

報告番号	甲 第 13156 号
------	-------------

主論文の要旨

論文題目 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の理論的研究
(Theoretical Study on Multi-Electron
Wave Packets Dynamics in Classical-
Quantum Crossover Region)

氏 名 塩川 太郎

論文内容の要旨

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。等電界スケールリングに対する Dennard 則によれば、スケール係数を 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 のチャンネル長は 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ンネルが実現されている。微細チャンネルをもつデバイスにおいては、ゲート電極によるチャンネル電位の制御性が課題となることから、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) 型トランジスタや、ナノワイヤトランジスタ等の低次元微細チャンネル構造が提案されている。このような低次元微細チャンネル

においては、ソースからチャン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、弾道的にチャン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ンネル長のスケーリングほど顕著には進んでおらず、微細チャンネル中では高電界が生じる。典型的な 10 nm の微細チャン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、微細チャン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。

微細チャン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ンネルを微細化していくと、ある瞬間にチャン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ンネルにおいては、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、クーブ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ブ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、クーブ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、複数の電子が集散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散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ン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・チャン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、微細チャンネル中で「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。