルギーが, 初期状態と比較し 95 % の精度で保存していることを確認している. さらに, 時間刻みをより小さくした際に定性的結果が変化しないことを確認し, テイラー展開を用いた時間発展

の結果を保証している.

本計算における初期状態としては, 無限に深い量子井戸の固有状態を用いる. 量子井戸ポテンシャルの表式は,

$$V_{\text{well}}(x_i) = \begin{cases} \infty & \text{for } x_i \in [x_0, x_0 + L] \\ 0 & \text{for other } x_i \end{cases} \quad (5.2)$$

となる. ここで L は量子井戸の幅, x_0 は量子井戸の左端座標であり, それぞれ $Na/2$, $Na/4$ とした.

r 番目の準位に束縛されている電子の初期波動関数を書き下すと,

$$\psi_r(x_i, t=0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{r\pi(x_i - x_0)}{L} \quad (5.3)$$

となる. ただし, 本計算では長時間の時間発展を行うことで, 初期状態に依存しない多電子波束の振る舞いを評価する. 本論文においては式 (5.3) で表される初期状態を用いた時間発展計算の結果を提示するが, 異なる初期状態 (放物線型ポテンシャルの固有関数) を用いた場合にも定性的な結果が変化しないことを確認している.

時間発展の評価を行うため, 電子密度 $\rho(x_i, t) = \sum_s |\psi_s(x_i, t)|^2$ および自己相関関数 $S(k, t)$ をそれぞれ各計算ステップで算出する. 自己相関関数は,

$$\begin{aligned} S(k, t) &= |s(k, t)|^2 \\ &= \left| \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta\rho(x_i, t) \delta\rho(x_i + x_j, t) e^{ix_j \frac{2\pi}{Na} k} \right|^2 \end{aligned} \quad (5.4)$$

と定義される. ここで $k = 0, 1, 2, \dots, N/2$ は離散格子サイトにマッピングされた整数, $\delta\rho(x_i, t) = \rho(x_i, t) - \langle \rho(x_i, t) \rangle$ は電子密度の揺らぎである. 自己相関関数を計算することにより, 系に存在する固まりの個数, すなわち多電子波束の数が k により記述される. 例えば, $S(k, t)$ が $k = 5$ にピークを持つ場合, 系全体には5つの多電子波束が存在すると見ることができる. さらに, 本計算では恣意的な初期状態の影響を排除し, 時間的に揺らぎの大きい結果を定量化するために, 一定時間の時間発展後の自己相関関数 $S(k, t)$ の時間平均を求める.

本研究では基本条件として系のサイズを 100 nm (格子サイト表示では $N = 200$), 系に存在する電子数を 20 電子とし, 多電子波束に含まれる電子数を議論する. さらに, 系のサイズを変化させることによる効果についても考察を行う.

5.3 計算結果と考察

5.3.1 基本条件 (100 nm, 20 電子) での計算結果

基本条件として 100 nm の系における 20 電子の波動関数の時間発展を示す. 図 5.2 は長距離電子間相互作用がない場合の結果である. ここで初期状態の波動関数は式 (5.3) で表される. 時間発展に伴い電子の波動関数は初期状態から崩れて系全体に広がり, 電子間相互作用がないために重なり合ってブロッホ波状態を形成していると見ることができる.

一方, 長距離電子間相互作用が存在する場合の時間発展においては電子は異なる振る舞いを見せる. まず, 弱い長距離電子間相互作用 ($U/\gamma = 0.5$) が存在する場合の電子の時間発展の結果を図 5.3 に示す. この場合, 図 5.2 で見られたブロッホ波状態とは異なり, 電子は単に拡散するのではなく, 互いに弱く反発することにより集合的な状態を形成していることがわかる. たとえば, $t = 300$ [fs] においては, 系に 3-4 個の集合的な状態, すなわち多電子波束が存在することが見て取れる. 本計算においては系全体に 20 電子が存在するため, それぞれの多電子波束は複数の電子を含むことが考えられる. ただし, 時間発展の結果からも見て取れるように, 系に存在する多電子波束の個数は時間発展に伴い大きく揺らいでいる.

より強い長距離電子間相互作用 ($U/\gamma = 1$) が存在する場合の結果を図 5.4 に示す. 先に示したより弱い長距離電子間相互作用の場合 ($U/\gamma = 0.5$) と同様に, 電子は単に拡散するのではなく多電子波束を形成しながら輸送することがわかる. 系に存在する多電子波束の個数は弱い長距離電子間相互作用 ($U/\gamma = 0.5$) の場合と比較し増加していることから, それぞれの多電子波束に含まれる電子の個数は減少していると考えられる.

これらの結果から, 長距離電子間相互作用の存在下で電子は多電子波束を形成して伝導すること, また, それぞれの多電子波束が含む電子の個数は長距離電子間相互作用強度に伴い変化することが示唆される.

これらの時間的揺らぎの大きな多電子波束の振る舞いについて定量的な議論を行うため, 式 (5.4) に示される自己相関関数 $S(k, t)$ を求め, その時間平均 $\overline{S(k, t)}$ により多電子

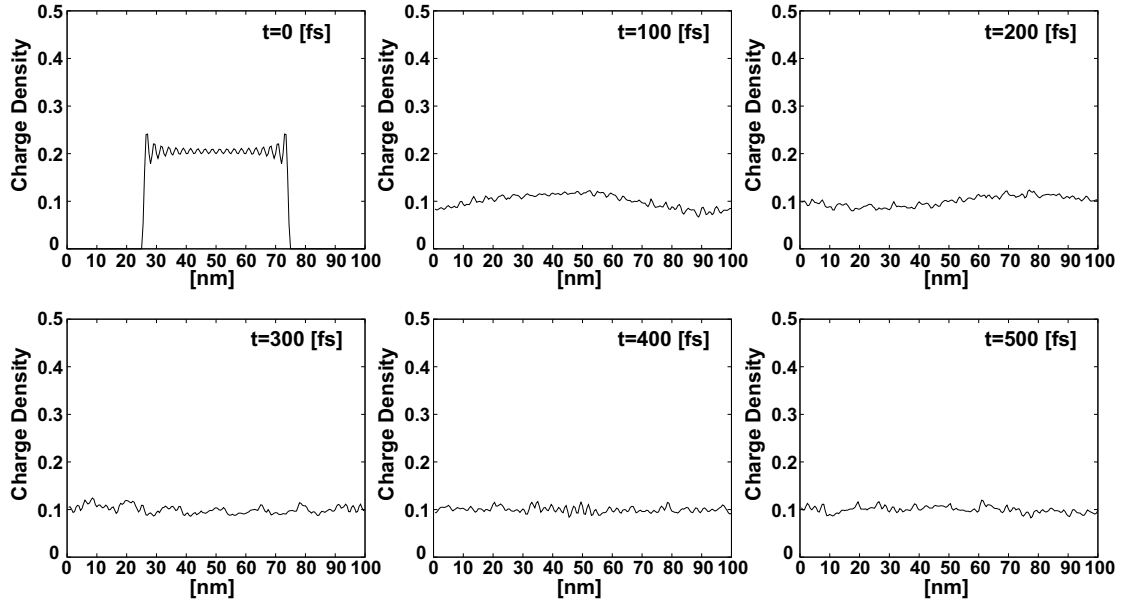


図 5.2 長距離電子間相互作用がない場合 ($U/\gamma = 0$) の電子分布の時間発展.

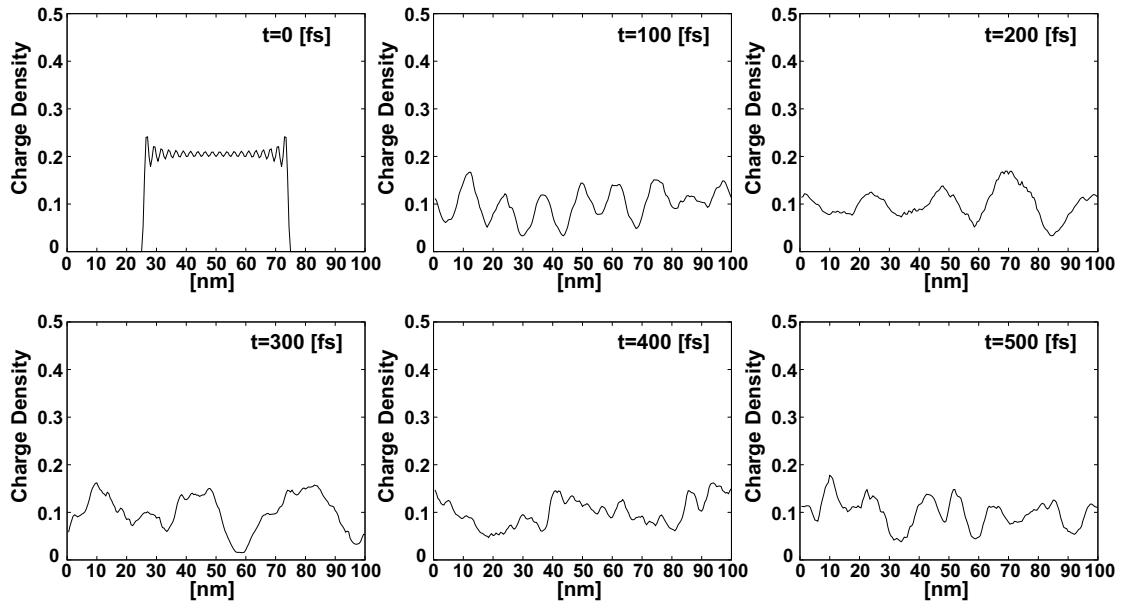


図 5.3 弱い長距離電子間相互作用が存在する場合 ($U/\gamma = 0.5$) の電子分布の時間発展.

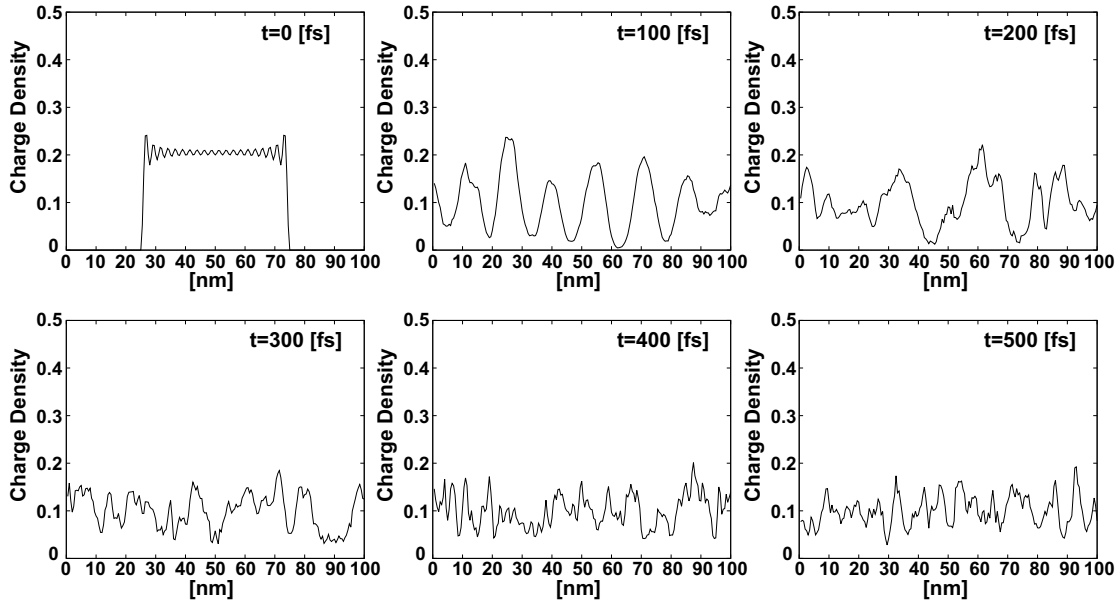


図 5.4 長距離電子間相互作用強度が $(U/\gamma = 1)$ の電子分布の時間発展.

波束の個数とそれぞれの多電子波束に含まれる電子個数の評価を行う．ここで k は系全体の多電子波束の個数を表す．時間平均は恣意的な初期状態の影響を排除するため時間発展の初期を除き, $t = 100$ [fs] から $t = 600$ [fs] にて行う．

図 5.5 に長距離電子間相互作用強度を $U/\gamma = 0$ から $U/\gamma = 1$ まで変化させ, それぞれの場合の自己相関関数の時間平均を示す．なお, 長距離電子間相互作用強度での結果の可視化において, 自己相関関数 $\overline{S(k, t)}$ はそれぞれの図面において正規化されている．

まず, 図 5.5 (a) に長距離電子間相互作用が存在しない場合の自己相関関数の時間平均を示す．この場合, 自己相関関数の時間平均 $\overline{S(k, t)}$ は $k = 1$ にピークを持つ．これは, 系全体に 1 つしか集合的状态が存在しないことを示し, すなわち, 電子波動関数が系全体に広がり互いに重なっていることを示す．図 5.5 (c) に示される $U/\gamma = 0.5$ の場合, 自己相関関数の時間平均の分布におけるピーク位置は k の大きくなる方向に動き, $k = 2 \sim 3$ 周辺にピークを持っている．これは系全体に時間的に平均して 2 ～ 3 個の多電子波束が存在することを示しており, この長距離電子間相互作用強度下においては電子が多電子波束を形成して集合的に輸送することを示唆している．

図 5.5 (a) $U/\gamma = 0$ から (e) $U/\gamma = 1$ までを通して見ると, 自己相関関数の時間平均の分布におけるピーク位置は長距離電子間相互作用が強くなるに従ってより大きな k に移動していることがわかる．言い換えると, それぞれの多電子波束が含む電子の数は長距離

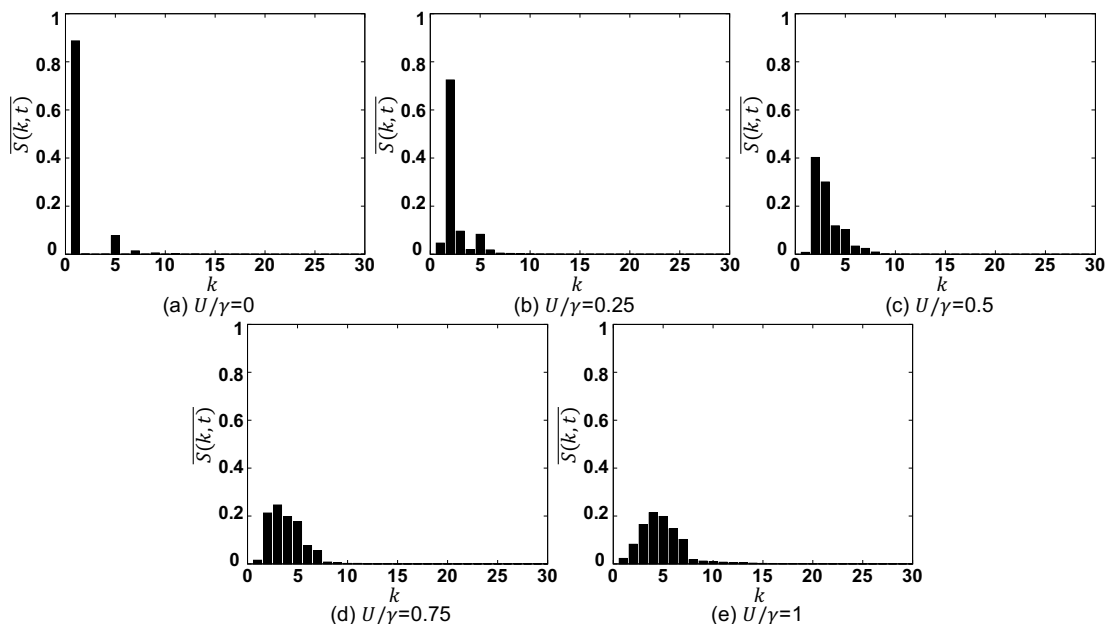


図 5.5 自己相関関数の $t = 100$ [fs] から $t = 600$ [fs] における時間平均 $\overline{S(k, t)}$. 各図は異なる長距離電子間相互作用強度の場合の結果を示す.

電子間相互作用が強くなるに従い減少すると言える.

多電子波束状態は本質的に揺らぎをもつ準定常状態と考えられ, 長距離電子間相互作用強度によって特徴付けられる. これは, 従来の CDW 理論, すなわち電界強度によって振る舞いの変化する定在波を基礎とした描像とは明確に区別される. CDW においては電界強度が E_T より強い場合に電子は移動度を持ち, ツェナートンネリングによりその振る舞いは説明される. 一方, 本研究の提示する多電子波束描像では, 電子の振る舞いは長距離電子間相互作用強度によって変化し, 定在波状態を基礎とするのではなく, 本質的に揺らぎを持った準定常状態を提示する. MOSFET の微細チャネルに印加される電界は E_T より遥かに大きいことから, CDW におけるキャリアの生成が断続的に発生した結果, 多電子波束での記述が適切である領域に移行するものと考えられる.

5.3.2 系のサイズ依存性についての考察

続いて, 多電子波束の形成について系のサイズ依存性を評価した計算結果を示す. 本計算においては, 系のサイズを 50 nm, 100 nm, 150 nm と変化させ, それぞれの系での時間発展において多電子波束が含む電子数を評価する. 電子密度を基本条件である 100 nm,

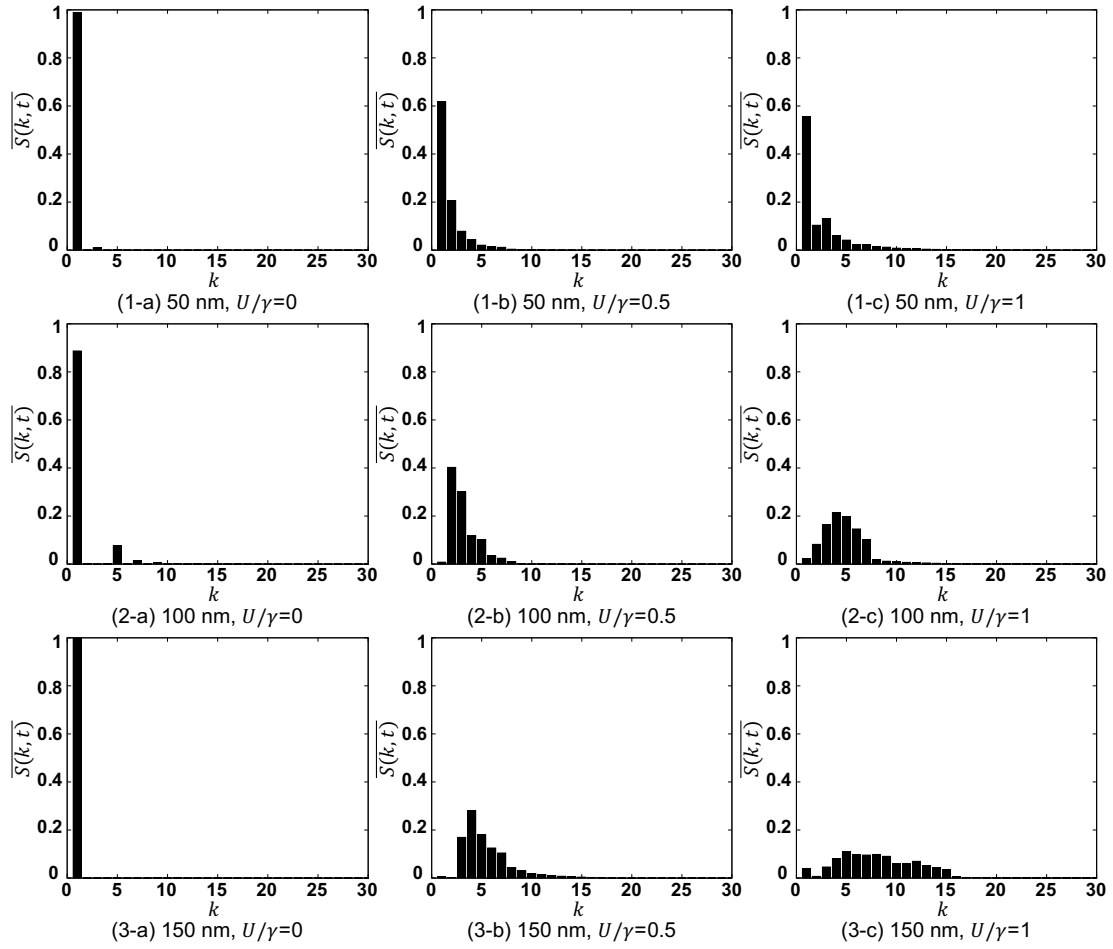


図 5.6 自己相関関数の時間平均 $\overline{S(k, t)}$ の系のサイズおよび長距離電子間相互作用依存性. 各計算条件において電子密度は固定としている. また, それぞれの自己相関関数の時間平均は正規化している.

20 電子の場合から不変とするため, 50 nm, 150 nm の系に対してはそれぞれ 10 電子, 30 電子を用意し時間発展の計算を行う.

得られた自己相関関数の時間平均を図 5.6 に示す. 異なる系のサイズにおいても, 長距離電子間相互作用が強くなるにつれて自己相関関数の時間平均はより大きな k にピークを持ち, 基本条件である 20 電子, 100 nm の場合と定性的には同等の振る舞いを見せていることがわかる. 一方, 長距離電子間相互作用強度に対する依存性は系のサイズが大きくなるにつれより明確に見られる. 図 5.6 (3-a) において, $k=1$ に見られるピークは系が小さい場合と比較しより明確であり, 図 5.6 (3-b), (3-c) でのピークの移動もより明確に見られる.

多電子波束の個数に対する議論の明確化のため, 新たな変数 $K = n/k$ を導入する. ここで n は系全体の電子数である. この変数変換により, 異なる系に異なる電子数が存在する場合に対しても, 多電子波束 1 つに含まれる平均的な電子数を定量化することができる. 図 5.7 に, 系のサイズが 100 nm (20 電子), 150 nm (30 電子) の場合の変数変換を行った自己相関関数の時間平均を示す. なお, 系に存在する電子数が変化した場合の結果を同じ水準で比較するため, K の範囲は $[0, 20]$ としている.

電子間相互作用強度が等しい場合 (図 5.7 (a), (c) および (b), (d)) の結果を見ると, 系のサイズが変わっても $\overline{S(K, t)}$ は類似の分布を示すことがわかる. 弱い長距離電子間相互作用 $U/\gamma = 0.5$ の場合, いずれの系のサイズに対しても自己相関関数の時間平均は $K = 8 \sim 10$ にピークを有する形で分布しており (図 5.7 (a), (c)), より強い長距離電子間相互作用 $U/\gamma = 1$ の場合, 自己相関関数の時間平均は $K = 5$ にピークを持つことがわかる (図 5.7 (b), (d)). これらの結果は, 1 つの多電子波束に含まれる電子数は系のサイズに依存しないことを示すと考えられる.

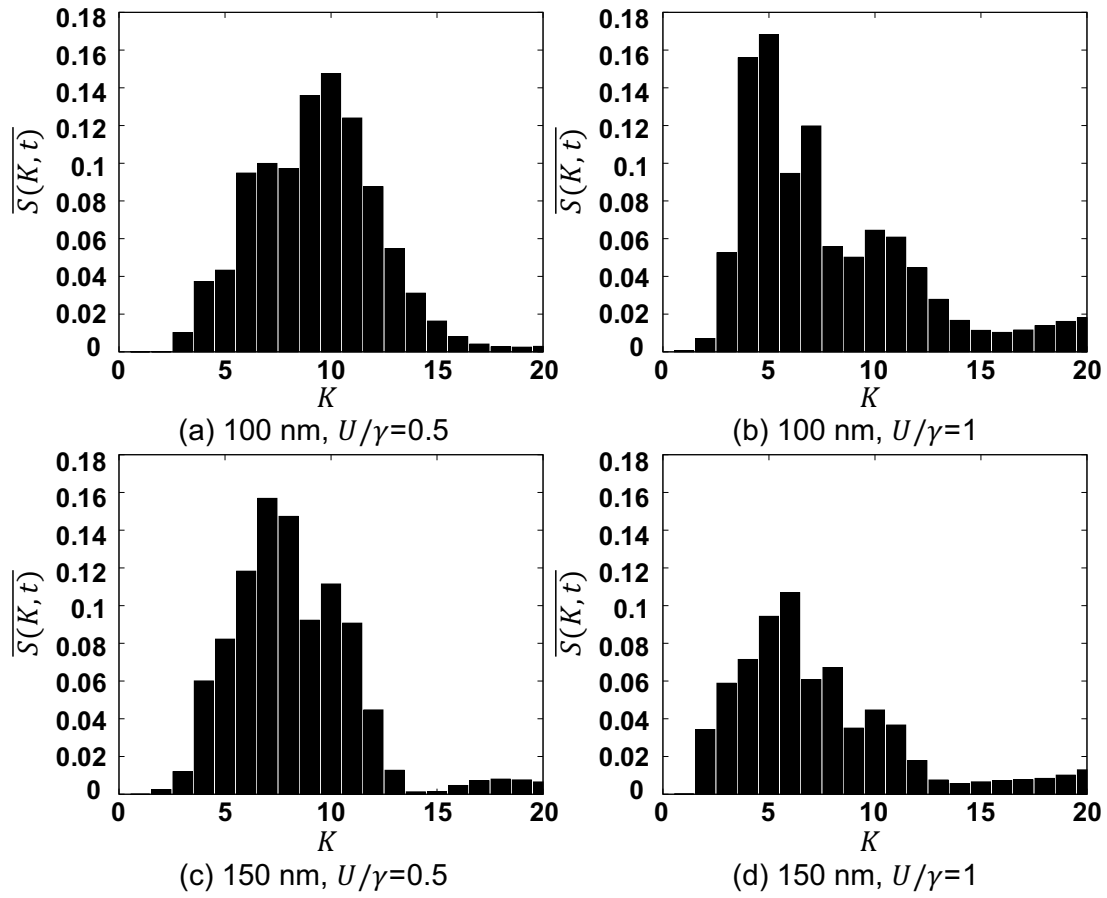


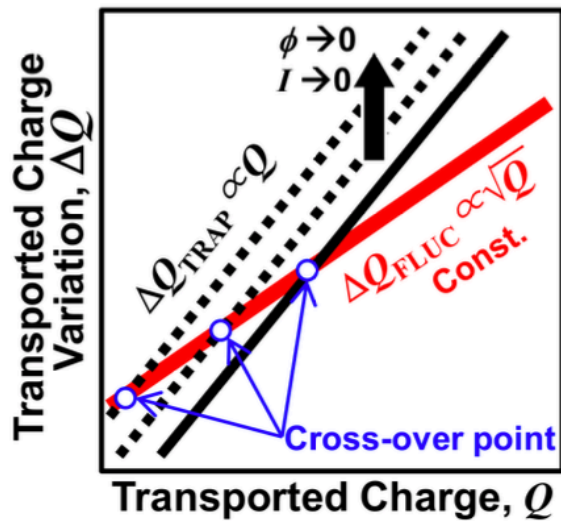
図 5.7 自己相関関数の時間発展, ただし $K = n/k$ という変数変換を適用している. ここで n は系に存在する電子数である. 時間平均は $t = 100$ [fs] から $t = 600$ [fs] で行った.

5.3.3 電流揺らぎに対する考察

この多電子波束の形成という現象は、電流の本質的な揺らぎを悪化させる可能性があると考えられる。神岡ら [111, 112] は古典的粒子描像を用いた数値シミュレーションによって、電子デバイスの微細化・高速化が著しく進んだ場合には、デバイス中を流れる電子数が非常に少なくなり、電子密度を統計的に扱うことに無理が生じ、結果として、粒子としての電子の離散性による揺らぎの大きさが不純物等による揺らぎを上回る可能性があるとして報告している。神岡らの報告によると、電子を粒子として扱った場合であっても電子の離散性に起因する揺らぎが将来的に問題となるということであるが、本研究で考えている、多電子波束の描像でこの揺らぎを考えると、問題はより深刻になることが考えられる。電子が古典的粒子として独立に運動している場合にはそれぞれの電子が輸送する電荷は e である。一方で、電子が多電子波束を形成して集合的に運動する場合には、それぞれの多電子波束が含む電荷は e の数倍となり、仮に 1 つの多電子波束に 10 電子が含まれているとすると、 $10e$ の電荷が一度に輸送することとなる。このように多電子波束が形成される場合には、電子の離散性に起因する揺らぎは多電子波束の含む電子数が多ければ多いほど深刻になると考えられる (図 5.8)。神岡らの粒子描像に基づく計算によると、電子の離散性に起因する揺らぎがランダム・テレグラフ・ノイズなどの他のノイズ原因に対して深刻となるのはデバイス動作速度が数 100 GHz という非常に高速域であると報告されているが、電子が多電子波束を形成し、さらにその多電子波束に典型的な 10 個程度が含まれるとすると、数 10 GHz という、次世代デバイスが実際に到達しうる速度域でこの揺らぎが問題となると予測できる。すなわち、次世代のナノデバイスの設計の際には、多電子波束の形成、というノイズ原因を考慮することが非常に重要になると考えられる。

多電子波束の離散性に起因する揺らぎを低減するためには、多電子波束の形成を抑制することが必要となる。本研究の結果によると、多電子波束の形成は電子間相互作用強度が強い系において抑制されることが示されている。実際にデバイス进行設計する際に電子間相互作用を強くするためには、2 つの方法が考えられる。ひとつは、低次元系の採用である。低次元系においては電子間相互作用が強く作用するため、ナノワイヤー型トランジスタなどの低次元デバイスは多電子波束の形成を抑制するのに有効であると考えられる。もうひとつは、誘電率の小さな物質を用いることである。誘電率の小さな物質中では、電子間相互作用は効果的に作用する。このように、将来のデバイスにおける動作信頼性向上に対して

・古典粒子描像



・多電子波束描像

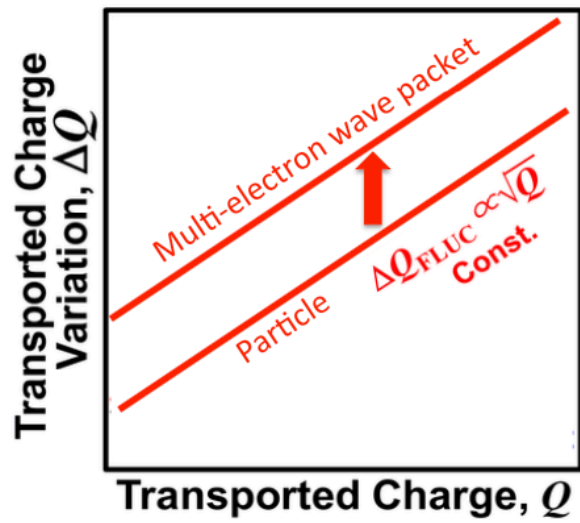


図 5.8 粒子描像, 多電子波束描像による電流揺らぎの概念図. 左図は神岡らの報告 ([112] より転載, ©2012 IEEE), 右図は多電子波束描像を用いた場合の予想. 横軸はチャネルを輸送する電荷量, 縦軸は電荷の揺らぎを示す.

は, 長距離電子間相互作用強度, あるいは多電子波束の形成について考慮することが必要になるものと考えられる.

5.4 まとめ

本章では、一次元円形鎖における多電子波束ダイナミクスの長距離電子間相互作用強度依存性を評価した。本研究では、時間依存ハートリー・フォック近似の適用により相互作用する最大 30 電子の計算を実現した。本計算での結果から、長距離電子間相互作用の存在下で電子が多電子波束を形成して輸送することを示した上、長距離電子間相互作用が強くなるに従って 1 つの多電子波束が含む電子数は減少することを、自己相関関数の時間平均を評価することにより示した。さらに、系のサイズ依存性に対する評価を行い、多電子波束が含む電子数が系のサイズに依存しないことを示した。

さらに、電子が集合的に輸送することによりデバイスに与える影響として、高速デバイス動作において課題になると予想されている電子の離散性に起因する電流揺らぎが悪化することが想定され、次世代デバイスにおいては多電子波束の形成、ひいては長距離電子間相互作用の効果を考慮した設計が重要になることを提示した。

第 6 章

残された課題と今後の展望

以上の研究では、3 種類の一次元モデルにおける電子波束ダイナミクスについて、長距離電子間相互作用依存性を議論してきた。その結果として、長距離電子間相互作用強度に応じて、複数の電子が集合的に輸送する、多電子波束が形成されることを示した。今後、本研究を実際のデバイスに対し応用することを考えると、解決すべき課題が残されている。

まず、チャンネル中における電子の波動関数と、計算の初期条件との整合性が挙げられる。初期波動関数として、第 3 章、第 4 章ではガウス型電子波束、第 5 章では無限に深い井戸型ポテンシャルの固有状態を用い、それぞれ時間発展計算を行った。ところが、微細デバイスのチャンネルに存在する電子の波動関数がどのような形になっているのかについて、明確な描像は本研究では得られていない。ソース電極からチャンネルへ電子が注入されたとき、電子の波動関数が波束となるかどうかについては、詳細な議論が必要であると考えられる。注入電子の描像を考察するに当たっては、電子が十分多数存在するソース電極と、電子が極めて少数となるチャンネル領域の境界条件を適切にモデル化することが課題となる。本研究においては 30 電子までの時間発展計算を実現したが、ソース電極のキャリア密度を記述するには不十分と考えられ、ソース電極での電子状態に対し新たなモデルを導入する必要があると考えられる。境界問題については、チャンネルのドレイン端についても同様の課題が挙げられる。実際のデバイスにおいては無視できないドレイン反跳の効果により、チャンネル中の電子は大きく影響を受ける。チャンネル・ドレイン境界についても、ソース・チャンネル境界と同様に、電子密度の不連続性が課題となりモデル化が困難であり、今後のさらなる検討が求められる。

また、本研究は低次元、特に 1 次元チャンネルを念頭においた計算を進めてきた。本研究

の結果が提示した、長距離電子間相互作用の効果により電子が集散的に輸送する、多電子波束の形成は、次元性の効果を強く受けることが考えられる。1次元系において多電子波束を形成するような電子間相互作用強度であっても、2次元系においては電子の進行方向と直交する方向の自由度により、電子は多電子波束を形成せず輸送することが可能となることが考えられる。そのため、チャンネル長だけでなく、チャンネル幅に対する自由度を無視できないような現実のデバイスに対して本研究を応用する上では、2次元、あるいは3次元でのシミュレーションが必要になると考えられる。次元の拡張に際しては、計算コストの大幅な増加が課題となるため、計算規模の拡大そのものも課題となるものと想定される。

加えて、本研究では微細チャンネル中では長距離電子間相互作用以外の散乱の寄与が少なく、電子が弾道的にチャンネル中を輸送するという仮定のもと、計算を進めてきた。一方、チャンネルの微細化・低次元化に伴い、チャンネル形状に依存した界面散乱や、フォノン散乱等が電子伝導に与える影響は顕在化するものと考えられる。長距離電子間相互作用の効果により多電子波束が形成されると本研究は提示しているが、キャリアが多電子波束を形成している場合の散乱による影響、あるいはエネルギー散逸過程による効果については議論されておらず、さらなる考察が求められる。今後ナノワイヤートランジスタ等の低次元デバイスの特性向上に対し指針を与える上では、既存の電子輸送計算、デバイスシミュレーション手法と、多電子波束描像による電子輸送モデルを組み合わせた手法の開発が有用であると考えられ、今後の課題としたい。

本研究は、単純化したモデルにより次世代デバイスにおける電子伝導に対する基礎物理を理解することを目的とし、タイトバインディング近似のもと、静的な外部ポテンシャルおよび時間依存ハートリー・フォック近似による長距離電子間相互作用を考慮したハミルトニアンを取り扱った。本研究により得られた知見は、さらなる現実的な系での計算に対し礎となるものとなりうる一方、実験による確認には計算モデルの拡張が必要となる。実験による実証可能な物理量の提示や、定量的なデバイス設計指針の提示については、今後の課題として、研究を深めていく必要がある。

第 7 章

結言

本研究では、次世代デバイスの低次元微細チャネルにおいて顕在化すると考えられる、古典-量子クロスオーバー領域の電子輸送の物理学に対し、電子波束描像を用いた計算科学的アプローチにより考察を行った。本研究では特に、微細チャネルに存在する電子数の減少により、電子のスクリーニングが不十分になることで長距離電子間相互作用が顕在化すると考え、伝導電子の振る舞いに対する長距離電子間相互作用の効果に着目した。長距離電子間相互作用を考慮した多電子の量子ダイナミクスはその重要性にも関わらず先行研究が少なく、特に 3 電子以上が長距離相互作用する系については殆ど研究がなされていない。本研究では時間依存ハートリー・フォック近似を用いることで、長距離電子間相互作用を取り入れ、3 電子以上の時間発展計算を行ってその結果を考察した。

第 1 章においては、VLSI とその主要素子である MOSFET の開発の歴史についてレビューした上で、本研究においてターゲットとする、低次元微細チャネルにおける電子輸送描像と長距離電子間相互作用の寄与について考察した。電子描像は系のサイズによって特徴付けられ、特に電子の平均自由行程を基準として異なる描像が用いられることが多い。系のサイズが電子の平均自由行程より長い場合、電子伝導は散乱による効果が主要となり、電子は古典的粒子として記述される。一方、系が微細化し平均自由行程を下回る場合、電子伝導は弾道的となり、量子効果が顕在化する。次世代デバイスにおける微細チャネルはそのサイズが平均自由行程を下回るため、量子力学的効果を取り入れることが不可欠となると考えられる。ところが、チャネルの微細化に伴い生じる高電界の効果により、電子波はチャネル中でコヒーレンスを保つことができず、電子の粒子性が発現すると考えられる。実際に 2 電子系の時間発展計算において、電界の存在下で電子波束は粒子的に振る舞うと

の結果が報告されている。これらを総合的に考慮すると、微細チャネルにおける電子は古典的粒子と量子力学的波動のクロスオーバー領域に 있다고考えられ、本研究ではこの古典-量子クロスオーバー領域の物理学を、電子波束描像を用いて議論することとした。

さらに、微細チャネルにおいては電子数密度とチャネル面積の関係から、ある瞬間にチャネル中に存在する電子数は極めて少なくなると考えられる。このような系においては、電子のスクリーニング効果が十分に作用せず、離れた電子間の長距離相互作用の効果が顕在化するものと考えられる。長距離電子間相互作用はその取り扱いの困難さから、量子力学的効果を取り入れた多電子系での研究は殆どなされておらず、その重要性に反して理解が進んでいないことが課題となっている。本研究では、時間依存ハートリー・フォック近似を用いることで長距離電子間相互作用を及ぼし合う多電子系での計算シミュレーションを行い、その振る舞いの長距離電子間相互作用依存性について評価した。

第2章では、本研究に用いた計算手法の概要を導入し、具体的な時間発展手法について述べた。まず、半導体結晶格子における波動関数の基本的性質としてブロッホの定理が成り立つことを示し、タイトバインディング近似および有効質量近似を導出した。さらに、多体基底の記述方法としての第二量子化についてその基本的特性を述べた。続いて、長距離電子間相互作用を数値的に扱うために本研究で導入した時間依存ハートリー・フォック方程式を導出し、その性質を示した。これらの準備のもとに、本研究で用いる計算モデルとハミルトニアンを示し、時間発展計算の方法について述べた。本研究では電子スピンは同種とした、スピンレス有効質量ハミルトニアンをシミュレーションの基礎とした。ハミルトニアンにおいて取り入れる項は、運動項、外場ポテンシャル項、長距離電子間相互作用項の3項で、長距離電子間相互作用項に対しハートリー・フォック近似を適用した。本研究では特に電子間相互作用強度依存性を議論するため、長距離電子間相互作用強度を変化させて電子の振る舞いを考察した。時間発展計算は、時間依存ハートリー・フォック方程式の形式解における時間発展演算子を、4次のテイラー展開を用いて展開することで波動関数に作用させることで行った。テイラー展開は波動関数のノルムを保存しないため、時間発展計算においては時間刻みを十分に小さくすることで電子のノルムが十分に保存することを確認して評価を行った。

第3章から第5章ではそれぞれ異なる系をモチーフとして行った数値シミュレーションの結果を示し、それらに対する考察を行った。

第3章においては、長距離電子間相互作用を考慮した波束ダイナミクスの手法を用いて、

クーロン・ブロッケイドの効果を数値的に考察した。まず、一次元量子井戸の系におけるハートリー・フォック方程式を固有値問題として数値的に解き、自己無撞着な固有波動関数と固有エネルギーを求めた。本計算の結果により、電子間相互作用の弱い場合にクーブマンズの定理が成立することを確認した上で、過去に S. Levit らが指摘していたように、電子間相互作用が強くなるに従いクーブマンズの定理との乖離が生じることを数値的に示した。この結果は先行研究と定性的に整合する結果であり、本計算手法の妥当性を支持するものである。さらに、量子井戸に束縛される電子数の電子間相互作用依存性を評価し、電子間相互作用の強い系において量子井戸に束縛される電子数が減る、すなわち量子井戸の容量が減少することを示した。

さらに、先に求めた量子井戸の固有状態を用いて、複数の電子が束縛された量子井戸に対して電子波束を外挿する時間発展計算を行い、クーロン・ブロッケイド現象に対する考察を行った。本計算においては、量子井戸に束縛された電子数を変化させ、外挿電子波束の透過率・反射率を評価した。その結果、外挿電子波束の振る舞いは量子井戸に含まれる電子数に強く影響され、量子井戸に含まれる電子数が多い場合に電子波束の透過率が低下し、反射率が向上することを示した。この結果は、量子効果および長距離電子間相互作用を考慮した多電子時間発展計算によりクーロン・ブロッケイド現象を動的に考察した初めての研究で、電子波束ダイナミクスの有効性についても支持するものと考えられる。

第 4 章では、一次元系の一様電界下における 5 電子のガウス波束の時間発展を計算し、長距離電子間相互作用依存性を評価した。過去の研究では数値計算のコストの問題から 2 電子までの計算しか行われていなかったところ、本研究では時間依存ハートリー・フォック近似を適用することで 5 電子の時間発展計算を実行し、複数の電子が相関することによる振る舞いの変化を考察した。その結果、強い長距離電子間相互作用の存在下で電子が強く反発して古典粒子的に振る舞う一方、現実的な、弱い長距離電子間相互作用の存在下では、複数の電子が一体となり「多電子波束」の状態をとって集合的に輸送することを示した。多電子波束は古典的粒子と量子的平面波の中間的状态にあたる新しい電子描像であり、長距離電子間相互作用強度により特徴付けられる。この結果は、次世代ナノデバイスにおいて顕在化する古典-量子クロスオーバー領域の電子輸送について議論する上で、電子が集合的に輸送する多電子波束描像を用いることの必要性を示唆しているものと考えられる。

第 5 章では、集合的に電子が輸送する多電子波束描像に対し、特に 1 つの多電子波束が含む電子の個数という観点で考察を行った。多電子波束が含む電子数は時間発展の中で揺

らぐことが考えられるが、時間的揺らぎを持つ結果を考察するためには、長時間の時間発展計算が必要となる。第4章で取り扱ったような一様電界下での長時間発展を行おうとすると、非常に大きな系が必要となり計算コストの問題で計算の実行が不可能であるだけでなく、散逸項を導入しない限り電子の速度が非現実的なほど大きくなったり、あるいは電子がブロッホ振動を起こして現実的な結果を得られない。そこで、本計算では比較的小さな系で長時間の時間発展計算を実現するため、一次元円形鎖の系を採用し、さらに仮想磁場を導入することでブロッホ振動を起こすことなく電子が長時間運動することを可能とした。なお、この計算において最大30電子の相互作用しあう量子ダイナミクスについての計算を実現しており、長距離電子間相互作用を取り扱った量子ダイナミクスとしては過去にない規模の計算を行った。

その結果、1つの多電子波束が含む電子数が長距離電子間相互作用強度により変化することを示した。また、多電子波束が含む電子数について系のサイズ依存性を評価し、1つの多電子波束が含む電子数は系のサイズに対して独立で依存性を持たないことを示した。電子が集合的に輸送することによりデバイスに与える影響として、高速デバイス動作において課題になると予想されている電子の離散性に起因する電流揺らぎが悪化することが想定され、次世代デバイスにおいては多電子波束の形成、ひいては長距離電子間相互作用の効果を考慮にいたした設計が重要になることを提示した。

以上の結果に示したように、本研究では古典力学と量子力学のクロスオーバー領域の新たな電子描像として、多電子波束という概念を提案した。チャネル長が長く、古典力学で電子を扱うことが出来る場合や、量子力学的に電子を扱っても、電子間相互作用が強く作用する場合、あるいは強い電界の存在する場合については電子は古典的粒子として振る舞う。一方で、チャネル長が電子の平均自由行程と比較し短く、また、長距離電子間相互作用が無視できるような場合については、電子は純粋な量子波としての性質を発現し、量子力学的な振る舞いをする事となる。本研究で特に注目したのはその中間的な領域である。チャネルが微細であり、現実的な強度の長距離電子間相互作用が存在する場合には、電子はチャネル中で多電子波束を形成し、古典的粒子と純粋量子波の中間的状态をとって輸送することが本研究により示された。加えて、複数のキャリアが一体となって輸送する多電子波束では、電子が本来持つ離散性に起因する電流揺らぎがさらに悪化すると予想されることから、微細チャネルをもつデバイスの信頼性向上にあたっては、多電子波束描像を用いた電子伝導の理解が不可欠と考えられる。

多電子波束の形成による影響が発現する領域は、遠い未来のデバイスではなく、まさに次世代のデバイスであると考えている。今後のデバイスの設計においては、多電子波束の形成を制御するという観点が必要であるということを提示し、本論文のまとめとする。

付録 A

MOSFET の動作原理

金属-半導体-酸化物電界効果トランジスタ (MOSFET: metal-oxide-semiconductor field effect transistor) は、基板上に形成した絶縁膜を介してゲート電極を接続し、基板表面の伝導状態をゲート電位により制御するデバイスで、スイッチング素子、あるいは増幅素子として用いられる。現代の半導体集積回路を構成する素子を代表する素子であり、企業や大学においてその性能向上や製造技術が研究されている。

図 A.1 に n 型 Si MOSFET の模式図を示す。まず、 p 型 Si 基板の表面を熱酸化することでゲート酸化膜を形成する。その上にポリシリコンまたは金属、あるいはその積層構造によって構成された導電性ゲートを形成し、そのゲートをマスクとして不純物注入を行うことで、 n^+ 型のソース (キャリア電子の供給源) およびドレイン領域をそれぞれ形成する。層間絶縁膜で埋め込みを行った後、最後にゲート・ソース・ドレイン・基板 (ボディ) のそれぞれに金属電極を接続することで MOSFET は製造される。通常隣接する MOSFET 同士は絶縁膜によって分離され、相互干渉による影響を低減している。

n 型 MOSFET では、ゲート電極に電圧が印加されていない場合にはソース・基板・ドレインが n - p - n という接合になり、ソース・ドレイン間の電位差 V_{ds} を変化させても電流を流すことはできない。ゲート電極に $V_{gs} > 0$ を印加すると、半導体表面の電位が上がって絶縁膜近傍にキャリア電子が誘起され、 p 型基板の最表面のみ n 型の反転層が生じる。反転層が生じている状態でソース・ドレイン間に電位差 V_{ds} を加えるとこの電位差により反転層に電流が流れる。このため、反転層の領域はチャネルと呼ばれ、ソース端からドレイン端までの距離はチャネル長と呼ばれる。ゲート電圧 V_{gs} に対するドレイン電流 I_{ds} の変化は一般に急峻で、わずかな電圧変化により大きな電流を流すことができる。これにより、

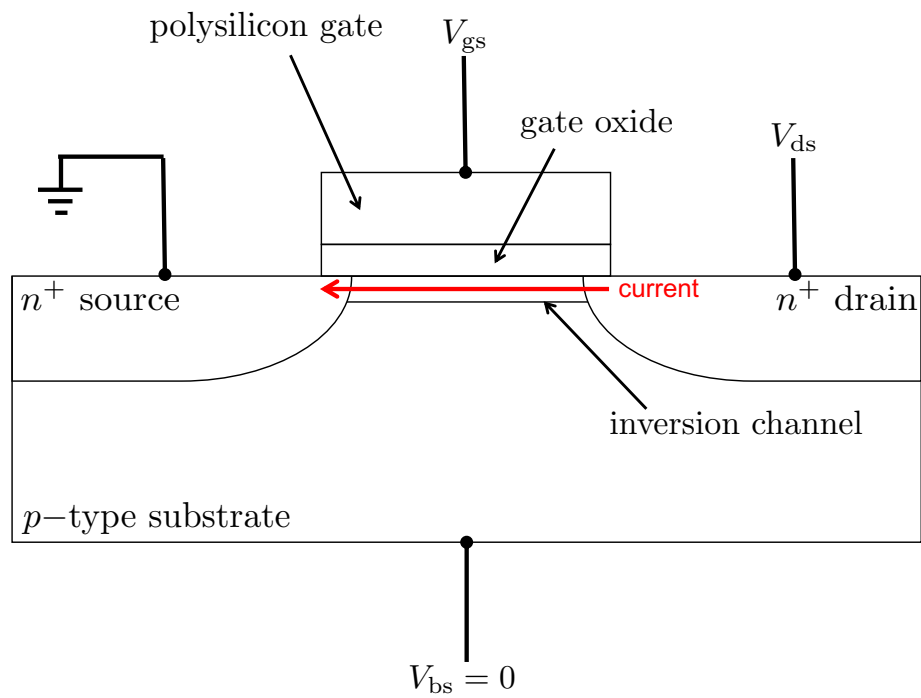


図 A.1 n 型金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ (MOSFET) の模式図.
 V_{gs} , V_{ds} , V_{bs} はそれぞれゲート電圧, ドレイン電圧, 基板電圧を示す.

MOSFET はスイッチング素子・増幅素子としての機能を有することになる.

付録 B

グラム・シュミットの正規直交化法

グラム・シュミットの正規直交化法とは、内積空間において直交したベクトルを生成する手法であり、以下の式によって表される手順を繰り返すことによって行われる [113].

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{u}_1\rangle &= \frac{|\mathbf{v}'_1\rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}'_1 \rangle}}, & |\mathbf{v}'_1\rangle &= |\mathbf{v}_1\rangle, \\
 |\mathbf{u}_2\rangle &= \frac{|\mathbf{v}'_2\rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{v}'_2 | \mathbf{v}'_2 \rangle}}, & |\mathbf{v}'_2\rangle &= |\mathbf{v}_2\rangle - \langle \mathbf{v}_2 | \mathbf{u}_1 \rangle |\mathbf{u}_1\rangle, \\
 & & \vdots & \\
 |\mathbf{u}_n\rangle &= \frac{|\mathbf{v}'_n\rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{v}'_n | \mathbf{v}'_n \rangle}}, & |\mathbf{v}'_n\rangle &= |\mathbf{v}_n\rangle - \sum_{k=1}^{n-1} \langle \mathbf{v}_n | \mathbf{u}_k \rangle |\mathbf{u}_k\rangle.
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

線形独立なベクトル $|\mathbf{v}_1\rangle \cdots |\mathbf{v}_n\rangle$ が与えられた時、上式のように $|\mathbf{u}_1\rangle \cdots |\mathbf{u}_n\rangle$ を次々と作っていくと、 $|\mathbf{u}_1\rangle \cdots |\mathbf{u}_n\rangle$ は正規直交系をなす。

参考文献

- [1] 内閣府, “未来投資戦略 2018 - 「Society 5.0」 「データ駆動型社会」 への変革 - ”, 平成 30 年 6 月 15 日.
- [2] WSTS Forecast, Q4 2018 actual results (2019).
- [3] W. Shockley, IEEE Trans. Electron Devices **ED-23**, 597 (1976).
- [4] C.-T. Sah, Proc. IEEE **76**, 1280 (1988).
- [5] 城阪俊吉, “エレクトロニクスを中心とした年代別科学技術史 (第 3 版)”, 日刊工業新聞社 (1990).
- [6] J. E. Lilienfeld, “Method and apparatus for controlling electric currents”, U.S. Patent 1,745,175, Application filed Oct. 8, 1926.
- [7] J. E. Lilienfeld, “Device for controlling electric current”, U.S. Patent 1,900,018, Application filed Mar. 28, 1928.
- [8] J. Bardeen and W. H. Brattain, Phys. Rev. **74**, 230 (1948).
- [9] J. Bardeen and W. H. Brattain, Phys. Rev. **75**, 1208 (1948).
- [10] J. Bardeen, “Three-electrode circuit element utilizing semiconductive materials”, U.S. Patent 2,524,033, Application filed Feb. 26, 1948.
- [11] J. Bardeen, “Three-electrode circuit element utilizing semiconductive materials”, U.S. Patent 2,524,035, Application filed June 17, 1948.
- [12] W. Shockley, “Circuit element utilizing semiconductive material”, U.S. Patent 2,569,347, Application filed June 26, 1948.
- [13] W. Shockley, M. Sparks, and G. K. Teal, Phys. Rev. **83**, 1 (1951).
- [14] D. Kahng, “Electric field controlled semiconductor device”, U.S. Patent 3,102,230, Application filed May 31, 1960.
- [15] M. M. Atalla, “Semiconductor triode”, U.S. Patent 3,056,888, Application filed

- Aug. 17, 1960.
- [16] J. A. Hoerni, “Method of manufacturing semiconductor devices”, U.S. Patent 3,025,589, Application filed May 1, 1959.
 - [17] F. M. Wanlass, “Low stand-by power complementary field effect circuitry”, U.S. Patent 3,356,858, Application filed June 18, 1963.
 - [18] J. S. Kilby, “Modular electrical unit”, U.S. Patent 3,052,822, Application filed May 28, 1958.
 - [19] R. N. Noyce, “Semiconductor device-and-lead structure”, U.S. Patent 2,981,877, Application filed July 30, 1959.
 - [20] G. E. Moore, “Method for fabricating transistors”, U.S. Patent 3,108,359, Application filed June 30, 1959.
 - [21] D. L. Critchlow, *Proc. IEEE* **87**, 659 (1999).
 - [22] H. Iwai, *Microelectric Eng.* **86**, 1520 (2009).
 - [23] G. E. Moore, *Electronics* **38**, 114 (1965).
 - [24] ITRS 2011 Edition, p. 79, Figure ORTC4.
 - [25] R. H. Dennard, F. H. Gaensslen, H.-N. Yu, V. L. Rideout, E. Bassous, and A. R. LeBLANC, *IEEE J. Solid-State Circuits* **SC-9**, 256 (1974).
 - [26] 2015 ITRS 2.0 PUBLICATION Table MM01 - More Moore - Logic Core Device Technology Roadmap.
 - [27] Y. Taur, G. J. Hu, R. H. Dennard, L. M. Terman, C.-Y. Ting, and K. E. Petrillo, *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-32**, 203 (1985).
 - [28] T. Vasen, P. Ramvall, A. Afzalian, G. Doornbos, M. Holland, C. Thelander, K. A. Dick, L.-E. Wernersson, and M. Passlack, *Sci. Rep.* **9**, 202 (2019).
 - [29] G. Zheng, W. Lu, S. Jin, and C. M. Lieber, *Adv. Mater.* **16**, 1890 (2004).
 - [30] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “Solid State Physics”, Thomson Learning (1976).
 - [31] S. Datta, *Superlattices Microstruct.* **28**, 253 (2000).
 - [32] M. V. Fischetti, S. Jin, T.-W. Tang, P. Asbeck, Y. Taur, S. E. Laux, M. Rodwell, and N. Sano, *J. Comput. Electron.* **8**, 60 (2009).
 - [33] N. Sano, *Jpn. J. Appl. Phys.* **50**, 010108 (2011).

-
- [34] K. Natori, J. Appl. Phys. **76**, 4879 (1994).
 - [35] F. G. Pikus and K. K. Likharev, Appl. Phys. Lett. **71**, 3661 (1997).
 - [36] K. Natori, Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 034503 (2009).
 - [37] K. Natori, Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 034504 (2009).
 - [38] J. Sirker, R. G. Pereira, and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **103**, 216602 (2009).
 - [39] R. Landauer, Philos. Mag., **21**, 863 (1970).
 - [40] Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
 - [41] M. Paulsson and S. Datta, Phys. Rev. B **67**, 241403 (2003).
 - [42] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, and D. Jovanovic, J. Appl. Phys. **81**, 7845 (1997).
 - [43] H. Ishii and T. Nakayama, Phys. Rev. B **73**, 235311 (2006).
 - [44] A. Pecchia, G. Penazzi, L. Salvucci, and A. D. Carlo, New J. Phys. **10**, 065022 (2008).
 - [45] M.-C. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **75**, 1348 (1995).
 - [46] M.-C. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. B **53**, 7010 (1996).
 - [47] M.-C. Chang and Q. Niu, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 193202 (2008).
 - [48] 臼井信志, 井上鑑孝, CISJ Bulletin **26**, 118 (2008).
 - [49] C. M. Puetter, S. Konabe, Y. Hatsugai, K. Ohmori, and K. Shiraishi, Appl. Phys. Express **6**, 065201 (2013).
 - [50] J. A. Yeazell and C. R. Stroud, Jr., Phys. Rev. Lett. **60**, 1494 (1988).
 - [51] M. Imada and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 3752 (1989).
 - [52] F. Steininger, A. Knorr, T. Stroucken, P. Thomas, and S. W. Koch, Phys. Rev. Lett. **77**, 550 (1996).
 - [53] G. Sundaram and Q. Niu, Phys. Rev. B **59**, 14915 (1999).
 - [54] B. Hanewinkel, A. Knorr, P. Thomas, and S. W. Koch, Phys. Rev. B **60**, 8975 (1999).
 - [55] Y. Otsuka and Y. Hatsugai, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 9317 (2000).
 - [56] N. Watanabe and M. Tsukada, Phys. Rev. E **62**, 2914 (2000).
 - [57] F. Claro, J. F. Weisz, and S. Curilef, Phys. Rev. B **67**, 193101 (2003).
 - [58] T. Koiso, M. Muraguchi, K. Takeda, and N. Watanabe, Jpn. J. Appl. Phys. **44**,

- 4252 (2005).
- [59] D. Culcer, Y. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. B **72**, 085110 (2005).
 - [60] R. Shindou and K.-I. Imura, Nucl. Phys. B **720**, 399 (2005).
 - [61] Y. Fu and M. Willander, J. Appl. Phys. **97**, 094311 (2005).
 - [62] D. Reiter, M. Glanemann, V. M. Axt, and T. Kuhn, Phys. Stat. Sol. **243**, 2297 (2006).
 - [63] M. Muraguchi and K. Takeda, Jpn. J. Appl. Phys. **46**, 1224 (2007).
 - [64] T. Okunishi, Y. Ohtsuka, M. Muraguchi, and K. Takeda, Phys. Rev. B. **75**, 245314 (2007).
 - [65] M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura, and K. Shiraishi, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 7807 (2008).
 - [66] P. Bokes, F. Corsetti, and R. W. Godby, Phys. Rev. Lett. **101**, 046402 (2008).
 - [67] M. Muraguchi, Y. Takada, S. Nomura, and K. Shiraishi, AIP Conf. Proc. **1199**, 217 (2010).
 - [68] Y. Sakurai, J.-I. Iwata, M. Muraguchi, Y. Shigeta, Y. Takada, S. Nomura, T. Endoh, S.-I. Saito, K. Shiraishi, M. Ikeda, K. Makihara, and S. Miyazaki, Jpn. J. Appl. Phys. **49**, 014001 (2010).
 - [69] M. Muraguchi, Y. Sakurai, Y. Takada, Y. Shigeta, M. Ikeda, K. Makihara, S. Miyazaki, S. Nomura, K. Shiraishi, and T. Endoh, Jpn. J. Appl. Phys. **50**, 04DD04 (2011).
 - [70] Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, Jpn. J. Appl. Phys. **51** 02BJ01 (2012).
 - [71] K. C. Kulander, Phys. Rev. A **36**, 2726 (1987).
 - [72] M. J. Jamieson, Int. J. Quantum Chem. **4**, 103 (1971).
 - [73] D. J. Thouless, “The quantum mechanics of many-body systems 2nd ed.”, Academic Press (1972).
 - [74] P. Ring and P. Shuck, “The nuclear many-body problem” 2nd printing, Springer Verlag (2000).
 - [75] S. Stringari, E. Lipparini, G. Orlandini, M. Traini, and R. Leonardi, Nucl. Phys. **A309**, 177 (1978).

-
- [76] 御子柴宣夫, “半導体工学シリーズ 2 半導体の物理 改訂版”, 培風館 (1991).
- [77] P. A. Dirac, Proc. Cambridge Philos. Soc. **26**, 376 (1930).
- [78] D. Lauvergnat, S. Blasco, X. Chapuisat, and A. Nauts, J. Chem. Phys. **126**, 204103 (2007).
- [79] A. D. McLachlan and M. A. Ball, Rev. Mod. Phys. **36**, 844 (1964).
- [80] H. Flocard, S. E. Koonin, and M. S. Weiss, Phys. Rev. C **17**, 1682 (1978).
- [81] J. W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54**, 913 (1982).
- [82] H. Sekino and R. J. Bartlett, Int. J. Quantum Chem. **43**, 119 (1992).
- [83] C. Simenel, Ph. Chomaz, and G. de France, Phys. Rev. Lett. **93**, 102701 (2004).
- [84] L. Guo, J. A. Maruhn, P.-G. Reinhard, and Y. Hashimoto, Phys. Rev. C **77**, 041301 (2008).
- [85] Y. Hatsugai, Phys. Rev. B **56**, 12183 (1997).
- [86] Y. Hatsugai and A. Sugi, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 2045 (2001).
- [87] A. Asker and A. S. Cakmak, J. Chem. Phys. **68** (1978).
- [88] T. Koopmans, Physica **1**, 104 (1934).
- [89] S. Levit and D. Orgad, Phys. Rev. B **60**, 5549 (1999).
- [90] M. A. Kaster, Rev. Mod. Phys. **64**, 849 (1992).
- [91] D. G-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. A-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, Nature **391**, 156 (1998).
- [92] J. Park, A. N. Pasupathy, J. I. Goldsmith, C. Chang, Y. Yaish, J. R. Petta, M. Rinkoski, J. P. Sethna, H. D. Abruña, P. L. McEuen, and D. C. Ralph, Nature **417**, 722 (2002).
- [93] T. Shiokawa, G. Fujita, Y. Takada, S. Konabe, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, Jpn. J. Appl. Phys. **52**, 04CJ06 (2013).
- [94] T. Shiokawa, Y. Takada, S. Konabe, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, AIP Conf. Proc. **1566**, 421 (2013).
- [95] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1942 (1958).
- [96] N. F. Mott, Rev. Mod. Phys. **40**, 677 (1968).
- [97] N. F. Mott, Rev. Mod. Phys. **50**, 203 (1978).
- [98] T. F. Rosenbaum, K. Andres, G. A. Thomas, and R. N. Bhatt, Phys. Rev. Lett.

- 45, 1723 (1980).
- [99] S. Miyazaki, K. Makihara, and M. Ikeda, *Thin Solid Films* **517**, 41 (2008).
- [100] A. Kohno, H. Murakami, M. Ikeda, S. Miyazaki, and M. Hirose, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, 721 (2001).
- [101] M. Ikeda, Y. Shimizu, H. Murakami, and S. Miyazaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **42**, 4134 (2003).
- [102] P. A. Lee and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **19**, 3970 (1979).
- [103] J. Bardeen, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1978 (1980).
- [104] D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **31**, 1396 (1985).
- [105] R. E. Thorne, W. G. Lyons, J. W. Lyding, J. R. Tucker, and J. Bardeen, *Phys. Rev. B* **35** 6348 (1987).
- [106] G. Gruner, *Rev. Mod. Phys* **60**, 1129 (1988).
- [107] F. Weber, S. Rosenkranz, J.-P. Castellán, R. Osborn, R. Hott, R. Heid, K.-P. Bohnen, T. Egami, A. H. Said, and D. Reznik, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 107403 (2011).
- [108] T. Shiokawa, M. Muraguchi, and K. Shiraishi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 112002 (2019).
- [109] H. Kato and D. Yoshioka, *Phys. Rev. B* **50**, 4943 (1994).
- [110] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [111] 早稲田大学 理工学術院, 科学技術振興機構 (JST), “半導体デバイスの高速化・省電力化の限界は、流れる電子の数で決まる技術開発のロードマップにも影響する理論的限界を解明”, プレスリリース, 2012 年 12 月 9 日.
- [112] T. Kamioka, H. Imai, Y. Kamakura, K. Ohmori, K. Shiraishi, M. Niwa, K. Yamada, and T. Watanabe, *IEDM Tech. Dig.*, 2012, 17.2.1.
- [113] Å. Björck, *BIT Numerical Mathematics*, **7**, 1 (1967).

研究業績

学術雑誌等 (紀要・論文集等も含む) に発表した論文, 著書
筆頭 (査読あり)

1. **Effect of Long-range Coulomb Interactions on Electron Transport in a Nanoscale One-dimensional Ring**

Taro Shiokawa, Masakazu Muraguchi, and Kenji Shiraishi

Japanese Journal of Applied Physics, **58**, 112002 (2019).

2. **Influence of Coulomb Blockade on Wave Packet Dynamics in Nanoscale Structures**

Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

Japanese Journal of Applied Physics, **52**, 04CJ06 (2013).

3. **Effect of Coulomb Interaction on Multi-Electron Wave Packet Dynamics**

T. Shiokawa, Y. Takada, S. Konabe, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi

AIP Conference Proceedings, **1566**, 421 (2013).

共著 (査読あり)

1. **Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Field**

Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro

Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

Japanese Journal of Applied Physics, **51**, 02BJ01 (2012).

国際会議における発表

筆頭

1. Multi-electron Wave Packets Dynamics under MOSFET-like Potentials

Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN), December 8-13, 2013 (Hawaii, USA), oral presentation.

2. Coulomb Interaction on Multi-electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Channels

Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

44th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference (SISC), December 5-7, 2013 (Virginia, USA), poster presentation.

3. Multi-electron Wave Packet Transport Dynamics in Nanoscale Channel

Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2013 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM), September 24-27, 2013 (Fukuoka, Japan), oral presentation.

4. Effect of Coulomb Interaction in Electron Wave Packet Dynamics in

Nanoscale Devices

Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM), September 25-27, 2012 (Kyoto, Japan), poster presentation.

5. Multi-Electron Wave Packet Dynamics with Long-range Coulomb Interaction

Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), December 2-7, 2012 (Hawaii, USA), oral presentation.

6. The Effect of Coulomb Interaction in Multi-Electron Wave Packet Dynamics

Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2012 31st International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS), July 29-August 3, 2012 (Zurich, Switzerland), poster presentation.

7. Applied Electric Field Dependence of Multi-electron Wave Packet Dynamics

Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Mitsuhiro Arikawa, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

The Eighth International Nanotechnology Conference on Communication and Cooperation (INC8), May 8-11, 2012 (Tsukuba, Japan), poster presentation.

共著

1. Forming of Electrons Wave Packets in Nano Scale Device

Genki Fujita, Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2014 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), November 30-December 5, 2014 (Hawaii, USA), oral presentation.

2. Electric Field Effects in Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nano Channels

Genki Fujita, Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2014 International Union of Materials Research Societies (IUMRS), August 24-30, 2014 (Fukuoka, Japan), poster presentation.

3. Effect of Electric Field in Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Channel of Nanoscale MOSFETs

Genki Fujita, Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2013 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES - SCIENCE AND TECHNOLOGY - (IWDTF), November 7-9, 2013 (Tokyo, Japan), oral presentation.

4. Dynamical Coulomb Blockade in Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nanostructures

Genki Fujita, Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2013 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM), September 24-27, 2013 (Fukuoka, Japan), oral presentation.

5. Effect of Electric Field in Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Channel of Nanoscale MOSFETs

Genki Fujita, Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu

Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology (ISANN), December 8-13, 2013 (Hawaii, USA), poster presentation.

6. Multi-Electron Wave Packet Dynamics for Electron Transport in Classical-Quantum Crossover Regions

Yukihiro Takada, Taro Shiokawa, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi and Takahiro Yamamoto

International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2012 (IUMRS), September 23-28, 2012 (Yokohama, Japan), oral presentation.

7. Effectiveness of Time-Dependent Hartree-Fock Approaches for Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Structures

Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2012 31st International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS), July 29-August 3, 2012 (Zurich, Switzerland), poster presentation.

8. Multi Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Fields

Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM), September 28-30, 2011 (Nagoya, Japan), oral presentation.

9. Electron Dynamics in the Nano Scale Transistor

Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, and Kenji Shiraishi

2011 Asia-Pacific Workshop on Fundamental and Applications of Advanced Semiconductor Devices (AWAD),

June 30, 2011 (Daejeon, Korea), oral presentation.

国内学会・シンポジウム等における発表

招待講演

1. ナノデバイス中の多電子波束ダイナミクス

塩川太郎

NWDTF - 12 in Sendai および通研共同プロジェクト合同研究会

2013 年 3 月 9 日 (東北大学).

筆頭

1. 多電子波束を用いた円電流ダイナミクスへの電子間相互作用の効果

塩川太郎, 藤田弦暉, 高田幸宏, 小鍋哲, 村口正和, 山本貴博, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2013 年第 68 回年次大会

2013 年 3 月 26 日 ~ 29 日 (広島大学), 口頭発表.

2. 一次元非一様ポテンシャル中の波束ダイナミクス (タイトル変更; ベクトルポテンシャルを用いた電子波束による円電流シミュレーション)

塩川太郎, 藤田弦暉, 高田幸宏, 小鍋哲, 村口正和, 山本貴博, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2012 年秋季大会

2012 年 9 月 18 日 ~ 21 日 (横浜国立大学), 口頭発表.

3. 半導体ナノ構造における多電子波束ダイナミクスの印加電圧依存性

塩川太郎, 高田幸宏, 尹永扱, 岩田潤一, 小鍋哲, 有川晃弘, 村口正和, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2012 年第 67 回年次大会

2012 年 3 月 24 日 ~ 27 日 (関西学院大学), 口頭発表.

4. ハートリーフォック近似によるナノ構造中の電子波束ダイナミクス

塩川太郎, 尹永扱, 高田幸宏, 岩田潤一, 小鍋哲, 有川晃弘, 村口正和, 遠藤哲郎, 初

貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2011 年秋季大会

2011 年 9 月 21 日 ~ 24 日 (富山大学), 口頭発表.

共著

1. ナノ構造中における電子輸送の理論的研究

藤田弦暉, 塩川太郎, 高田幸宏, 小鍋哲, 村口正和, 山本貴博, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2014 年秋季大会

2014 年 9 月 7 日 10 日 (中部大学), 口頭発表.

2. スピン自由度を考慮した多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果

藤田弦暉, 塩川太郎, 高田幸宏, 小鍋哲, 村口正和, 山本貴博, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2013 年第 68 回年次大会

2013 年 3 月 26 日 ~ 29 日 (広島大学), 口頭発表.

3. ナノ構造中の多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果

藤田弦暉, 塩川太郎, 高田幸宏, 小鍋哲, 村口正和, 山本貴博, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2012 年秋季大会

2012 年 9 月 18 日 ~ 21 日 (横浜国立大学), 口頭発表.

4. 古典-量子クロスオーバー系における電子波束ダイナミクス

高田幸宏, 塩川太郎, 尹永扱, 小鍋哲, 初貝安弘, 白石賢二, 山本貴博

2012 年秋季 第 73 回応用物理学会学術講演会

2012 年 9 月 11 日 ~ 14 日 (愛媛大学・松山大学), 口頭発表.

5. 2次元半導体ナノ構造における多電子波束ダイナミクスの検討

高田幸宏, 塩川太郎, 尹永扱, 岩田潤一, 小鍋哲, 有川晃弘, 村口正和, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2012 年第 67 回年次大会

2012 年 3 月 24 日 ~ 27 日 (関西学院大学), 口頭発表.

6. 半導体中での波束ダイナミクスの印加電圧依存性

高田幸宏, 尹永扱, 塩川太郎, 岩田潤一, 小鍋哲, 有川晃弘, 村口正和, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2011 年秋季大会

2011 年 9 月 21 日 ~ 24 日 (富山大学), 口頭発表.

7. Suzuki-Trotter 法による電子波束ダイナミクスの多体効果

尹永扱, 塩川太郎, 高田幸宏, 岩田潤一, 小鍋哲, 有川晃弘, 村口正和, 遠藤哲郎, 初貝安弘, 白石賢二

日本物理学会 2011 年秋季大会

2011 年 9 月 21 日 ~ 24 日 (富山大学), 口頭発表.