

## 論文審査の結果の要旨および担当者

|      |               |
|------|---------------|
| 報告番号 | ※ 甲 第 13156 号 |
|------|---------------|

氏 名 塩川 太郎

### 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)

### 論文審査担当者

|    |         |     |       |
|----|---------|-----|-------|
| 主査 | 名古屋大学   | 教授  | 白石 賢二 |
| 委員 | 名古屋大学   | 教授  | 宮崎 誠一 |
| 委員 | 名古屋大学   | 准教授 | 芳松 克則 |
| 委員 | 北海道科学大学 | 准教授 | 村口 正和 |

## 論文審査の結果の要旨

塩川太郎君提出の論文「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の理論的研究」は、時間依存ハートリー・フォック法によってナノスケール半導体素子内における電子の挙動を明らかにし、「多電子波束」という新しい概念を提案している。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、半導体素子のスケーリングの現状、そして電子ダイナミクスを扱う上での問題点を特に長距離クーロン相互作用に焦点を絞って述べている。具体的には短チャネルでドレイン電圧が高いときには、電子は量子古典クロスオーバー領域の挙動を示すことを明らかにしており、この領域を扱う波束描像について述べている。

第2章では、本博士論文で用いる計算手法について詳細に説明している。ブロッホの定理に始まって有効質量近似の基本原則から第二量子化、さらに本研究で用いる時間依存ハートリー・フォック法について述べている。

第3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実験的に考察した。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。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章では、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章では、残された課題と今後の展望について議論している。

第7章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文ではナノスケール半導体デバイス中での電子ダイナミクスについて理論的な研究を行い、多電子波束という新しい物理概念を提案した。多電子波束という概念は今後の極微細半導体LSIを実現するために重要であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である塩川太郎君は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格があると判断した。