



量子サイズ構造半導体デバイスの量子輸送に関する研究

土屋, 英昭

(Degree)

博士 (工学)

(Date of Degree)

1993-03-31

(Date of Publication)

2007-08-29

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲1182

(JaLCD0I)

<https://doi.org/10.11501/3070628>

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1001182>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



博士論文

量子サイズ構造半導体デバイスの
量子輸送に関する研究

1993年1月

神戸大学大学院自然科学研究科

土屋英昭

内容梗概

近年の半導体結晶成長技術や微細加工技術の進歩により、既に設計通りの共鳴トンネルダイオードや量子井戸レーザ等の量子井戸構造デバイスの作製技術が立ち上がりつつあることから、量子井戸構造デバイスを設計するための設計技術を確立することが重要になってきている。本論文は、このような量子構造半導体デバイスを解析・設計するためのシミュレーション手法を確立することを目的として、量子統計を基にした一般的な量子輸送モデルであるウィグナー関数モデルを主に取り上げ、半導体量子構造デバイス特有の量子輸送モデルとして定式化させるために行った研究の成果をまとめたものである。まず、ウィグナー関数モデルを現実の半導体量子構造デバイスに適用するために、有効質量の位置変化や電子-電子相互作用を取り入れた輸送モデルの定式化を行い、典型的な量子構造電子デバイスである共鳴トンネルダイオードに適用して、その有用性を明らかにしている。また、量子井戸構造光デバイスであるアバランシェ・フォトダイオードや量子井戸レーザ、さらに、量子閉じ込めの次元を一つ上げた電子導波路（量子細線）にウィグナー関数モデルを適用し、これらのデバイスにおける量子輸送特性を議論している。

目次

1 序論	3
1.1 量子サイズ構造半導体デバイス	3
1.2 量子輸送モデル	7
2 量子力学的輸送方程式	10
2.1 有効質量方程式	10
2.1.1 有効質量方程式	10
2.1.2 ヘテロ接合における境界条件	16
2.1.3 有効質量方程式のダイナミックス	18
2.2 ウィグナー関数による輸送方程式の記述	22
2.2.1 密度行列とウィグナー関数	23
2.2.2 ウィグナー関数の運動方程式	26
2.2.3 古典的極限	28
2.2.4 モーメント方程式	29
2.3 透過確率を用いた定常解析	37
3 量子井戸構造デバイスの量子輸送モデル	43
3.1 ウィグナー関数モデル	43
3.1.1 有効質量の位置依存性を考慮した定式化	43
3.1.2 古典的極限	49
3.1.3 衝突項	52
3.1.4 境界条件	53
3.1.5 有限差分法による離散化	54
3.2 二重障壁構造共鳴トンネルダイオードの電子伝導	68
3.2.1 二重障壁構造における共鳴トンネル効果	68
3.2.2 電流・電圧特性	69
3.2.3 過渡応答特性	74
3.2.4 周波数応答特性	77

3.3	透過確率モデルとの比較	83
4	量子井戸構造光デバイスの電気伝導	85
4.1	アバランシェ・フォトダイオードの正孔量子輸送特性	85
4.1.1	SAM 型構造 APD	85
4.1.2	ウィグナー関数による正孔量子輸送の記述	86
4.1.3	ヘテロ界面における正孔蓄積の遷移層厚依存性	88
4.1.4	δ ドーピング接合	91
4.2	量子井戸レーザの電子・正孔量子輸送特性	93
4.2.1	SCH 構造量子井戸レーザ	93
4.2.2	ウィグナー関数による電子・正孔量子輸送の記述	94
4.2.3	定常キャリア分布	96
5	電子導波路の量子輸送モデル	99
5.1	スプリット・ゲート HEMT 構造電子導波路	99
5.2	ウィグナー関数モデル	101
5.2.1	電子導波路における定式化	101
5.2.2	イオン化不純物による散乱効果	106
5.2.3	境界条件と離散化	111
5.3	電子導波路の電気伝導	120
5.3.1	コンダクタンス量子化	120
5.3.2	非線形量子輸送特性	123
5.4	他のモデルとの比較	125
5.4.1	透過確率モデル	125
5.4.2	古典的移動度モデル	127
5.5	電子導波路の過渡応答特性	128
5.6	今後の課題	131
5.6.1	磁界効果	131
5.6.2	空間電荷効果	131
6	結論	132
	謝辞	134
	参考文献	135
	付録	140

Chapter 1

序論

1.1 量子サイズ構造半導体デバイス

分子線エピタキシー法(MBE)や有機金属気相成長法(MOCVD)などに代表される結晶成長技術の急速な進展により、原子層レベルで半導体結晶成長を制御することが可能になってきた。現在では、一原子層の厚さの程度で急激な組成変化を示し、電気的・光学的に極めて良質な半導体ヘテロ接合界面が、設計通りに作製できるようになっている。このようにして異なる二つの半導体材料を層状に交互に積み重ねた構造を半導体超格子構造または量子井戸構造と呼ぶ。図1.1に、単一および多重量子井戸構造の伝導帯および価電子帯のエネルギー分布を示す。多くのIII-V族半導体では、図1.1のようなバンド構造になる。伝導帯の電子あるいは価電子帯の正孔はポテンシャル障壁によって、物質Aの量子井戸内に閉じ込められるようになる。この時の量子井戸内の電子状態について考察する。今、簡単のため、図1.1(a)の単一量子井戸でポテンシャル障壁の高さが無限大の場合を考える。量子井戸

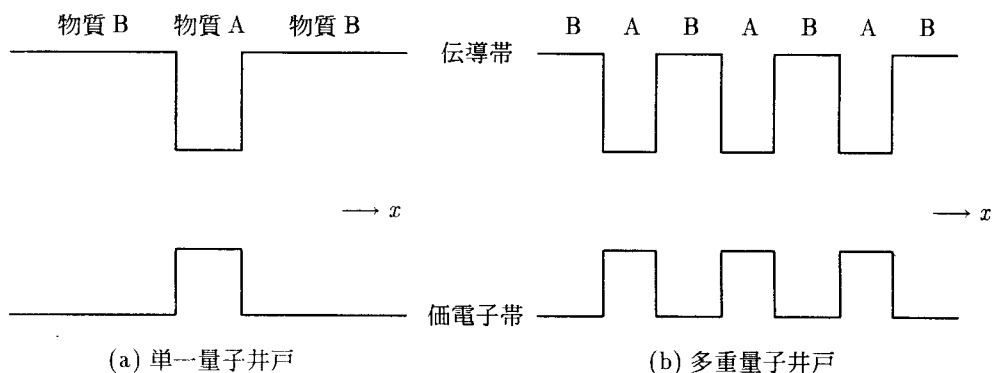


図1.1: 量子井戸構造のエネルギー分布

の幅を L_x をすると、井戸内電子の x 方向のエネルギー固有値は、 n を量子数 ($n = 1, 2, 3, \dots$) として

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_x} \right)^2 \quad (1.1)$$

で与えられる。但し、 m^* および \hbar は、それぞれ、電子の有効質量および Planck 定数 h を 2π で割った定数である。このように x 方向の電子の運動は量子化され、離散的なエネルギー準位をとるようになる。次に、このような量子効果が顕著になる条件を考える。

井戸面内では電子は自由電子的に運動するので、電子の全エネルギー E は、 k_y 、 k_z を面内の波数として

$$E = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_x} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_y^2 + k_z^2) \quad (1.2)$$

と表される。一方、バルク結晶では

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} \quad (1.3)$$

で表される連続的なエネルギー状態をとる。上式を、 $\lambda = h/p$ で定義されるド・ブロイ波長 λ を用いて表すと

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \quad (1.4)$$

となる。式 (1.2)、(1.4) を比較すると、量子効果が顕著になるためには

$$L_x \leq \lambda \quad (1.5)$$

でなければならないことが分かる。GaAs を例にすると、室温 (300K) で $\lambda \simeq 250\text{\AA}$ となり、現在の結晶成長技術を用いるとこの程度の量子井戸は容易に作製することができる。

近年、この量子井戸構造を電子デバイスや光デバイスに導入することが活発に行われるようになった。デバイスの特性改善を目的として量子井戸レーザや超格子 APD などが、新機能を実現するデバイスとして光変調器、共鳴トンネルダイオード、HEMT などが開発されている。これらのデバイスを

表 1.1: 量子井戸構造半導体デバイスの分類

分類	定義	代表的なデバイス
閉じた系	エネルギー固有状態をもつ系	HEMT 構造
漏れのある系	エネルギー共鳴状態をもつ系	光シュタルク効果
開いた系	量子輸送を利用する系	共鳴トンネルダイオード 量子井戸レーザ 超格子 APD

解析する立場から見直してみると、表 1.1 に示すように三つの系に分類して考えることができる [1]。電子波が量子井戸部に閉じ込められ、離散的なエネルギー固有状態が存在する系は、閉じた系を構成すると考えられる。代表的なデバイス例は、図 1.2 に示す HEMT 構造である。図 1.3 には、ショットキーゲートに $-0.3V$ の電圧を加えた時の $77K$ におけるポテンシャル分布、エネルギー固有値および固有波動関数を示す。このように HEMT 構造では、電子波はヘテロ界面付近に生じる三角ポテンシャルによって閉じ込められた状態で、界面に沿って伝搬するようになる。次に、図 1.4 に示すように、固有エネルギー状態にある量子井戸に垂直に電界を加えると、電子と正孔の波動関数は、それぞれ反対方向に移動し一部が井戸から漏れ出す。電子のエネルギーは離散的な値ではなく共鳴特性を示す連続した値を取るようになる。このようなデバイスは、漏れのある系を構成すると考えられる。図 1.5

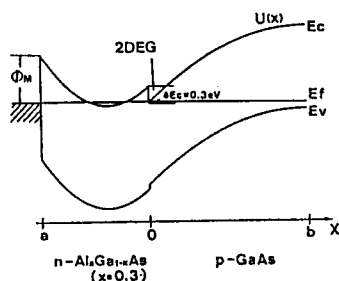


図 1.2: HEMT 構造のエネルギーバンド

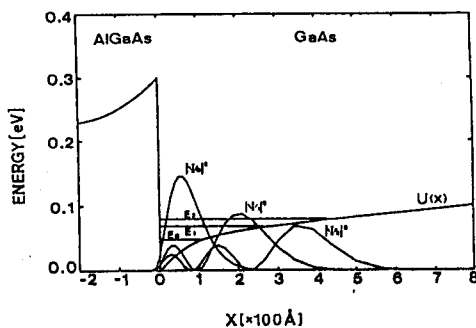


図 1.3: HEMT 構造の固有エネルギーと固有関数 (ゲート電圧 $-0.3V$, $77K$)

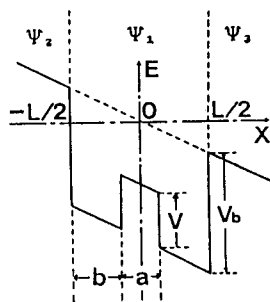


図 1.4: 電界印加時の量子井戸構造のポテンシャル分布

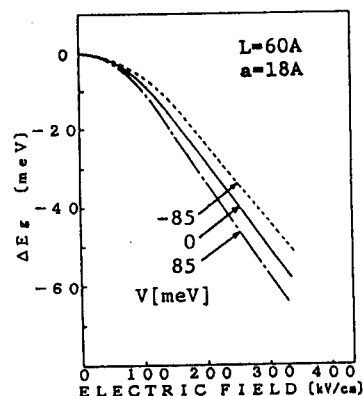


図 1.5: 電子と重い正孔の共鳴基底準位エネルギー間隔の電界依存性

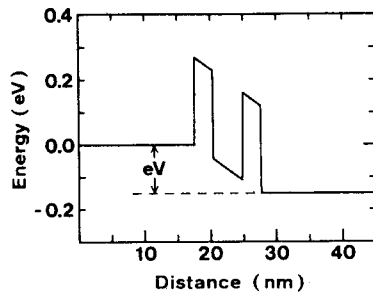


図 1.6: 共鳴トンネルダイオードのポテンシャル分布

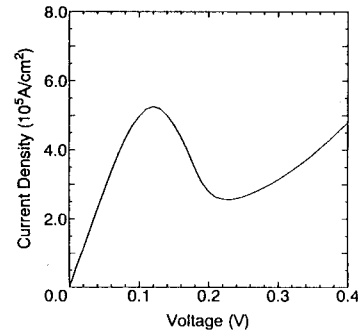


図 1.7: 共鳴トンネルダイオードの電流・電圧特性

は、電子と重い正孔の共鳴基底準位エネルギー間の電界依存性を示す。量子井戸内のポテンシャル構造を変化させることによって、電界依存性を制御できることが示されている。また、量子サイズ構造の両端に電極を有し電極間の量子輸送を利用するデバイスは、開いた系を構成すると考えられる。代表的なデバイス例は、図 1.6 に示す共鳴トンネルダイオードである。図 1.7 には、その電流・電圧特性を示す。ある電圧条件下では、共鳴トンネル効果によって電流が共鳴的に増加するために、電流・電圧特性は負性抵抗を示すようになる。量子輸送を利用する系には、将来の高速光通信や並列光コンピューティングシステムを実現するためのキーデバイスとして期待されるものが多く含まれており、本研究においては、この量子輸送を利用する半導体デバイスを研究の対象にした。

このような量子サイズ構造を含む半導体デバイスを解析・設計するには、従来の半導体デバイス(寸法 $> 0.1 \mu\text{m}$) の解析に用いられてきた古典的なシミュレーション手法に代わって、次に述べる三点を考慮できる量子力学的シミュレーション手法を用いなければならない。まず第一に、キャリアの輸送現象を量子・統計力学に基いて記述できる解析法でなければならない。特に、エネルギーの離散化やトンネリング等の量子効果を正確に表現できることが重要である。第二に、量子構造デバイスが、特に、期待されている高速応答特性を議論するために、デバイスの静特性だけでなく、ダイナミックな特性解析にも適用できる手法でなければならない。第三に、キャリアの散乱過程を厳密に取り入れることのできる解析法である必要がある。古典的輸送モデルでは、キャリアの散乱は瞬時に起こるとする仮定を用いているが、キャリアの散乱は有限時間内で起こるので、この仮定は古典論においても正しくない。この散乱に要する時間は、散乱と散乱の間の時間、つまり緩和時間 ($\sim 0.1 \text{ps}$) よりも短いと考えられる。寸法が $0.5 \mu\text{m}$ 程度のデバイスでは、キャリアが電極間を走行するのに要する時間はこの緩和時間よりもずっと長くなるので、この寸法程度のデバイスの特性を議論する時には散乱時間は事実上無視しても良いと考えられる。しかし、デバイスの寸法が数百 \AA 以下になってくると、

キャリアの走行時間が散乱時間と同程度になってくるので、散乱が瞬時に起こるとする仮定は成り立たなくなる。また、散乱の有限時間内にキャリアは電界の影響を受け、初期および終状態の波数ベクトルは時間とともに線形的に変化する。一方、エネルギーは波数ベクトルの線形関数にはならないために、両状態間のエネルギー差も時間とともに変化するようになる。このために、散乱による遷移確率が電界によって変更を受けることになる。これは、有限時間衝突電界効果 (intra-collisional field effect, ICFE)[2] と呼ばれている現象で、特に、量子サイズ構造の量子輸送特性に重要な影響を及ぼすと考えられる。

1.2 量子輸送モデル

本節では、量子輸送シミュレーションに用いられている主なモデルとして、密度行列、量子モンテカルロ法、ウィグナー関数、グリーン関数、経路積分法についてその概要を簡単に述べる。

密度行列は、半導体デバイス内のキャリア輸送を量子統計的に記述することができる最も基本的な概念である。半導体内のキャリア密度や電流密度等の物理量は、この密度行列を用いて表現することができる。密度行列の運動方程式は Schrödinger 方程式から導かれ、具体的なハミルトニアンを与えることによって数値的に解くことができる。バルク半導体の場合と違って、共鳴トンネルダイオードや量子井戸レーザのようにヘテロ接合を有する半導体デバイスでは、キャリアの波動関数が位置によって変化するので座標表示された密度行列が用いられる [3],[4]。光学フォノンや不純物等によるキャリアの散乱過程は、通常、現象論的な緩和時間近似を用いて取り入れられる。また、キャリアの空間電荷効果を考慮するために、密度行列の運動方程式とポアソン方程式を自己無撞着に解く方法が取られている。これまでに、この密度行列法を用いて、共鳴トンネルダイオードの電流・電圧特性やスイッチング特性を計算した結果が報告されており [4]、後で述べるウィグナー関数モデルで解析した結果と良い対応をしていることが分かっている。

また、最近、第二量子化した電子-フォノン相互作用ハミルトニアンに基いて電子の散乱過程を取り扱い、モンテカルロ法を用いて密度行列の運動方程式を数値的に解く方法が報告されている [5]-[7]。この方法は、量子モンテカルロ法と呼ばれており、起こり得るすべての散乱過程を乱数を使ってランダムに発生させることは古典的なモンテカルロ・シミュレーションと同じである。文献 [5]-[7] では、量子モンテカルロ法をバルクの GaAs に適用して、前節で述べた有限の散乱時間や ICFE のような量子効果について、古典論との比較を行っている。散乱が起こり始めてからの非常に短い時間では、量子論と古典論の差が顕著になり、量子効果が無視できなくなることが示されている。実際の量子サイズ構造デバイスへの適用は未だ行われていないが、有限散乱時間や ICFE 等の量子効果を考慮した量子輸送特性の解析が可能であり、より高精度なデバイスシミュレーション手法として非常に有力であると考えられる。

ウィグナー関数は、分布関数の概念を量子輸送問題に導入するために考えられたものであり、そ

の性質は上述の密度行列や古典的ボルツマン分布関数と密接な関係を持っている。ウィグナー関数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ は、座標表示された密度行列を相対座標に関してフーリエ変換した位相空間上の関数である。 $f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ を用いてキャリア密度や電流密度等の物理量を表すことができるが、それらの式は古典論での表現式に良く対応している。また、キャリアの量子輸送現象を記述するウィグナー関数に関する Liouville 方程式は、 $\hbar \rightarrow 0$ の古典的極限においては、量子力学特有のポテンシャルの非局所性が消えて、古典的ボルツマン輸送方程式と完全に一致することや、Liouville 方程式の両辺を波数 \mathbf{k} で積分すると、古典的な連続の式が導かれること等、従来の古典論との対応が非常に良いことが知られている。散乱過程は、古典的ボルツマン輸送方程式と同様に、現象論的に緩和時間近似で取り入れられることが多い。ウィグナー関数モデルは、量子サイズ構造電子デバイス [8]-[15] や光デバイス [16] の静特性だけでなく、ダイナミックな特性にも適用できる有力な手法であり、近年活発な研究が行われているが、解決すべき問題も数多く残されている。最近、著者らは、有効質量の位置変化や電子-電子相互作用を正確に取り入れたウィグナー関数モデルの定式化に初めて成功し、これらの効果が共鳴トンネルダイオードの輸送特性に重要な役割を果たすことを示した [14]。また、ウィグナー関数モデルにバレー間散乱 [17] や磁場の効果 [18],[19] を取り入れた例も報告されている。さらに、ウィグナー関数モデルを光デバイスである長波長アバランシェ・フォトダイオード [16] や量子閉じ込めの次元を一つ上げた電子導波路 (量子細線) [20][21] へ適用することにも成功しており、その有用性が明らかになってきている。上述の論文 [16] は光デバイスの量子輸送を議論した最初の論文である。このウィグナー関数モデルを用いた量子輸送シミュレーションについては、第三章から第五章で詳しく議論する。

多体効果やキャリアの散乱効果を考慮した量子輸送問題を議論するには、非平衡グリーン関数に基付いた理論が有力である。二つの位置と時間で定義される相関関数 $G^<(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2)$ を Weyl 変換によって、運動量 \mathbf{p} 、エネルギー E 、位置 \mathbf{r} 、時間 t で表した量子分布関数 $G^<(\mathbf{p}, E, \mathbf{r}, t)$ を用いると、トンネリングや量子干渉効果だけでなく、多体効果や散乱の効果を厳密な形で取り入れた量子力学的輸送方程式を定式化することができる [12]。その量子力学的輸送方程式の両辺をエネルギー E で積分して、ウィグナー関数が量子分布関数 $G^<(\mathbf{p}, E, \mathbf{r}, t)$ をエネルギー E で積分した形で表現されることを用いると、ウィグナー関数に関する Liouville 方程式が導かれることが分かっている。このように、非平衡グリーン関数を用いて定式化された輸送方程式は、より一般化された量子輸送問題を記述することができるが、式の複雑さのため実際に計算を実行することは困難であり、未だ試みられたことはない。

これまでに述べた量子輸送モデルは、全て Schrödinger 方程式に基付いて定式化されている。量子力学の別の記述法として、Feynman の経路積分法がある。経路積分法では、初期状態から終状態への移行が可能な全ての経路が同時に存在するとし、それらの振幅の和から終状態における粒子の確率振幅を求める。 $\hbar \rightarrow 0$ の古典的極限では、古典的な経路だけが残り、古典論に移行することが知られている。この経路積分法を用いて共鳴トンネル現象を考えると、透過率等の量が量子井戸内で起こる多重反射の回数の関数として表現できるようになる [22]。散乱が起こると、その多重反射が途切れる

と考えて、経路の和を散乱が起こるまでの反射の回数で打ち切ることで散乱の影響を調べることができる。

本研究では、以上の量子力学的輸送モデルの中、量子統計を基にした一般的な量子輸送モデルであるウィグナー関数モデルを主に取り上げ、半導体量子構造デバイス特有の量子輸送モデルとして定式化させるための研究を行った。

本論文の構成は、以下のようになっている。第二章では、 $k \cdot p$ 摂動論に基付いた有効質量方程式の導出とウィグナー関数による量子輸送方程式の記述について、これまでに行われてきた議論をまとめている。第三章では、ウィグナー関数モデルを現実の半導体量子構造デバイスに適用するために、新たに、有効質量の位置変化と電子-電子相互作用を取り入れた輸送モデルの定式化を行い、典型的な量子構造電子デバイスである共鳴トンネルダイオードに適用して、その有用性を明らかにしている。第四章では、ウィグナー関数モデルを量子井戸構造光デバイスに適用し、長波長アバランシェ・フォトダイオードのヘテロ界面における正孔蓄積や量子井戸構造半導体レーザのキャリア量子輸送特性について議論している。第五章では、量子閉じ込めの次元を一つ上げた電子導波路（量子細線）にウィグナー関数モデルを適用するため、低温でのイオン化不純物散乱を取り入れたモデルの定式化を行い、量子化コンダクタンスへの散乱効果の影響や室温における電子導波路のトランジスター動作の可能性について検討を行っている。第六章では、結論として、本論文の総括を行っている。

Chapter 2

量子力学的輸送方程式

本章では、量子輸送問題を議論する際の基礎となる有効質量方程式と、バルク半導体中の量子輸送を記述するウィグナー関数モデルについて、従来の議論をまとめている。ウィグナー関数モデルを現実の半導体量子構造デバイスに適用するために著者が提案している新しいウィグナー関数モデルについては、第三章で議論することにする。

2.1 有効質量方程式

2.1.1 有効質量方程式

半導体結晶中では、電子は結晶の周期ポテンシャル中を伝搬するために、真空中の自由電子とは異なった振舞いを示すようになる。本節では、このような半導体中の電子の運動を量子力学的に記述する際の出発点となる有効質量方程式を、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論に基いて議論する [23]。

バルク中の電子に対する次の Schrödinger 方程式を考える。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V_{\text{per}}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

上式で、 m_0 は自由電子の質量、 $V_{\text{per}}(\mathbf{r})$ は半導体結晶の周期ポテンシャル、 $U(\mathbf{r})$ は電界やバンド・ベンディングなどによるポテンシャル変化を表す。ここでは、 $U(\mathbf{r})$ は位置に関してゆっくり変化するると仮定する。 $U(\mathbf{r})=0$ の時、式(2.1)は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V_{\text{per}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

となり、上式の解は次のブロッホ関数で与えられる。

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) : \text{周期関数}) \quad (2.3)$$

次に、 $U(\mathbf{r}) \neq 0$ とし、Schrödinger 方程式(2.1)の波動関数を式(2.3)のブロッホ関数を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

と展開する。上式を式(2.1)に代入すると次のようになる。

$$\sum_n \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V_{\text{per}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_n \sum_{\mathbf{k}} (U(\mathbf{r}) - E) \phi_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.5)$$

上式の左辺第一項に式(2.2)を用いると

$$\sum_n \sum_{\mathbf{k}} [E_n(\mathbf{k}) - E] \phi_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_n \sum_{\mathbf{k}} U(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.6)$$

となる。さらに、上式に左から $\psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})$ を掛けて座標空間で積分すると

$$\sum_n \sum_{\mathbf{k}} [E_n(\mathbf{k}) - E] \phi_n(\mathbf{k}) \int d\mathbf{r} \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \int d\mathbf{r} \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0$$

となる。ここで、次のブロッホ関数の規格直交性を用いる。

$$\int d\mathbf{r} \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (2.7)$$

但し、 δ は Kronecker のデルタ関数である。この時、次式が得られるのが分かる。

$$[E_{n'}(\mathbf{k}') - E] \phi_{n'}(\mathbf{k}') + \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \int d\mathbf{r} \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.8)$$

上式において n と n' 、 k と k' を入れ換えると次のようになる。

$$[E_n(\mathbf{k}) - E] \phi_n(\mathbf{k}) + \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}'} \phi_{n'}(\mathbf{k}') \int d\mathbf{r} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.9)$$

ここで、上式の左辺第二項に現れるポテンシャルの行列要素について考える。まず、式(2.3)を用いて行列要素を計算すると

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r} e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

となる。ここで、 $u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ は、 \mathbf{r} に関しての周期関数であるから次のようにフーリエ級数展開できる。

$$u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', \mathbf{K}) e^{-j\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.11)$$

また、フーリエ係数 $c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', \mathbf{K})$ は次式で与えられる。

$$c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', \mathbf{K}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{j\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.12)$$

式 (2.11) を式 (2.10) に代入すると、行列要素は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\int dr \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{K}} \int dr e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) e^{-j\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', \mathbf{K}) \\
&= \sum_{\mathbf{K}} c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', \mathbf{K}) \int dr U(\mathbf{r}) e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} \\
&= \sum_{\mathbf{K}} \bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K}) c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', \mathbf{K}) \tag{2.13}
\end{aligned}$$

但し

$$\bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K}) = \int dr U(\mathbf{r}) e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} \tag{2.14}$$

と置いた。

今、電界等のポテンシャル変化 $U(\mathbf{r})$ が格子間隔に比べてゆっくり変化すると仮定する。この時、 $\bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K})$ は

$$\bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K}) \simeq U(\mathbf{r}) \int dr e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} = U(\mathbf{r}) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K}) \tag{2.15}$$

となる。上式より、 $\bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K})$ は $\mathbf{K} = \mathbf{k}-\mathbf{k}'$ の時のみ値を持つようになることが分かる。ここでは、GaAs などの III-V 族半導体を想定して伝導帯および価電子帯の頂上が $\mathbf{k} = 0$ に位置している場合を考えることにする。ブロッホ関数で展開された波動関数 (2.4) においては、 $\mathbf{k} = 0$ 付近の波数が主に寄与するようになるので、 $\bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{K})$ において $\mathbf{K} \neq 0$ の項を無視することにする。この時、行列要素 (2.13) は次のように近似できる。

$$\int dr \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \simeq \bar{U}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0) \tag{2.16}$$

また、フーリエ係数 $c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0)$ は式 (2.12) より

$$c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dr u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \tag{2.17}$$

となる。この $c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0)$ の具体的な表現を得るために、一次の $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 摂動論から得られる次の周期関数 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を上式に用いることにする。

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}(\mathbf{k})}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m0}(\mathbf{r}) \tag{2.18}$$

但し

$$H'_{mn}(\mathbf{k}) = \int dr u_{m0}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} u_{n0}(\mathbf{r}) \tag{2.19}$$

を表す。無視された二次以上の項は、 $\{H'_{mn}/[E_n(0) - E_m(0)]\}^2$ のオーダー以下になる。 $\mathbf{k} = 0$ で縮退がなく、バンド n と m の間が大きなエネルギーギャップで分離されている場合には、式 (2.18) のような一次までの近似で十分である。まず、 $n \neq n'$ の時、 $c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0)$ は次のように計算される。

$$\begin{aligned}
c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} \left[u_{n0}^*(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^*(\mathbf{k})}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m0}^*(\mathbf{r}) \right] \left[u_{n'0}(\mathbf{r}) + \sum_{m' \neq n'} \frac{H_{m'n'}'(\mathbf{k}')}{E_{n'}(0) - E_{m'}(0)} u_{m'0}(\mathbf{r}) \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} \left[u_{n0}^*(\mathbf{r})u_{n'0}(\mathbf{r}) + \sum_{m' \neq n'} \frac{H_{m'n'}'(\mathbf{k}')}{E_{n'}(0) - E_{m'}(0)} u_{n0}^*(\mathbf{r})u_{m'0}(\mathbf{r}) \right. \\
&\quad + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^*(\mathbf{k})}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m0}^*(\mathbf{r})u_{n'0}(\mathbf{r}) \\
&\quad \left. + \sum_{m \neq n} \sum_{m' \neq n'} \frac{H_{mn}^*(\mathbf{k})}{E_n(0) - E_m(0)} \frac{H_{m'n'}'(\mathbf{k}')}{E_{n'}(0) - E_{m'}(0)} u_{m0}^*(\mathbf{r})u_{m'0}(\mathbf{r}) \right] \\
&\simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \left[\sum_{m' \neq n'} \frac{H_{m'n'}'(\mathbf{k}')}{E_{n'}(0) - E_{m'}(0)} \delta_{nm'} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^*(\mathbf{k})}{E_n(0) - E_m(0)} \delta_{n'm} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \left[\frac{H_{nn'}'(\mathbf{k}')}{E_{n'}(0) - E_n(0)} + \frac{H_{n'n}^*(\mathbf{k})}{E_n(0) - E_{n'}(0)} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{H_{n'n}^*(\mathbf{k}) - H_{nn'}'(\mathbf{k}')}{E_n(0) - E_{n'}(0)} \tag{2.20}
\end{aligned}$$

右辺に現れる分数の分子 $H_{n'n}^*(\mathbf{k}) - H_{nn'}'(\mathbf{k}')$ について計算を進めると

$$\begin{aligned}
H_{n'n}^*(\mathbf{k}) - H_{nn'}'(\mathbf{k}') &= \left[\int d\mathbf{r} u_{n'0}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} u_{n0}(\mathbf{r}) \right]^* - \int d\mathbf{r} u_{n0}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p} u_{n'0}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \int d\mathbf{r} u_{n'0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n0}(\mathbf{r}) - \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}' \cdot \int d\mathbf{r} u_{n0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'0}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{p}_{nn'} \tag{2.21}
\end{aligned}$$

とできる。但し

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int d\mathbf{r} u_{n0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'0}(\mathbf{r}) \tag{2.22}$$

と置いた。また、 $n = n'$ の時は

$$c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} u_{n0}^*(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \tag{2.23}$$

と近似できる。以上より、 $c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0)$ は

$$c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}', 0) \simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \left\{ \delta_{nn'} + \frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m_0 [E_n(0) - E_{n'}(0)]} (1 - \delta_{nn'}) \right\} \tag{2.24}$$

と表すことができる。これを式(2.16)に代入すると

$$\int d\mathbf{r} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^3} \bar{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [\delta_{nn'} + A_{nn'} (1 - \delta_{nn'})] \tag{2.25}$$

が得られる。 $A_{nn'}$ は式(2.24)の右辺第二項からの非対角成分を表している。弱ポテンシャルの場合には、この非対角項 $A_{nn'}$ が無視できる。これは、二次以上の摂動エネルギーを無視することに相

当する。式(2.25)をこのように近似して式(2.9)に代入すると、次式が得られる。

$$[E_n(\mathbf{k}) - E] \phi_n(\mathbf{k}) + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi_n(\mathbf{k}') = 0 \quad (2.26)$$

$\mathbf{k} = 0$ 付近の領域では、エネルギー $E(\mathbf{k})$ は二次の摂動論で近似でき、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} E_n(\mathbf{k}) &= E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \sum_{m \neq n} \frac{H'_{nm} H'_{mn}}{E_n(0) - E_m(0)} \\ &= E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i,j} k_i k_j \sum_{m \neq n} \frac{p_{nm}^i p_{mn}^j}{E_n(0) - E_m(0)} \end{aligned} \quad (2.27)$$

$(i, j = x, y, z)$

上式の $E_n(0)$ は、バンド端エネルギーを表している。上式から、逆有効質量テンソルは

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \\ &= \frac{1}{m_0} \left[\delta_{ij} + \frac{2}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{nm}^i p_{mn}^j}{E_n(0) - E_m(0)} \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

となる。GaAs のような等方性の半導体では、式(2.27)と(2.28)から

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (2.29)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{p_{nm} p_{mn}}{E_n(0) - E_m(0)} \quad (2.30)$$

と表される。上式を式(2.26)に用いると、次の方程式が得られる。

$$\left[E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - E \right] \phi_n(\mathbf{k}) + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi_n(\mathbf{k}') = 0 \quad (2.31)$$

さらに、上式の両辺をフーリエ変換すると

$$\sum_{\mathbf{k}} \left[E_n(0) - E + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \right] \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi_n(\mathbf{k}') e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 0 \quad (2.32)$$

となる。左辺の各項について計算すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} &= \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \left(\sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right) \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} [E_n(0) - E] \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = [E_n(0) - E] \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi_n(\mathbf{k}') e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') e^{-j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \phi_n(\mathbf{k}') e^{-j\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \\
&\simeq \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{U}(\mathbf{r}) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') e^{-j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \phi_n(\mathbf{k}') e^{-j\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \\
&= (2\pi)^3 \tilde{U}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{2.35}
\end{aligned}$$

但し、上式の導出の過程において、式(2.15)で $\mathbf{K} = 0$ とした $\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = U(\mathbf{r})(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ を用いた。以上の三式を式(2.32)に代入すると次の有効質量方程式が得られる。

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = [E - E_n(0)] F(\mathbf{r})} \tag{2.36}$$

ここで

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{2.37}$$

は有効質量方程式(2.36)の固有関数であり、電子波の包絡線関数を表している。有効質量方程式(2.36)とSchrödinger方程式(2.1)を比べると、結晶の周期ポテンシャルの影響が有効質量 m^* という形で取り入れられていることが分かる。

最後に、波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ と包絡線関数 $F(\mathbf{r})$ の関係を調べておく。ブロッホ関数(2.3)と周期関数(2.18)を式(2.4)に代入すると、波動関数は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left[u_{n0}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn}}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m0}(\mathbf{r}) \right] \\
&= \left[\sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] u_{n0}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{m \neq n} \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn} \frac{u_{m0}(\mathbf{r})}{E_n(0) - E_m(0)} \tag{2.38}
\end{aligned}$$

ここで

$$\sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn} = \sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \left(j \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \cdot \mathbf{p}_{mn} \tag{2.39}$$

の関係を使うと、式(2.38)は次式で表されるようになる。

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= F(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{j \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\sum_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) e^{-j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \cdot \mathbf{p}_{mn}}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m0}(\mathbf{r}) \\
&= F(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{j \frac{\partial F(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{p}_{mn}}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m0}(\mathbf{r}) \tag{2.40}
\end{aligned}$$

上式より、電子の波動関数は、 $\mathbf{k} = 0$ のブロッホ関数 $u_{n0}(\mathbf{r})$ と包絡線関数 $F(\mathbf{r})$ の積 $F(\mathbf{r})u_{n0}(\mathbf{r})$ と $F(\mathbf{r})$ の勾配 $\partial F/\partial \mathbf{r}$ に比例する項で構成されているのが分かる。

2.1.2 ヘテロ接合における境界条件

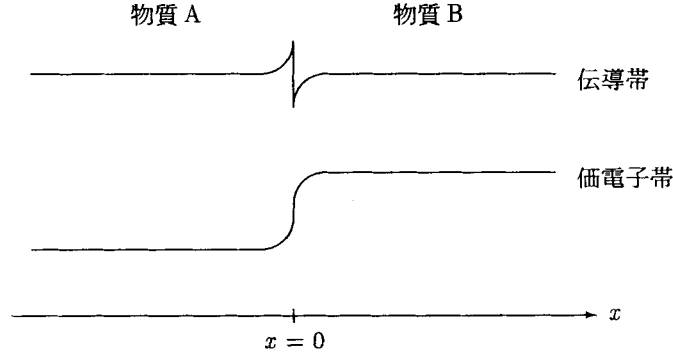


図 2.1: ヘテロ接合のエネルギー分布

図 2.1 に示すような半導体ヘテロ接合を含む場合には、電子の包絡線関数 $F(\mathbf{r})$ がヘテロ界面の両側で変化するようになる。その時のヘテロ界面での包絡線関数に関する境界条件について考える。この場合には、有効質量 m^* やバンド端エネルギー $E_n(0)$ が位置とともに変化するために、有効質量方程式 (2.36) を次式のように変形する必要がある。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) + U(\mathbf{r}) + E_n^{(0)}(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}) \quad (2.41)$$

上式のハミルトニアンはエルミート性を保つように、運動エネルギーの項が修正されている (付録 A)。ここでは、簡単のため次元 (x 方向) で考えることにする。ヘテロ界面の位置を $x = 0$ に置き、有効質量やバンド端エネルギーが無限小の幅 2ε で変化するとする。この時、有効質量方程式 (2.41) を $x = -\varepsilon$ から $x = +\varepsilon$ の間で積分した後、 $\varepsilon \rightarrow 0$ とする。

$$-\frac{\hbar^2}{2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \right) + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx [U(x) + E_n^{(0)}(x) - E] F(x) = 0 \quad (2.42)$$

左辺第一項と第二項をそれぞれ計算すると

$$\text{(左辺第一項)} = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^*(x)} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \right]_{-\varepsilon}^{\varepsilon} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*(\varepsilon)} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \Big|_{x=\varepsilon} - \frac{1}{m^*(-\varepsilon)} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \Big|_{x=-\varepsilon} \right)$$

$$\text{(左辺第二項)} = [U(0) + E_n^{(0)} - E] \times \frac{1}{2} \times 2\varepsilon \times [F(\varepsilon) - F(-\varepsilon)]$$

となる。これらより、式 (2.42) は次のようになる。

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*(\varepsilon)} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \Big|_{x=\varepsilon} - \frac{1}{m^*(-\varepsilon)} \frac{\partial F(x)}{\partial x} \Big|_{x=-\varepsilon} \right) + \varepsilon [U(0) + E_n^{(0)} - E] [F(\varepsilon) - F(-\varepsilon)] = 0 \quad (2.43)$$

上式において $\varepsilon \rightarrow 0$ とすると次の条件が得られる。

$$\boxed{\frac{1}{m_A^*} \frac{\partial F^A}{\partial x} = \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial F^B}{\partial x}} \quad (2.44)$$

これを式(2.43)に代入すると次のもう一つの条件が得られる。

$$\boxed{F^A = F^B} \quad (2.45)$$

ここで、記号 A と B はそれぞれヘテロ界面の左側と右側の物質の値であることを表している。式(2.45)のように包絡線関数 $F(x)$ が連続の時に全波動関数 ψ も連続となるためには、式(2.40)の右辺第二項が無視できて、さらに、周期関数 $u_{n0}(x)$ に関して

$$u_{n0}^A \simeq u_{n0}^B \quad (2.46)$$

という仮定が必要であることに注意されたい。

包絡線関数に関する境界条件(2.44)と(2.45)は、物理的にはヘテロ界面における確率密度の流れの保存を与えていることを以下に示す。まず、ヘテロ界面の左側での確率密度の流れ J_A を波動関数 ψ_A (2.40) を用いて計算すると次のようになる。

$$\begin{aligned} J_A &= \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \int dx \psi_A^* \frac{\partial \psi_A}{\partial x} \\ &= \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \int dx \left[F^{A*} u_{n0}^{A*} + \sum_{m \neq n} \frac{-j\hbar \frac{\partial F^A}{\partial x} p_{mn}^*}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} u_{m0}^{A*} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\partial F^A}{\partial x} u_{n0}^A + F^A \frac{\partial u_{n0}^A}{\partial x} + \sum_{m \neq n} \frac{j\hbar \frac{\partial^2 F^A}{\partial x^2} p_{mn}}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} u_{m0}^A + \sum_{m \neq n} \frac{j\hbar \frac{\partial F^A}{\partial x} p_{mn}}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} \frac{\partial u_{m0}^A}{\partial x} \right] \\ &= \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \left(\int dx F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} u_{n0}^{A*} u_{n0}^A + \int dx F^{A*} F^A u_{n0}^{A*} \frac{\partial u_{n0}^A}{\partial x} \right. \\ &\quad + \sum_{m \neq n} \frac{j\hbar p_{mn}}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} \left[\int dx F^{A*} u_{n0}^{A*} \frac{\partial^2 F^A}{\partial x^2} u_{m0}^A + \int dx F^{A*} u_{n0}^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \frac{\partial u_{m0}^A}{\partial x} \right] \\ &\quad + \sum_{m \neq n} \frac{-j\hbar p_{mn}^*}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} \left\{ \int dx \frac{\partial F^A}{\partial x} u_{m0}^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} u_{n0}^A + \int dx \frac{\partial F^A}{\partial x} u_{m0}^{A*} F^A \frac{\partial u_{n0}^A}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{m \neq n} \frac{\hbar^2 |p_{mn}|^2}{\{m_0(E_n(0) - E_m(0))\}^2} \left[\int dx \frac{\partial F^A}{\partial x} u_{m0}^{A*} \frac{\partial^2 F^A}{\partial x^2} u_{m0}^A + \int dx \frac{\partial F^A}{\partial x} u_{m0}^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \frac{\partial u_{m0}^A}{\partial x} \right] \right\} \right) \end{aligned}$$

ここで、 F^A 、 F^B 、 $\partial F^A/\partial x$ および $\partial F^B/\partial x$ は周期関数 $u_{n0}(x)$ に比べてゆっくり変化するので、これらを積分の外に出し、次の関係を用いる。

$$\int dx u_{n0}^{A*} u_{m0}^A = \delta_{nm} \quad , \quad \int dx u_{n0}^{A*} \frac{\partial u_{n0}^A}{\partial x} = 0 \quad , \quad \int dx u_{n0}^{A*} \frac{\partial u_{m0}^A}{\partial x} = -\frac{j}{\hbar} p_{nm}$$

さらに、 $\hbar^2 |p_{mn}|^2 / \{m_0(E_n(0) - E_m(0))\}^2$ の項は他の項に比べて小さいとして無視すると、 J_A は次のようになる。

$$J_A \simeq \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \left[F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} + \sum_{m \neq n} \frac{j\hbar p_{mn}}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} \frac{-j}{\hbar} p_{nm} F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{m \neq n} \frac{-j\hbar p_{mn}^*}{m_0(E_n(0) - E_m(0))} \frac{-j}{\hbar} p_{mn} F^A \frac{\partial F^{A*}}{\partial x} \Big] \\
= & \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} + \frac{1}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn} p_{nm}}{E_n(0) - E_m(0)} F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right. \\
& \left. - \frac{1}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn}^* p_{nm}^*}{E_n(0) - E_m(0)} F^A \frac{\partial F^{A*}}{\partial x} \right) \\
= & \frac{\hbar}{m_0} \frac{1}{2j} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} + \frac{1}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn} p_{nm}}{E_n(0) - E_m(0)} F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right. \\
& \left. + \frac{1}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn} p_{nm}}{E_n(0) - E_m(0)} F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} - \text{c.c.} \right) \\
= & \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} + \frac{2}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn} p_{nm}}{E_n(0) - E_m(0)} F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right) \\
= & \hbar \left(\frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{p_{mn} p_{nm}}{E_n(0) - E_m(0)} \right) \text{Im} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right) \\
= & \frac{\hbar}{m_A^*} \text{Im} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right) \tag{2.47}
\end{aligned}$$

上式における最後の等式では、式(2.30)の関係を用いた。結局、物質 A 内での確率密度の流れ J_A は

$$J_A = \frac{\hbar}{m_A^*} \text{Im} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right) \tag{2.48}$$

となり、境界条件(2.44)と(2.45)が与えられると

$$\frac{\hbar}{m_A^*} \text{Im} \left(F^{A*} \frac{\partial F^A}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{m_B^*} \text{Im} \left(F^{B*} \frac{\partial F^B}{\partial x} \right) \tag{2.49}$$

が成り立つことから、ヘテロ界面において確率密度の流れが保存されていることが分かる。

2.1.3 有効質量方程式のダイナミックス

前節までの議論では、電界等の外力が定常的に加わっている状態を考えている。その場合には、電子は有効質量 m^* を持った粒子として記述できることが分かった。しかし、外力が加わった直後の非常に短い時間内では、電子の質量は定常状態の有効質量 m^* でなく、自由電子の質量 m_0 で加速されることが知られている[24]。本節では、このような外力印加直後の電子の運動を、時間を含む摂動論を用いて議論する。

時間に依存する Schrödinger 方程式は次式で表される。

$$-j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi = (H_0 + H') \psi \tag{2.50}$$

但し、 H' は摂動ハミルトニアンを表している。 H_0 は摂動のない時のハミルトニアンで、次式を満たしている。

$$H_0 u_n = E_n u_n \quad (2.51)$$

但し、 E_n および u_n は、それぞれハミルトニアン H_0 の固有値および固有関数である。この固有関数 u_n を用いてSchrödinger方程式(2.50)の波動関数 ψ を次のように展開する。

$$\psi = \sum_n a_n(t) u_n e^{jE_n t/\hbar} \quad (2.52)$$

展開係数 $a_n(t)$ は、時間に依存するとする。これをSchrödinger方程式(2.50)に代入すると、左辺と右辺は、それぞれ次のようになる。

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= -j\hbar \sum_n \left[\frac{\partial a_n(t)}{\partial t} u_n e^{jE_n t/\hbar} + j \frac{E_n}{\hbar} a_n(t) u_n e^{jE_n t/\hbar} \right] \\ &= -j\hbar \sum_n \left(\frac{\partial a_n(t)}{\partial t} + j \frac{E_n}{\hbar} a_n(t) \right) u_n e^{jE_n t/\hbar} \\ \text{(右辺)} &= \sum_n (H_0 + H') a_n(t) u_n e^{jE_n t/\hbar} = \sum_n (E_n + H') a_n(t) u_n e^{jE_n t/\hbar} \end{aligned}$$

これらから次式が得られる。

$$-j\hbar \sum_n \left(\frac{\partial a_n(t)}{\partial t} + j \frac{E_n}{\hbar} a_n(t) \right) u_n e^{jE_n t/\hbar} = \sum_n (E_n + H') a_n(t) u_n e^{jE_n t/\hbar} \quad (2.53)$$

上式の両辺に左から u_k^* を掛け座標空間で積分し、固有関数 u_n の規格直交性を利用して計算すると

$$-j\hbar \left(\frac{\partial a_k(t)}{\partial t} + j \frac{E_k}{\hbar} a_k(t) \right) u_k e^{jE_k t/\hbar} = E_k a_k(t) u_k e^{jE_k t/\hbar} + \sum_n a_n(t) \int dr u_k^* H' u_n e^{jE_n t/\hbar}$$

となる。上式を整理して書くと次のように簡単な式になる。

$$-j\hbar \frac{\partial a_k(t)}{\partial t} = \sum_n a_n(t) H'_{kn} e^{-j\omega_{kn} t} \quad (2.54)$$

但し

$$H'_{kn} = \int dr u_k^* H' u_n \quad (2.55)$$

$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} \quad (2.56)$$

と置いた。ここで、 H' を $\lambda H'$ で置き換え、さらに a_n を次のように λ についてのべき級数として表すことにする。

$$a_n = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots \quad (2.57)$$

これを式(2.54)に代入すると

$$-j\hbar \frac{\partial a_k^{(0)}}{\partial t} - j\hbar \frac{\partial a_k^{(1)}}{\partial t} - j\hbar \frac{\partial a_k^{(2)}}{\partial t} - \dots = \sum_n \lambda H'_{kn} \left(a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \lambda^2 a_n^{(2)} + \dots \right) e^{-j\omega_{kn} t} \quad (2.58)$$

となるので、この両辺を λ の次数で比較するとそれぞれ次のようになる。

$$\begin{aligned}\lambda^0, & \quad -j\hbar \frac{\partial a_k^{(0)}}{\partial t} = 0 \\ \lambda^1, & \quad -j\hbar \frac{\partial a_k^{(1)}}{\partial t} = \sum a_n^{(0)} H'_{kn} e^{-j\omega_{kn}t} \\ & \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ \lambda^s, & \quad -j\hbar \frac{\partial a_k^{(s+1)}}{\partial t} = \sum a_n^{(s)} H'_{kn} e^{-j\omega_{kn}t}\end{aligned}\quad (2.59)$$

今、電子の初期状態として、 $t=0$ で状態 m にあったとする。この時、 $a_k^{(0)} = \delta_{km}$ として上式の λ の一次の式に代入すると

$$\frac{\partial a_k^{(1)}}{\partial t} = \frac{1}{-j\hbar} \sum_n a_n^{(0)} H'_{kn} e^{-j\omega_{kn}t} = \frac{1}{-j\hbar} \sum_n \delta_{nm} H'_{kn} e^{-j\omega_{kn}t} = \frac{1}{-j\hbar} H'_{km} e^{-j\omega_{km}t} \quad (2.60)$$

となるので、この両辺を時間で積分すると $a_k^{(1)}$ の時間変化を表す式が次のように得られる。

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{-j\hbar} H'_{km} \int_0^t dt' e^{-j\omega_{km}t'} = \frac{H'_{km}}{-j\hbar} \frac{e^{-j\omega_{km}t} - 1}{-j\omega_{km}} = \frac{H'_{km}}{\hbar} \frac{1 - e^{-j\omega_{km}t}}{\omega_{km}} \quad (2.61)$$

上式を式(2.52)に用いると、この時の波動関数が次式のように表される。

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_n a_n(t) u_n e^{jE_n t/\hbar} \simeq \sum_n \left[a_n^{(0)} + a_n^{(1)} \right] u_n e^{jE_n t/\hbar} \\ &= u_m e^{jE_m t/\hbar} + \sum_n \frac{H'_{nm}}{\hbar} \frac{1 - e^{-j\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} u_n e^{jE_n t/\hbar}\end{aligned}\quad (2.62)$$

次に、一次の摂動までを考慮した波動関数(2.62)を用いて、外力による電子の加速度を計算してみる。この場合、摂動ハミルトニアン H' は外力を F とすると、 $H' = -Fx$ と表されるので、 H' の行列要素は

$$H'_{nm} = -F \int dx u_n^* x u_m \equiv -FX_{nm} \quad (2.63)$$

となる。但し、 X_{nm} は次式で定義している。

$$X_{nm} = \int dx u_n^* x u_m \quad (2.64)$$

この時、運動量 p_x の期待値を計算すると次のようになる。

$$\begin{aligned}\langle p_x \rangle &= \int dx \psi^* \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ &= \int dx \left(u_m^* e^{-jE_m t/\hbar} + \sum_n \frac{-FX_{nm}^*}{\hbar} \frac{1 - e^{j\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} u_n^* e^{-jE_n t/\hbar} \right) \\ &\quad \times \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial}{\partial x} \left(u_m e^{jE_m t/\hbar} + \sum_n \frac{-FX_{nm}}{\hbar} \frac{1 - e^{-j\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} u_n e^{jE_n t/\hbar} \right) \\ &= \int dx u_m^* \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial u_m}{\partial x} + e^{-jE_m t/\hbar} \sum_n \frac{FX_{nm}}{\hbar} \frac{e^{-j\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} e^{jE_n t/\hbar} \int dx u_m^* \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial u_n}{\partial x}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_n \frac{FX_{nm}^*}{\hbar} \frac{e^{j\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} e^{-jE_n t/\hbar} e^{jE_m t/\hbar} \int dx u_n^* \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial u_m}{\partial x} + \dots \\
& \simeq p_{mm} + \sum_n \frac{FX_{nm}}{\hbar} \frac{e^{-j\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} e^{j\omega_{nm}t/\hbar} p_{mn} + \sum_n \frac{FX_{nm}^*}{\hbar} \frac{e^{j\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} e^{-j\omega_{nm}t/\hbar} p_{nm} \\
& = p_{mm} + \frac{F}{\hbar} \sum_n \left(X_{nm} p_{mn} \frac{1 - e^{j\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} + X_{mn} p_{nm} \frac{1 - e^{-j\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} \right) \quad (2.65)
\end{aligned}$$

上式における p_{nm} は次の積分を表している。

$$p_{nm} = \int dx u_n^* \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial u_m}{\partial x} \quad (2.66)$$

また、 $X_{nm}^* = X_{mn}$ の関係が使われている。さらに、次式で表される位置と運動量の行列要素の関係を用いる（付録 B）。

$$X_{nm} = \frac{\hbar}{-jm_0} \frac{1}{E_{nm}} p_{nm} \quad (2.67)$$

この時

$$\begin{aligned}
p_{nm} X_{mn} &= p_{nm} \frac{\hbar}{-jm_0} \frac{1}{E_{mn}} p_{mn} = \frac{\hbar}{-jm_0 E_{mn}} p_{nm} p_{mn} \\
p_{mn} X_{nm} &= p_{mn} \frac{\hbar}{-jm_0} \frac{1}{E_{nm}} p_{nm} = \frac{\hbar}{-jm_0 E_{nm}} p_{mn} p_{nm} = \frac{\hbar}{jm_0 E_{mn}} p_{mn} p_{nm}
\end{aligned}$$

の二式から、次の等式が成り立つことが分かる。

$$p_{nm} X_{mn} = -p_{mn} X_{nm} \quad (2.68)$$

この関係を使うと、式（2.65）は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\langle p_x \rangle &\simeq p_{mm} + \frac{F}{\hbar} \sum_n X_{nm} p_{mn} \frac{1 - e^{j\omega_{nm}t} - 1 + e^{-j\omega_{nm}t}}{\omega_{nm}} \\
&= p_{mm} + \frac{F}{\hbar} \sum_n \frac{X_{nm} p_{mn}}{\omega_{nm}} [-2j \sin(\omega_{nm}t)] \\
&= p_{mm} + \frac{F}{\hbar} \sum_n \frac{p_{mn}}{\omega_{nm}} \frac{p_{nm}}{-jm_0 \omega_{nm}} [-2j \sin(\omega_{nm}t)] \\
&= \frac{\partial E_m}{\partial k_x} \frac{m_0}{\hbar} + \frac{2F}{\hbar m_0} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\omega_{nm}^2} \sin(\omega_{nm}t) \quad (2.69)
\end{aligned}$$

これから、電子の速度 v_x の期待値は次のようになることが分かる。

$$\langle v_x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m_0} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_m}{\partial k_x} + \frac{2F}{\hbar m_0} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\omega_{nm}^2} \sin(\omega_{nm}t) \quad (2.70)$$

従って、加速度は上式を時間 t で微分すると次式のように表される。

$$\boxed{\frac{d \langle v_x \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_m}{\partial k_x^2} F + \frac{2F}{\hbar m_0} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\omega_{nm}} \cos(\omega_{nm}t)} \quad (2.71)$$

ここで、外力 F が加わった直後の電子の加速度について考えてみる。上式において、 $t \rightarrow 0$ の極限をとると

$$\frac{d \langle v_x \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_m}{\partial k_x^2} F + \frac{2F}{\hbar m_0} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\omega_{nm}} \quad (2.72)$$

となり、上式に式 (2.28) から得られる f -総和則

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_m}{\partial k_x^2} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\hbar \omega_{nm}} \quad (2.73)$$

を用いると、外力が加わった直後の加速度が次のように求まる。

$$\frac{d \langle v_x \rangle}{dt} = \frac{F}{m_0} + \frac{2F}{\hbar m_0^2} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\omega_{nm}} + \frac{2F}{\hbar m_0^2} \sum_n \frac{|p_{nm}|^2}{\omega_{nm}} = \frac{F}{m_0} \quad (2.74)$$

上式は、 $t \rightarrow 0$ の時間においては、電子は有効質量 m^* ではなく自由電子の質量 m_0 で加速されることを示している。一方、外力が加わってから十分に時間が経過した時 ($t \rightarrow \infty$) には、式 (2.71) の \cos 項の位相がランダムになり総和をとると零になるから、加速度は次のようになる。

$$\frac{d \langle v_x \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_m}{\partial k_x^2} F = \frac{F}{m^*} \quad (2.75)$$

このように、 $t \rightarrow \infty$ においては、電子は有効質量 m^* で加速されるようになることが分かる。この位相がランダムになる時間は、不確定性の関係から

$$\Delta t \simeq \frac{2\pi\hbar}{\Delta\varepsilon} \quad (2.76)$$

で見積られ、バルクの GaAs の場合には、 $\Delta\varepsilon \sim 1.4\text{eV}$ として計算すると、 $\Delta t \sim 2.95 \times 10^{-15}\text{sec}$ という値が得られる。電子の速度を $v_x \sim 10^7\text{cm/sec}$ とすると、この時間の間に電子が進距離 Δx は約 0.3 nm になる。超格子構造では $\Delta\varepsilon \sim 10 - 100\text{meV}$ とサブバンド間のエネルギー差が小さくなるので、 $\Delta t \sim 40 - 400 \times 10^{-15}\text{sec}$ および $\Delta x \sim 4 - 40\text{nm}$ となってバルクの時に比べて無視できない値になる。従って、超格子構造のダイナミックな特性を有効質量方程式を用いて議論する場合には、その初期の応答に関して注意を払う必要がある。第三章で議論する共鳴トンネルダイオードに関しては、量子井戸内の離散化エネルギー間隔は $\sim 200\text{meV}$ であるので、 $\Delta t \sim 20 \times 10^{-15}\text{sec}$ 程度とかなり短い時間になるので、その過渡応答特性の計算において有効質量を用いても差し支えないと考えられる。

2.2 ウィグナー関数による輸送方程式の記述

量子力学的分布関数であるウィグナー関数を用いた量子輸送方程式について議論する。密度行列および古典的ボルツマン分布関数との対応を中心に話を進めていく。

2.2.1 密度行列とウィグナー関数

一電子ハミルトニアンを H とすると、Schrödinger 方程式は次式で表される。

$$-j\hbar \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H\varphi(\mathbf{r}, t) \quad (2.77)$$

上式の固有関数 $\varphi(\mathbf{r}, t)$ を正規直交性をもつ基底関数 $u_n(\mathbf{r})$ を用いて次のように展開する。

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t) u_n(\mathbf{r}) \quad (2.78)$$

この時、物理量 A の期待値 $\langle A \rangle$ は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int d\mathbf{r} \varphi^*(\mathbf{r}, t) A \varphi(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_m \sum_n \int d\mathbf{r} c_m^*(t) u_m^*(\mathbf{r}) A c_n(t) u_n(\mathbf{r}) \\ &= \sum_m \sum_n c_n(t) c_m^*(t) \int d\mathbf{r} u_m^*(\mathbf{r}) A u_n(\mathbf{r}) \\ &= \sum_m \sum_n \rho_{nm} A_{mn} \end{aligned} \quad (2.79)$$

但し、 A の行列要素 A_{mn} は

$$A_{mn} = \int d\mathbf{r} u_m^*(\mathbf{r}) A u_n(\mathbf{r}) \quad (2.80)$$

とした。また、密度行列 ρ は次式で定義する。

$$\rho_{nm} = c_n(t) c_m^*(t) \quad (2.81)$$

次に、多数の電子が存在する場合を考える。この時、状態 j を統計的にとる確率 P_j がわかっている場合には、密度行列が次のように定義できる。期待値は量子力学的な平均と統計的平均を行って次のように表される。

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_j P_j \int d\mathbf{r} \varphi_j^*(\mathbf{r}, t) A \varphi_j(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_m \sum_n \sum_j P_j c_{nj}(t) c_m^*(t) A_{mn} \\ &= \sum_m \sum_n \rho_{nm} A_{mn} \end{aligned} \quad (2.82)$$

ここで、密度行列は次式で定義した。

$$\rho_{nm} = \sum_j P_j c_{nj}(t) c_m^*(t) \quad (2.83)$$

さらに、座標表示された密度行列を次のように定義する。

$$\boxed{\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) \varphi_j^*(\mathbf{r}', t)} \quad (2.84)$$

上式は、次のように変形できる。

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) \\
&= \sum_m \sum_n \sum_j P_j c_{nj}(t) u_n(\mathbf{r}) c_{mj}^*(t) u_m^*(\mathbf{r}') \\
&= \sum_m \sum_n u_n(\mathbf{r}) \sum_j P_j c_{nj}(t) c_{mj}^*(t) u_m^*(\mathbf{r}')
\end{aligned} \tag{2.85}$$

上式の最後の式に式(2.83)で定義した多粒子系の密度行列を用いると、次のように書き直すことができる。

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_m \sum_n u_n(\mathbf{r}) \rho_{nm} u_m^*(\mathbf{r}') \tag{2.86}$$

上式に対応させて、物理量 A の行列要素 A_{nm} の座標表示を次のように定義することにする。

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_m \sum_n u_n(\mathbf{r}) A_{nm} u_m^*(\mathbf{r}') \tag{2.87}$$

ここで、次の積分を考える。

$$\int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \sum_m \sum_n \sum_{m'} \sum_{n'} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' u_n(\mathbf{r}) A_{nm} u_n^*(\mathbf{r}') u_{n'}(\mathbf{r}') \rho_{n'm'} u_{m'}^*(\mathbf{r}) \tag{2.88}$$

まず、 \mathbf{r}' についての積分を行う。関数 $u_n(\mathbf{r})$ の規格直交性

$$\int d\mathbf{r}' u_m^*(\mathbf{r}') u_{n'}(\mathbf{r}') = \delta_{mn'} \tag{2.89}$$

を用いると、式(2.88)は次のように変形できる。

$$\text{式(2.88)} = \sum_m \sum_n \sum_{m'} \rho_{mm'} \int d\mathbf{r} u_n(\mathbf{r}) u_{m'}^*(\mathbf{r}) A_{nm} \tag{2.90}$$

次に、 \mathbf{r} についての積分を行い、同様に $u_n(\mathbf{r})$ の規格直交性を使うと、次のように計算することができる。

$$\begin{aligned}
\text{式(2.90)} &= \sum_m \sum_n \sum_{m'} \rho_{mm'} \delta_{nm'} A_{nm} \\
&= \sum_m \sum_n \rho_{mn} A_{nm} = \sum_m \sum_n \rho_{nm} A_{mn}
\end{aligned} \tag{2.91}$$

上式の最後の式は期待値の表現式(2.82)と等しくなっていることから、式(2.88)の積分は物理量 A の期待値を表していることが分かる。従って、次式が成立する。

$$\langle A \rangle = \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) \tag{2.92}$$

一方、量子力学的分布関数であるウィグナー関数 $f(\chi, \mathbf{k})$ は、密度行列の相対座標 ξ に関するフーリエ変換で次式のように定義される[25]。

$$\boxed{f(\chi, \mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \rho\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t\right) e^{j\mathbf{k} \cdot \xi}} \tag{2.93}$$

上式を逆フーリエ変換すると密度行列がウィグナー関数を用いて次のように表される。

$$\rho\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t\right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(\chi, k) e^{-jk \cdot \xi} \quad (2.94)$$

そこで、次のような変数変換を行い、式(2.92)の密度行列 ρ と物理量 A の二つの変数 r, r' を重心座標 χ と相対座標 ξ を用いて表す。

$$\chi = \frac{r + r'}{2}, \quad \xi = r - r' \quad (2.95)$$

この時、Jacobian は

$$\frac{\partial(r_1, r_2)}{\partial(\xi, \chi)} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & 1 \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix} = 1 \quad (2.96)$$

となるので、 A の期待値(2.92)は次のように表されるようになる。

$$\langle A \rangle = \int \int d\chi d\xi A\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}\right) \rho\left(\chi - \frac{\xi}{2}, \chi + \frac{\xi}{2}, t\right) \quad (2.97)$$

上式の密度行列を、式(2.94)を用いてウィグナー関数で表すと

$$\langle A \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int d\chi dk d\xi A\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}\right) e^{jk \cdot \xi} f(\chi, k) \quad (2.98)$$

となる。ここで

$$A_W(\chi, k) = \int d\xi A\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}\right) e^{jk \cdot \xi} \quad (2.99)$$

と置くと、期待値 $\langle A \rangle$ は次式のような簡単な形で表すことができる。

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2\pi} \int \int dr dk A_W(\chi, k) f(\chi, k) \quad (2.100)$$

上式の $A_W(\chi, k)$ は物理量 $A(r, r')$ のWigner表示と呼ばれている。例として、半導体デバイス内のキャリア密度 $n(\chi)$ と電流密度 $j(\chi)$ の期待値を示すと、それぞれ、次のようになる。

$$n(\chi) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(\chi, k) \quad (2.101)$$

$$j(\chi) = \frac{e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\hbar k}{m^*} f(\chi, k) \quad (2.102)$$

このように、ウィグナー関数を用いたキャリア密度および電流密度の式は、古典論におけるボルツマン分布関数を用いた式と同様な表現になっており、ウィグナー関数 $f(\chi, k)$ が量子力学的な分布関数としての役割を果たしていることが分かる。

2.2.2 ウィグナー関数の運動方程式

前節で定義したウィグナー関数の運動を支配する運動方程式について議論する。まず、密度行列に対する運動方程式を求めた後、それをフーリエ変換することによってウィグナー関数の運動方程式を導くことにする。

式(2.84)で定義した密度行列を時間微分する。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_j P_j \left[\frac{\partial \varphi_j(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) + \varphi_j(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \varphi_j^*(\mathbf{r}', t)}{\partial t} \right] \quad (2.103)$$

上式に Schrödinger 方程式(2.77)を用いると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_j P_j \left\{ \left[\frac{1}{-j\hbar} H(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}, t) \right] \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) + \varphi_j(\mathbf{r}, t) \left[\frac{1}{j\hbar} H^*(\mathbf{r}') \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{-j\hbar} H(\mathbf{r}) \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) - \frac{1}{-j\hbar} \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) H^*(\mathbf{r}') \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) \\ &= \frac{1}{-j\hbar} H(\mathbf{r}) \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) - \frac{1}{-j\hbar} H^*(\mathbf{r}') \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) \\ &= \frac{1}{-j\hbar} [H(\mathbf{r}) - H^*(\mathbf{r}')] \sum_j P_j \varphi_j(\mathbf{r}, t) \varphi_j^*(\mathbf{r}', t) \\ &= \frac{1}{-j\hbar} [H(\mathbf{r}) - H^*(\mathbf{r}')] \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \end{aligned} \quad (2.104)$$

となる。従って、密度行列の運動方程式は次のように表される。

$$-j\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H(\mathbf{r}) - H^*(\mathbf{r}')] \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \quad (2.105)$$

但し、 $H(\mathbf{r})$ および $H^*(\mathbf{r}')$ は、それぞれ波動関数 $\varphi_j(\mathbf{r}, t)$ および $\varphi_j^*(\mathbf{r}', t)$ に作用する演算子である。上式に、前節で導かれた有効質量ハミルトニアン H を代入する。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + v(\mathbf{r}) \quad (2.106)$$

ここでは、バルク半導体中のキャリア輸送を考え、有効質量が位置によって変化しないと仮定する。この時、密度行列の運動方程式は次式のように表される。

$$\boxed{-j\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \right) + v(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r}') \right] \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)} \quad (2.107)$$

ここで、式(2.95)の変数変換を行い、二つの変数 \mathbf{r}, \mathbf{r}' の代わりに重心座標 χ と相対座標 ξ を用いる。この時

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} &= \frac{\partial}{\partial \chi} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} &= \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \cdot \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{\partial}{\partial \chi} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \end{aligned}$$

同様に

$$\frac{\partial^2}{\partial r'^2} = \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \cdot \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - \frac{\partial}{\partial \chi} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}$$

となる。また r, r' はそれぞれ

$$r = \chi + \frac{\xi}{2}, \quad r' = \chi - \frac{\xi}{2}$$

と表されるので、これらを式 (2.107) に代入すると次式が得られる。

$$-j\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\partial}{\partial \chi} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} + v\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - v\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right] \rho\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t\right) \quad (2.108)$$

上式からウィグナー関数に関する運動方程式を導くために、両辺を ξ に関してフーリエ変換する。計算過程が多少長くなるので各項に分けて示すことにする。

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= -j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \rho\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t\right) e^{j\mathbf{k} \cdot \xi} = -j\hbar \frac{\partial f(\chi, \mathbf{k})}{\partial t} \\ \text{(右辺第一項)} &= -\frac{\hbar^2}{m^*} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t\right) e^{j\mathbf{k} \cdot \xi} \\ &= -\frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\partial}{\partial \chi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}' f(\chi, \mathbf{k}') e^{-j\mathbf{k}' \cdot \xi} \right\} e^{j\mathbf{k} \cdot \xi} \\ &= -\frac{\hbar^2}{(2\pi)^3 m^*} \frac{\partial}{\partial \chi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}' (-j\mathbf{k}') f(\chi, \mathbf{k}') \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \xi}}_{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \\ &= \frac{j\hbar^2}{m^*} \frac{\partial}{\partial \chi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}' \mathbf{k}' f(\chi, \mathbf{k}') \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &= \frac{j\hbar^2 \mathbf{k}}{m^*} \frac{\partial f(\chi, \mathbf{k})}{\partial \chi} \\ \text{(右辺第二項)} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[v\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - v\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right] \rho\left(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t\right) e^{j\mathbf{k} \cdot \xi} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[v\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - v\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right] \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}' f(\chi, \mathbf{k}') e^{-j\mathbf{k}' \cdot \xi} e^{j\mathbf{k} \cdot \xi} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k}' f(\chi, \mathbf{k}') \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[v\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - v\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right] e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \xi} \end{aligned}$$

以上より、次のウィグナー関数の運動方程式が得られる。

$$\boxed{\frac{\partial f(\chi, \mathbf{k})}{\partial t} = -\frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \cdot \frac{\partial f(\chi, \mathbf{k})}{\partial \chi} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\chi, \mathbf{k} - \mathbf{k}') f(\chi, \mathbf{k}')} \quad (2.109)$$

但し

$$V(\chi, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = -j \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[v\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - v\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right] e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \xi} \quad (2.110)$$

と置いた。上式 (2.109) は、ウィグナー関数の Liouville 方程式と呼ばれており、ウィグナー関数を用いた量子輸送モデルの基本となる量子力学的輸送方程式である。上式の右辺第二項は、量子力学特有のポテンシャルの非局所性を表している。次節で述べるように、古典的極限では、このポテンシャルの非局所性が消えて電界によるドリフト項が現れることになる。

次に、Liouville 方程式 (2.109) から古典的な電流連続の式が導かれることを示す。式 (2.109) の両辺を波数 \mathbf{k} で積分すると

$$\begin{aligned} \text{(左辺)} &= \int d\mathbf{k} \frac{\partial f(\chi, \mathbf{k})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} f(\chi, \mathbf{k}) = (2\pi)^3 \frac{\partial n(\chi)}{\partial t} \\ \text{(右辺第一項)} &= -\frac{\partial}{\partial \chi} \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} f(\chi, \mathbf{k}) \right) \end{aligned}$$

一方、右辺第二項に現れる $V(\chi, \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ は $e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\xi}}$ を含むから \mathbf{k} で積分すると零になる。結局

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\chi, \mathbf{k}) = -\frac{\partial}{\partial \chi} \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} f(\chi, \mathbf{k}) \right) \quad (2.111)$$

となるから、これにキャリア密度の式 (2.101) と電流密度の式 (2.102) を代入すると、次の電流連続の式が得られることが分かる。

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j(\chi)}{\partial \chi}} \quad (2.112)$$

2.2.3 古典的極限

ウィグナー関数の量子力学的 Liouville 方程式と古典論との対応を議論するために、Liouville 方程式の古典的極限 ($\hbar \rightarrow 0$) を考える。

まず、Liouville 方程式 (2.109) の右辺第一項に関しては、結晶運動量 $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ を用いて、次のように表すことができる。

$$-\frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \cdot \frac{\partial f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \chi} \rightarrow -\frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \chi} \quad (2.113)$$

次に、右辺第二項について考える。ポテンシャル項 $V(\chi, \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ の中に現れる $v(\chi + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2})$ と $v(\chi - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2})$ を Taylor 展開して、それぞれ、次のように表す。

$$v(\chi + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}) = v(\chi) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\boldsymbol{\xi}/2)^{n+1}}{(n+1)!} \cdot \frac{d^{n+1}v(\chi)}{d\chi^{n+1}} \quad (2.114)$$

$$v(\chi - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}) = v(\chi) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\boldsymbol{\xi}/2)^{n+1}}{(n+1)!} \cdot \frac{d^{n+1}v(\chi)}{d\chi^{n+1}} \quad (2.115)$$

これら二式の辺々を引くと

$$v(\chi + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}) - v(\chi - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\boldsymbol{\xi}/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \cdot \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \quad (2.116)$$

となり、これを式 (2.110) に代入すると、ポテンシャル項は次のような微分形で表すことができる。

$$\begin{aligned} V(\chi, \mathbf{k} - \mathbf{k}') &= -j \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\xi} \left[v\left(\chi + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\chi - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\xi}} \\ &= -2j \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi}^{2n+1} e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\xi}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -2j \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \cdot \frac{1}{j^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \mathbf{k}^{2n+1}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\xi} \right) \\
&= -j16\pi^3 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2j)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \cdot \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \mathbf{k}^{2n+1}} \quad (2.117)
\end{aligned}$$

但し、上式の導出の過程で次の関係を用いた。

$$\int d\xi \xi^{2n+1} e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\xi} = \frac{1}{j^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \mathbf{k}^{2n+1}} \int d\xi e^{j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\xi} = \frac{(2\pi)^3}{j^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \mathbf{k}^{2n+1}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \quad (2.118)$$

式(2.117)を Liouville 方程式の右辺第二項に用いると

$$\begin{aligned}
(\text{右辺第二項}) &= -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\chi, \mathbf{k}-\mathbf{k}') f(\chi, \mathbf{k}') \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} 16\pi^3 j \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2j)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \cdot \frac{\partial^{2n+1} f(\chi, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^{2n+1}} \\
&= \frac{2j}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hbar/2j)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \cdot \frac{\partial^{2n+1} f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}^{2n+1}} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hbar/2j)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}v(\chi)}{d\chi^{2n+1}} \cdot \frac{\partial^{2n+1} f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}^{2n+1}} \quad (2.119)
\end{aligned}$$

となる。上式の古典的極限 ($\hbar \rightarrow 0$) をとると、 n に関する和のうち $n=0$ だけが残り他は零となるので、次式が得られる。

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\text{式(2.119)}) = \frac{dv(\chi)}{d\chi} \cdot \frac{\partial f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (2.120)$$

以上をまとめると、古典的極限でのウィグナー関数の Liouville 方程式は次式のようになり、古典的 Boltzmann 輸送方程式に一致することが分かる。

$$\frac{\partial f(\chi, \mathbf{p})}{\partial t} = -\frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \chi} + \frac{dv(\chi)}{d\chi} \cdot \frac{\partial f(\chi, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (2.121)$$

右辺第一項が拡散項、第二項がドリフト項を表している。この古典的な輸送方程式においては、量子力学的 Liouville 方程式(2.109)の右辺第二項に含まれている量子力学特有のポテンシャルの非局所性が消えてしまっているのが分かる。このように、ウィグナー関数は、キャリア密度や電流密度の表現式だけでなく、その運動を決定する輸送方程式に関しても古典論と非常に良く対応が付くことが分かる。

2.2.4 モーメント方程式

ウィグナー関数を用いた量子輸送シミュレーションモデルは、一次元の共鳴トンネルダイオードやアバランシェ・フォトダイオード等の量子構造デバイスに適用されてその有用性が明らかになってきたが、計算機のメモリや計算時間による制限から多次元のデバイスシミュレーションに直接用いることは難しい。以下で述べるウィグナー関数の Liouville 方程式から導かれる量子モーメント方程式を用いると、このような多次元での量子構造デバイスの解析を比較的容易に取り扱うことができる。

まず、モーメントの定義を次式に示す。

$$\langle \mathbf{p}^n \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p}^n f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.122)$$

ここでは、2次までのモーメントについて議論する。はじめに、0次のモーメントに対する運動方程式を得るために、ウィグナー関数の Liouville 方程式 (2.109) の両辺を運動量空間で積分する。

$$\int d\mathbf{p} \frac{\partial f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})}{\partial t} + \frac{1}{m^*} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) + \int \int d\mathbf{p}' d\mathbf{p} V(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') = 0 \quad (2.123)$$

計算過程が複雑になるので、各々の項に分けて計算する。

$$\begin{aligned} \text{(左辺第一項)} &= \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \right] \\ &= (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial n}{\partial t} \\ \text{(左辺第二項)} &= \frac{1}{m^*} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) = \frac{1}{m^*} \int d\mathbf{p} \nabla \cdot [\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \\ &= (2\pi\hbar)^3 \frac{1}{m^*} \nabla \cdot \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \right] \\ &= (2\pi\hbar)^3 \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) \end{aligned}$$

(左辺第三項)

$$\begin{aligned} &= - \int \int d\mathbf{p}' d\mathbf{p} V(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\ &= \frac{j}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' d\boldsymbol{\xi} \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') e^{j\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \\ &= \frac{j}{\hbar} \int \int d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{p}' \underbrace{\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right)}_{\delta(\boldsymbol{\xi})} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \\ &= \frac{j}{\hbar} \int d\mathbf{p}' \left(\int d\boldsymbol{\xi} \delta(\boldsymbol{\xi}) \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right) f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\ &= \frac{j}{\hbar} \int d\mathbf{p}' \left([v(\boldsymbol{\chi}) - v(\boldsymbol{\chi})] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right) f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') = 0 \end{aligned}$$

以上より、0次のモーメントに対する運動方程式が次式のように得られる。

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) = 0} \quad (2.124)$$

次に、式 (2.109) の両辺に運動量 \mathbf{p} を掛けて運動量空間で積分する。

$$\int d\mathbf{p} \mathbf{p} \frac{\partial f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})}{\partial t} + \frac{1}{m^*} \int d\mathbf{p} [\mathbf{p} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \mathbf{p} + \int \int d\mathbf{p}' d\mathbf{p} \mathbf{p} V(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') = 0 \quad (2.125)$$

同様に各項に分けて計算する。

$$\begin{aligned}
(\text{左辺第一項}) &= \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \right] \\
&= (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial \langle \mathbf{p} \rangle}{\partial t} \\
(\text{左辺第二項}) &= \frac{1}{m^*} \int d\mathbf{p} [\mathbf{p} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \mathbf{p} = \frac{1}{m^*} \nabla \cdot \left\{ \int d\mathbf{p} [\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \mathbf{p} \right\} \\
&= \frac{(2\pi\hbar)^3}{m^*} \nabla \cdot \underbrace{\left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} [\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \mathbf{p} \right\}}_{\nabla \cdot \langle \mathbf{p} \mathbf{p} \rangle \text{ と置く}} \\
&= (2\pi\hbar)^3 \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right)
\end{aligned}$$

(左辺第三項)

$$\begin{aligned}
&= - \int \int d\mathbf{p}' d\mathbf{p} \mathbf{p} V(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \frac{-j}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' d\boldsymbol{\xi} \mathbf{p} \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') e^{j\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar}\cdot\boldsymbol{\xi}} \\
&= \frac{-j}{\hbar} \int \int d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{p}' \underbrace{\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\cdot\boldsymbol{\xi}} \right)}_{-j\hbar\nabla\delta(\boldsymbol{\xi})} \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar}\cdot\boldsymbol{\xi}} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \frac{-j}{\hbar} \int \int d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{p}' (-j\hbar\nabla\delta(\boldsymbol{\xi})) \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar}\cdot\boldsymbol{\xi}} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= - \int d\mathbf{p}' \underbrace{\left(\int d\boldsymbol{\xi} \nabla\delta(\boldsymbol{\xi}) \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar}\cdot\boldsymbol{\xi}} \right)}_{-\nabla v(\boldsymbol{\chi})} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= - \int d\mathbf{p}' [-\nabla v(\boldsymbol{\chi})] f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \nabla v(\boldsymbol{\chi}) \times (2\pi\hbar)^3 \times \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= (2\pi\hbar)^3 n \nabla v(\boldsymbol{\chi})
\end{aligned}$$

以上より、1次のモーメントに対する運動方程式が次式のように得られる。

$$\boxed{\frac{\partial \langle \mathbf{p} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) + n \nabla v(\boldsymbol{\chi}) = 0} \quad (2.126)$$

さらに、式(2.109)の両辺に運動量 p^2 を掛けて運動量空間で積分する。

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m^*} \frac{\partial f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})}{\partial t} + \frac{1}{2m^{*2}} \int d\mathbf{p} p^2 [\mathbf{p} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] + \int \int d\mathbf{p}' d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m^*} V(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
= 0 \quad (2.127)
\end{aligned}$$

同様に各項に分けて計算する。

$$\begin{aligned}
(\text{左辺第一項}) &= \frac{1}{2m^*} \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{p} p^2 f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} p^2 f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \right] \\
&= (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial \langle \mathbf{p}^2 \rangle}{\partial t} \\
(\text{左辺第二項}) &= \frac{1}{2m^{*2}} \int d\mathbf{p} p^2 [\mathbf{p} \cdot \nabla f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] = \frac{1}{2m^{*2}} \nabla \cdot \left\{ \int d\mathbf{p} p^2 [\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \right\} \\
&= \frac{(2\pi\hbar)^3}{2m^{*2}} \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} p^2 [\mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p})] \right\} \\
&\quad \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{\nabla \cdot \langle p^2 \mathbf{p} \rangle \text{ と置く}} \\
&= (2\pi\hbar)^3 \nabla \cdot \left(\frac{\langle p^2 \mathbf{p} \rangle}{2m^{*2}} \right)
\end{aligned}$$

(左辺第三項)

$$\begin{aligned}
&= - \int \int d\mathbf{p}' d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m^*} V(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \frac{-j}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \int d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \frac{p^2}{2m^*} \left(\int d\boldsymbol{\xi} \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{j\frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right) f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \frac{-j}{\hbar} \int \int d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{p}' \frac{1}{2m^*} \underbrace{\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} p^2 e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right)}_{-\hbar^2 \nabla^2 \delta(\boldsymbol{\xi})} \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \frac{-j}{\hbar} \int \int d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{p}' \frac{1}{2m^*} (-\hbar^2 \nabla^2 \delta(\boldsymbol{\xi})) \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= j\hbar \frac{1}{2m^*} \int d\mathbf{p}' \underbrace{\left(\int d\boldsymbol{\xi} \nabla^2 \delta(\boldsymbol{\xi}) \left[v\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) - v\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}\right) \right] e^{-j\frac{\mathbf{p}'}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right)}_{\frac{-2j}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \nabla v(\boldsymbol{\chi})} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= j\hbar \frac{1}{2m^*} \int d\mathbf{p}' \left(\frac{-2j}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \nabla v(\boldsymbol{\chi}) \right) f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= \frac{1}{m^*} [\nabla v(\boldsymbol{\chi})] \cdot \int d\mathbf{p}' \mathbf{p}' f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}') \\
&= (2\pi\hbar)^3 \frac{1}{m^*} [\nabla v(\boldsymbol{\chi})] \cdot \langle \mathbf{p} \rangle \\
&= (2\pi\hbar)^3 \frac{[\nabla v(\boldsymbol{\chi})] \cdot \langle \mathbf{p} \rangle}{m^*}
\end{aligned}$$

以上より、2 次のモーメントに対する運動方程式が次式のように得られる。

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{2m^*} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\langle p^2 \mathbf{p} \rangle}{2m^{*2}} \right) + \frac{[\nabla v(\boldsymbol{\chi})] \cdot \langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} = 0} \quad (2.128)$$

このように、ウィグナー関数の Liouville 方程式から導かれるモーメント方程式 (2.124)、(2.126) および (2.128) は、古典的ボルツマン輸送方程式から導かれるモーメント方程式と表現上は全く同

じになることが分かる（付録 C）。また、これらのモーメント方程式に現れるモーメント $\langle p^0 \rangle$ 、 $\langle p \rangle$ および $\langle p^2 \rangle$ は、それぞれ、次式のようにキャリア密度、運動量およびエネルギーに関連している。

$$n = \langle p^0 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp f(\chi, p) \quad (2.129)$$

$$v = \frac{\langle p \rangle}{m^*n} = \frac{1}{m^*n} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp p f(\chi, p) \quad (2.130)$$

$$w = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m^*n} = \frac{1}{2m^*n} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 f(\chi, p) \quad (2.131)$$

これらの物理量を用いて、上述の三つのモーメント方程式を書き直すと、それぞれ、次式のような粒子数保存、運動量保存およびエネルギー保存を表す方程式が得られる（付録 C）。

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (nv) = 0 \quad (2.132)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v + \frac{qE}{m^*} + \frac{1}{m^*n} \nabla \cdot (nk_B \hat{T}) = 0 \quad (2.133)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + qv \cdot E + v \cdot \nabla w + \frac{1}{n} \nabla \cdot (nvk_B \hat{T}) + \frac{1}{n} \nabla \cdot Q = 0 \quad (2.134)$$

但し、 E は電界を表し、温度テンソル \hat{T} と熱流 Q は、それぞれ、次式で表される。

$$\frac{3}{2} k_B T_{ij} = \frac{1}{2m^*n} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp P_i P_j f(p, r) \quad (2.135)$$

$$Q = \frac{1}{2m^{*2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp P^2 P f(p, r) \quad (2.136)$$

但し、 P は、平均運動量 p_0 からのずれ ($P = p - p_0$) を表す。このように、ウィグナー関数のモーメント方程式は、古典論と全く同じ形をしていることが分かる。両者の差は、次に述べるように、温度テンソルの表現式に量子力学的補正の項が入ってくることである。

今、簡単のため絶対温度を 0K として、二次までのモーメントを波動関数 ψ_i を用いて表すことにする。まず、0 次のモーメントを計算すると、キャリア密度 $n(r)$ は次のように表される。

$$\begin{aligned} n(\chi) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp f(\chi, p) \\ &= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int dp d\xi \psi_i \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \psi_i^* \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) e^{j \frac{p}{\hbar} \xi} \\ &= \sum_i \int d\xi \left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp e^{j \frac{p}{\hbar} \xi} \right\} \psi_i \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \psi_i^* \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \\ &= \sum_i \int d\xi \delta(\xi) \psi_i \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \psi_i^* \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \\ &= \sum_i \psi_i(\chi) \psi_i^*(\chi) \end{aligned} \quad (2.137)$$

次に、1 次のモーメントを計算する。

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \\
&= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int d\mathbf{p} d\boldsymbol{\xi} \mathbf{p} \psi_i \left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) \psi_i^* \left(\boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \\
&= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \underbrace{\left\{ \mathbf{p} \int d\boldsymbol{\xi} \psi_i \left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) \psi_i^* \left(\boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right\}}_{-\frac{\hbar}{j} \int d\boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}} (\psi_i \psi_i^*) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}}} \\
&= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \left[-\frac{\hbar}{j} \int d\boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}} (\psi_i \psi_i^*) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right] \\
&= \sum_i j\hbar \int d\boldsymbol{\xi} \left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right\} \nabla_{\boldsymbol{\xi}} (\psi_i \psi_i^*) \\
&= \sum_i j\hbar \int d\boldsymbol{\xi} \delta(\boldsymbol{\xi}) \nabla_{\boldsymbol{\xi}} (\psi_i \psi_i^*) \\
&= \sum_i j\hbar \int d\boldsymbol{\xi} \delta(\boldsymbol{\xi}) \left\{ \left[\nabla_{\boldsymbol{\xi}} \psi_i \left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) \right] \psi_i^* + \psi_i \left[\nabla_{\boldsymbol{\xi}} \psi_i^* \left(\boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) \right] \right\} \quad (2.138)
\end{aligned}$$

ここで、 $\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} = \mathbf{r}$ 、 $\boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} = \mathbf{r}'$ であるから、 $\boldsymbol{\xi} = 2(\mathbf{r} - \boldsymbol{\chi})$ と $\boldsymbol{\xi} = 2(\boldsymbol{\chi} - \mathbf{r}')$ が成り立つ。従って、 $\boldsymbol{\xi}$ に関する微分演算子を次のように書き換えることができる。

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\xi}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \quad (2.139)$$

これらを、式(2.138)に代入すると、1 次のモーメントは次のようになることが分かる。

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p} \rangle &= \sum_i j\hbar \int d\boldsymbol{\xi} \delta(\boldsymbol{\xi}) \left\{ \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{r}} \psi_i(\mathbf{r})] \psi_i^* - \frac{1}{2} \psi_i [\nabla_{\mathbf{r}'} \psi_i^*(\mathbf{r}')] \right\} \\
&= \sum_i \frac{j\hbar}{2} \{ [\nabla \psi_i(\boldsymbol{\chi})] \psi_i^*(\boldsymbol{\chi}) - \psi_i(\boldsymbol{\chi}) [\nabla \psi_i^*(\boldsymbol{\chi})] \} \quad (2.140)
\end{aligned}$$

さらに、2 次のモーメントを計算する。

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} p^2 f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{p}) \\
&= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int d\mathbf{p} d\boldsymbol{\xi} p^2 \psi_i \left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) \psi_i^* \left(\boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \\
&= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \underbrace{\left\{ p^2 \int d\boldsymbol{\xi} \psi_i \left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) \psi_i^* \left(\boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \right) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right\}}_{-\hbar^2 \int d\boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 (\psi_i \psi_i^*) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}}} \\
&= \sum_i \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \left[-\hbar^2 \int d\boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 (\psi_i \psi_i^*) e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right] \\
&= -\sum_i \hbar^2 \int d\boldsymbol{\xi} \left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} e^{j\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\xi}} \right\} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 (\psi_i \psi_i^*)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\sum_i \hbar^2 \int d\xi \delta(\xi) \nabla_\xi^2 (\psi_i \psi_i^*) \\
&= -\sum_i \hbar^2 \int d\xi \delta(\xi) \left\{ \left[\nabla_\xi^2 \psi_i \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \right] \psi_i^* + \left[\nabla_\xi \psi_i \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \right] \left[\nabla_\xi \psi_i^* \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + \psi_i \left[\nabla_\xi^2 \psi_i^* \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \right] \right\} \quad (2.141)
\end{aligned}$$

ここで、式(2.139)より

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial r^2}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial r'} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial r'^2} \quad (2.142)$$

となるので、これらを式(2.141)に代入すると、2次のモーメントは次のようになる。

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{4} \int d\xi \delta(\xi) \left\{ \left[\nabla_r^2 \psi_i(r) \right] \psi_i^* - 2 \left[\nabla_r \psi_i(r) \right] \left[\nabla_{r'} \psi_i^*(r') \right] \right. \\
&\quad \left. + \psi_i \left[\nabla_{r'}^2 \psi_i^*(r') \right] \right\} \\
&= -\sum_i \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \left[\nabla^2 \psi_i(\chi) \right] \psi_i^*(\chi) - 2 \left[\nabla^2 \psi_i(\chi) \right] \left[\nabla^2 \psi_i^*(\chi) \right] \right. \\
&\quad \left. + \psi_i(\chi) \left[\nabla^2 \psi_i^*(\chi) \right] \right\} \quad (2.143)
\end{aligned}$$

以上をまとめると、各モーメントは波動関数を用いてそれぞれ次のように表される。

$$n(\chi) = \langle p^0 \rangle = \sum_i \psi_i(\chi) \psi_i^*(\chi) \quad (2.144)$$

$$\langle p \rangle = \sum_i \frac{j\hbar}{2} \left\{ \left[\nabla \psi_i(\chi) \right] \psi_i^*(\chi) - \psi_i(\chi) \left[\nabla \psi_i^*(\chi) \right] \right\} \quad (2.145)$$

$$\langle p^2 \rangle = -\sum_i \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \left[\nabla^2 \psi_i(\chi) \right] \psi_i^*(\chi) - 2 \left[\nabla^2 \psi_i(\chi) \right] \left[\nabla^2 \psi_i^*(\chi) \right] + \psi_i(\chi) \left[\nabla^2 \psi_i^*(\chi) \right] \right\} \quad (2.146)$$

さらに、波動関数の具体的な表現を次式のように与えて各モーメントを振幅 $A_i(\chi)$ と位相 $S_i(\chi)$ を用いて表す。

$$\psi_i(\chi) = A_i(\chi) e^{-j \frac{S_i(\chi)}{\hbar}} \quad (2.147)$$

但し、振幅 $A_i(\chi)$ は実数と仮定する。この時、0次のモーメントは式(2.144)より

$$n(\chi) = \sum_i n_i = \sum_i A_i^2(\chi)$$

となる。従って

$$n_i = A_i^2(\chi) \quad (2.148)$$

と表される。また、1次のモーメントは式(2.145)より

$$\langle p \rangle = \sum_i \langle p_i \rangle = \sum_i \frac{j\hbar}{2} \left\{ \left[\nabla \psi_i(\chi) \right] \psi_i^*(\chi) - \psi_i(\chi) \left[\nabla \psi_i^*(\chi) \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{j\hbar}{2} \sum_i \left\{ \frac{-j}{\hbar} A_i^2(\chi) \nabla S_i + \frac{-j}{\hbar} A_i^2(\chi) \nabla S_i \right\} \\
&= \sum_i \underbrace{A_i^2(\chi)}_{n_i} \nabla S_i = \sum_i n_i \nabla S_i
\end{aligned}$$

となるので

$$\langle \mathbf{p}_i \rangle = n_i \nabla S_i \quad (2.149)$$

と表される。また、2次のモーメントは式(2.146)より

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= - \sum_i \frac{\hbar^2}{4} \left\{ [\nabla^2 \psi_i(\chi)] \psi_i^*(\chi) - 2 [\nabla^2 \psi_i(\chi)] [\nabla^2 \psi_i^*(\chi)] + \psi_i(\chi) [\nabla^2 \psi_i^*(\chi)] \right\} \\
&= - \frac{\hbar^2}{4} \sum_i \left\{ 2A_i \nabla^2 A_i - 2 \frac{A_i^2}{\hbar} (\nabla S_i)^2 - 2(\nabla A_i)^2 - 2 \frac{A_i^2}{\hbar} (\nabla S_i)^2 \right\} \\
&= \sum_i A_i^2 (\nabla S_i)^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \left\{ A_i \nabla^2 A_i - (\nabla A_i)^2 \right\}
\end{aligned} \quad (2.150)$$

となるので、エネルギー W は次のように表される。

$$W = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m^*} = \sum_i \frac{A_i^2}{2m^*} (\nabla S_i)^2 - \frac{\hbar^2}{4m^*} \sum_i \left\{ A_i \nabla^2 A_i - (\nabla A_i)^2 \right\} \quad (2.151)$$

上式を式(2.148)と(2.149)を用いて変形する。

$$\text{式(2.151)右辺第一項} = \sum_i \frac{A_i^2}{2m^*} (\nabla S_i)^2 = \sum_i \frac{n_i}{2m^*} \frac{\langle \mathbf{p} \rangle^2}{n_i^2} = \sum_i \frac{\langle \mathbf{p} \rangle^2}{2m^* n_i} \quad (2.152)$$

次に、右辺第二項を変形するために式(2.148)を χ で微分する。

$$\frac{dn_i}{d\chi} = 2A_i \times \frac{dA_i}{d\chi}$$

これより

$$\frac{dA_i}{d\chi} = \frac{1}{2A_i} \times \frac{dn_i}{d\chi}$$

となるから、上式を二乗すると

$$\left(\frac{dA_i}{d\chi} \right)^2 = \frac{1}{4A_i^2} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 = \frac{1}{4 \times n_i} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 = \frac{1}{4n_i} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 \quad (2.153)$$

が得られる。また、 A_i の二階微分は

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 A_i}{d\chi^2} &= \frac{d}{d\chi} \left(\frac{dA_i}{d\chi} \right) = \frac{1}{2} \frac{d^2 n_i}{d\chi^2} \frac{A_i}{A_i^2} - \frac{dn_i}{d\chi} \frac{dA_i}{d\chi} \\
&= \frac{1}{2} \times \frac{1}{n_i} \times \left\{ A_i \frac{d^2 n_i}{d\chi^2} - \frac{1}{2A_i} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 \right\}
\end{aligned}$$

となることから、次式が成り立つ。

$$A_i \frac{d^2 A_i}{d\chi^2} = \frac{1}{2n_i} \times \left\{ n_i \frac{d^2 n_i}{d\chi^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 \right\} \quad (2.154)$$

これら二式 (2.153) と (2.154) をエネルギーの式 (2.151) の右辺第二項に代入すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}
\text{式(2.151)右辺第二項} &= -\frac{\hbar^2}{4m^*} \sum_i \left\{ \frac{1}{2} \frac{d^2 n_i}{d\chi^2} - \frac{1}{2n_i} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 \right\} \\
&= -\frac{\hbar^2}{8m^*} \sum_i \left\{ \frac{d^2 n_i}{d\chi^2} - \frac{1}{n_i} \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2 \right\} \\
&= -\frac{\hbar^2}{8m^*} \sum_i n_i \frac{n_i \left(\frac{d^2 n_i}{d\chi^2} \right) - \left(\frac{dn_i}{d\chi} \right)^2}{n_i^2} \\
&= -\frac{\hbar^2}{8m^*} \sum_i n_i \nabla^2 \ln(n_i) \tag{2.155}
\end{aligned}$$

従って、エネルギー W は次のように表すことができる。

$$W = \sum_i \left[\frac{\langle p_i \rangle^2}{2m^* n_i} - \frac{\hbar^2}{8m^*} n_i \nabla^2 \ln(n_i) \right] \tag{2.156}$$

上式の右辺第一項は明らかに運動エネルギーを表しているので、右辺第二項が熱エネルギーに相当すると考えられる。古典的には、熱エネルギーの項は $3/2k_B T$ で表されるので、上式の表現は温度に対する量子力学的な補正を示していると考えられる。

2.3 透過確率を用いた定常解析

ここで述べる透過確率法では、統計的な取り扱いとは両端の電極においてのみ考慮され、量子構造内における分布関数の変化を取り入れることができないことから、半導体デバイスの量子輸送を正確に記述することはできないが、その考え方および計算の簡単さから非常によく使われている手法である。以下では、ポテンシャル分布を階段近似して各領域の波動関数を境界で接続させる方法を用いて、電子波の透過確率を求める解析法 [26] について述べる。

一次元 (x 方向) の電子波を伝搬を考える。図 2.2 に示すように、量子構造デバイスのポテンシャル分布を階段近似し、各領域においてポテンシャルは一定であるとする。この時、領域 i における波動関数 ψ_i は平面波を用いて次式で表される。

$$\psi_i(x) = A_i e^{-jk_i x} + B_i e^{jk_i x} \tag{2.157}$$

但し

$$k_i = \frac{\sqrt{2m_i^*(E - V_i)}}{\hbar} \tag{2.158}$$

である。ここで、境界 $x = x_i$ において確率密度の流れの連続を与える境界条件 (2.44) と (2.45) を与える。

$$\psi_i(x_i) = \psi_{i+1}(x_i) \quad , \quad \frac{1}{m_i^*} \frac{d\psi_i(x)}{dx} \Big|_{x=x_i} = \frac{1}{m_{i+1}^*} \frac{d\psi_{i+1}(x)}{dx} \Big|_{x=x_i} \tag{2.159}$$

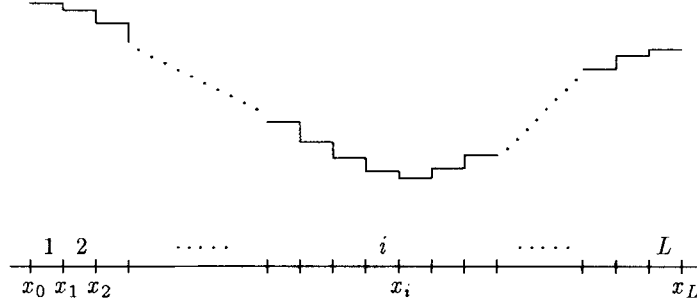


図2.2: 階段近似されたポテンシャル分布

この時、次の二式が得られる。

$$A_i e^{-jk_i x_i} + B_i e^{jk_i x_i} = A_{i+1} e^{-jk_{i+1} x_i} + B_{i+1} e^{jk_{i+1} x_i} \quad (2.160)$$

$$\frac{-jk_i}{m_i^*} (A_i e^{-jk_i x_i} - B_i e^{jk_i x_i}) = \frac{-jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} (A_{i+1} e^{-jk_{i+1} x_i} - B_{i+1} e^{jk_{i+1} x_i}) \quad (2.161)$$

これらを行列で表すと次のようになる。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-jk_{i+1} x_i} & e^{jk_{i+1} x_i} \\ \frac{-jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-jk_{i+1} x_i} & \frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{jk_{i+1} x_i} \end{pmatrix}}_P \begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-jk_i x_i} & e^{jk_i x_i} \\ \frac{-jk_i}{m_i^*} e^{-jk_i x_i} & \frac{jk_i}{m_i^*} e^{jk_i x_i} \end{pmatrix}}_Q \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} \quad (2.162)$$

左辺の行列 P の行列式 $|P|$ は

$$|P| = \frac{2jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} \quad (2.163)$$

と計算できるから、 P の逆行列は次式のようになる。

$$\begin{aligned} P^{-1} &= \frac{m_{i+1}^*}{2jk_{i+1}} \begin{pmatrix} \frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{jk_{i+1} x_i} & -e^{jk_{i+1} x_i} \\ \frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-jk_{i+1} x_i} & e^{-jk_{i+1} x_i} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{jk_{i+1} x_i} & \frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{jk_{i+1} x_i} \\ e^{-jk_{i+1} x_i} & -\frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-jk_{i+1} x_i} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.164)$$

この P^{-1} と右辺の行列 Q の積を計算すると

$$\begin{aligned} M_i &= P^{-1}Q = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{jk_{i+1} x_i} & \frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{jk_{i+1} x_i} \\ e^{-jk_{i+1} x_i} & -\frac{jk_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-jk_{i+1} x_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-jk_i x_i} & e^{jk_i x_i} \\ -\frac{jk_i}{m_i^*} e^{-jk_i x_i} & \frac{jk_i}{m_i^*} e^{jk_i x_i} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{-j(k_i - k_{i+1})x_i} & \left(1 - \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{j(k_i + k_{i+1})x_i} \\ \left(1 - \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{-j(k_i + k_{i+1})x_i} & \left(1 + \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}}\right) e^{j(k_i - k_{i+1})x_i} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.165)$$

となる。この行列 M_i を用いて式 (2.162) を表すと次のように書ける。

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = M_i \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} \quad (2.166)$$

この波動関数の振幅に関する接続の式を、領域 $i = 1$ から領域 $L - 1$ まで順次用いると、次式のように左側境界領域 1 と右側境界領域 L をつなげることができる。

$$\begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} = M_{L-1} M_{L-2} \cdots M_2 M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \prod_{i=1}^{L-1} M_i = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (2.167)$$

今、電子波の反射確率と透過確率を求めるために、領域 1 から振幅 1 の平面波が入射したとする。この時、平面波が領域内のポテンシャル変化によって複素振幅反射率 R で左方へ、また複素振幅透過率 T で右方へ散乱されるとする。領域 L (右側境界) での反射はないとすると、式 (2.167) から次式が得られる。

$$\begin{pmatrix} T \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} \quad (2.168)$$

これから

$$\begin{cases} T = M_{11} + M_{12}R \\ 0 = M_{21} + M_{22}R \end{cases}$$

となるので、 R および T はそれぞれ次のように表すことができる。

$$R = -\frac{M_{21}}{M_{22}} \quad (2.169)$$

$$T = M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} = \frac{M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21}}{M_{22}} = \frac{|M|}{M_{22}} = \prod_{i=1}^{L-1} |M_i| / M_{22} \quad (2.170)$$

ここで、式 (2.165) より $|M_i|$ を計算すると

$$|M_i| = \frac{1}{4} \left[\left(1 + \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}} \right)^2 - \left(1 - \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}} \right)^2 \right] = \frac{1}{4} \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}} = \frac{m_{i+1}^*}{m_i^*} \frac{k_i}{k_{i+1}} \quad (2.171)$$

となるから、 $|M_i|$ の積は次のように簡単になる。

$$\begin{aligned} |M| &= \prod_{i=1}^{L-1} |M_i| = \frac{m_L^*}{m_{L-1}^*} \frac{k_{L-1}}{k_L} \times \frac{m_{L-1}^*}{m_{L-2}^*} \frac{k_{L-2}}{k_{L-1}} \times \cdots \times \frac{m_3^*}{m_2^*} \frac{k_2}{k_3} \times \frac{m_2^*}{m_1^*} \frac{k_1}{k_2} \\ &= \frac{m_L^*}{k_L} \frac{k_1}{m_1^*} = \frac{m_L^*}{m_1^*} \frac{k_1}{k_L} \end{aligned} \quad (2.172)$$

これを式 (2.170) に代入すると、振幅透過率 T は次式のように表すことができる。

$$T = \frac{m_L^*}{m_1^*} \frac{k_1}{k_L} \frac{1}{M_{22}} \quad (2.173)$$

次に、量子構造を流れる電流密度を計算する際に必要となる確率密度の流れの反射確率 D_R と透過確率 D_T を求める。確率密度流 S は次式で与えられる。

$$S = -\frac{j\hbar}{2m^*} \left(\frac{d\psi^*}{dx} \psi - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) \quad (2.174)$$

入射波、反射波および透過波の確率密度流を、それぞれ S_I 、 S_R 、 S_T 、また、それぞれの波動関数を、 $\psi_I = e^{-jk_1x}$ 、 $\psi_R = Re^{jk_1x}$ 、 $\psi_T = Te^{-jk_Lx}$ と表すことにする。この時、各電子波の確率密度の流れは、それぞれ、次のように計算できる。

$$S_I = -\frac{j\hbar}{2m_1^*} \left[jk_1 e^{jk_1x} e^{-jk_1x} - e^{jk_1x} (-jk_1) e^{-jk_1x} \right] = \frac{-j\hbar}{2m_1^*} 2jk_1 = \frac{\hbar k_1}{m_1^*} \quad (2.175)$$

$$S_R = -\frac{j\hbar}{2m_1^*} \left[-jk_1 R^* e^{-jk_1x} R e^{jk_1x} - R^* e^{-jk_1x} jk_1 R e^{jk_1x} \right] = \frac{-j\hbar}{2m_1^*} (-2jk_1 |R|^2) = -\frac{\hbar k_1}{m_1^*} |R|^2 \quad (2.176)$$

$$S_T = -\frac{j\hbar}{2m_L^*} \left[jk_L T^* e^{jk_Lx} T e^{-jk_Lx} - T^* e^{jk_Lx} (-jk_L T) e^{-jk_Lx} \right] = \frac{-j\hbar}{2m_L^*} (2jk_L |T|^2) = \frac{\hbar k_L}{m_L^*} |T|^2 \quad (2.177)$$

これらから、確率密度の流れの反射確率 D_R と透過確率 D_T は

$$D_R(E) = \frac{-S_R}{S_I} = \frac{\hbar k_1 |R|^2}{m_1^* \hbar k_1} = |R|^2 \quad (2.178)$$

$$D_T(E) = \frac{S_T}{S_I} = \frac{\hbar k_L |T|^2}{m_L^* \hbar k_1} = \frac{m_1^* k_L}{m_L^* k_1} |T|^2 \quad (2.179)$$

と与えられることが分かる。上式に、振幅反射率 R と振幅透過率 T の表現式 (2.169) と (2.173) を代入すると、 D_R と D_T は、それぞれ、次式のように表すことができる。

$$D_R(E) = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad (2.180)$$

$$D_T(E) = \frac{m_1^* k_L}{m_L^* k_1} \left| \frac{m_L^* k_1}{m_1^* k_L} \frac{1}{M_{22}} \right|^2 = \frac{m_1^* k_1}{m_L^* k_L} \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (2.181)$$

このように、与えられたポテンシャル形状に対し式 (2.168) を解き、式 (2.180) と (2.181) を用いて反射確率と透過確率を計算することができる。

次に、デバイスにバイアス電圧を加えた時の電流密度を表す式を求める。この時、透過確率 $D_T(E)$ はバイアス電圧 V_B の関数となることに注意して、デバイス内を左から右へ流れる電流密度 J_{12} と右から左へ流れる電流密度 J_{21} の式を書くと、それぞれ、次のようになる。

$$J_{12} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int \int \int_1 d\mathbf{k}_t^2 dk_x D_{12}(E_x, V) \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right) f_1(E) [1 - f_2(E)] \quad (2.182)$$

$$J_{21} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int \int \int_2 d\mathbf{k}_t^2 dk_x D_{21}(E_x, V) \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right) f_2(E) [1 - f_1(E)] \quad (2.183)$$

但し、 k_x は伝搬方向の波数で、 k_t はそれに垂直な横方向の波数である。 D_{12} と D_{21} は、それぞれ左から右、右から左へ伝搬する電子波に対する確率密度の流れの透過確率を表す。 $(\partial E / \partial k_x) / \hbar$ は群速度

を、 $f_1(E)$ と $f_2(E)$ はそれぞれ左側と右側の電極における分布関数を示す。上式の積分を、エネルギーに関する積分に変える。伝搬方向と横方向のエネルギーをそれぞれ E_x 、 E_t とすると

$$E_t = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_1^*}, \quad E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1^*}, \quad dk_t^2 = 2\pi k_t dk_t, \quad dE_t = \frac{\hbar^2 k_t}{m_1^*} dk_t$$

となるから

$$dk_t^2 = \frac{2\pi m_1^*}{\hbar^2} dE_t, \quad 0 \leq E_t \leq \infty, \quad 0 \leq E_x \leq \infty$$

これらの関係を用いると、 J_{12} は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} J_{12} &= \frac{2e}{8\pi^3} \frac{2\pi m_1^*}{\hbar^2} \int_0^\infty dE_x \int_0^\infty dE_t \frac{1}{\hbar} D_{12}(E_x, V) f_1(E) [1 - f_2(E)] \\ &= \frac{em_1^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE_x \int_0^\infty dE_t D_{12}(E_x, V) f_1(E) [1 - f_2(E)] \end{aligned} \quad (2.184)$$

一方、 J_{21} は

$$E_t = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_2^*}, \quad E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_2^*} - eV \quad \text{より} \quad 0 \leq E_t \leq \infty, \quad -eV \leq E_x \leq \infty$$

となるから

$$\begin{aligned} J_{21} &= \frac{2e}{8\pi^3} \frac{2\pi m_2^*}{\hbar^2} \int_{-eV}^\infty dE_x \int_0^\infty dE_t \frac{1}{\hbar} D_{21}(E_x, V) f_2(E) [1 - f_1(E)] \\ &= \frac{em_2^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE_x \int_0^\infty dE_t D_{21}(E_x, V) f_2(E) [1 - f_1(E)] \end{aligned} \quad (2.185)$$

と表される。上式において、 $-eV \leq E_x \leq 0$ では、 $1 - f_1(E) = 0$ となることを考慮した。両電極材料の有効質量を同じ値とし、 $m_1^* = m_2^* = m^*$ を与える。また、透過確率に関して

$$D_{12}(E_x, V) = D_{21}(E_x, V) \quad (2.186)$$

の関係を用いると、正味のトンネル電流 J は次式のように書くことができる。

$$\begin{aligned} J &= J_{12} - J_{21} \\ &= \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE_x \int_0^\infty dE_t D_{12}(E_x, V) [f_1(E) - f_2(E)] \end{aligned} \quad (2.187)$$

x 方向のエネルギー E_x の電子によって流れる電流密度を $J(E_x)$ として、上式を

$$J = \int_0^\infty dE_x J(E_x) \quad (2.188)$$

と表す。この時

$$\begin{aligned} J(E_x) &= \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3} D_{12}(E_x, V) \int_0^\infty dE_t [f_1(E) - f_2(E)] \\ &= \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3} D_{12}(E_x, V) \int_{E_x}^\infty dE [f_1(E) - f_2(E)] \end{aligned} \quad (2.189)$$

となる。上式で、 $E = E_x + E_t$ を用いた。 $f_1(E)$ と $f_2(E)$ は、それぞれ左側、右側電極での分布関数であるが、これらを Fermi-Dirac 分布関数で次の式で与える。

$$f_1(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_f)/k_B T]}, \quad f_2(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_f + eV)/k_B T]} \quad (2.190)$$

但し、 E_f はフェルミエネルギー、 k_B はボルツマン定数、 T は温度を表す。これらを用いて、式(2.189)の積分を実行すると次のようになる。

$$\begin{aligned} & \int_{E_x}^{\infty} dE [f_1(E) - f_2(E)] \\ &= \int_{E_x}^{\infty} dE \left\{ \frac{1}{1 + \exp[(E - E_f)/k_B T]} - \frac{1}{1 + \exp[(E - E_f + eV)/k_B T]} \right\} \\ &= \int_{E_x}^{\infty} dE \left\{ \frac{\exp[-(E - E_f)/k_B T]}{1 + \exp[-(E - E_f)/k_B T]} - \frac{\exp[-(E - E_f + eV)/k_B T]}{1 + \exp[-(E - E_f + eV)/k_B T]} \right\} \\ &= -k_B T \left[\ln \left\{ 1 + \exp\left(-\frac{E - E_f}{k_B T}\right) \right\} - \ln \left\{ 1 + \exp\left(-\frac{E - E_f + eV}{k_B T}\right) \right\} \right]_{E_x}^{\infty} \\ &= -k_B T \left[\ln \left\{ \frac{1 + \exp[-(E - E_f)/k_B T]}{1 + \exp[-(E - E_f + eV)/k_B T]} \right\} \right]_{E_x}^{\infty} \\ &= -k_B T \left[\ln 1 - \ln \left\{ \frac{1 + \exp[-(E_x - E_f)/k_B T]}{1 + \exp[-(E_x - E_f + eV)/k_B T]} \right\} \right] \\ &= k_B T \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_f - E_x)/k_B T]}{1 + \exp[(E_f - E_x - eV)/k_B T]} \right\} \end{aligned} \quad (2.191)$$

これから、 $J(E_x)$ は次のように書くことができる。

$$J(E_x) = \frac{em^*k_B T}{2\pi^2\hbar^3} D_{12}(E_x, V) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_f - E_x)/k_B T]}{1 + \exp[(E_f - E_x - eV)/k_B T]} \right\} \quad (2.192)$$

これを、式(2.188)に代入すると電流密度 J が次式のように表される。

$$J = \frac{em^*k_B T}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^{\infty} dE_x D_{12}(E_x, V) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_f - E_x)/k_B T]}{1 + \exp[(E_f - E_x - eV)/k_B T]} \right\} \quad (2.193)$$

上式は、 $T = 0$ 以外では解析的な解を得ることはできないので、積分を数値的に計算して電流密度の値を求めることになる。

Chapter 3

量子井戸構造デバイスの量子輸送モデル

第二章で行ったウィグナー関数モデル定式化の議論は、バルク半導体中での輸送問題を取り扱ったものである。本章では、ウィグナー関数モデルを現実の量子構造半導体デバイスに適用するために、有効質量の位置変化と電子-電子相互作用を取り入れた新しい輸送モデルの提案を行い、典型的な量子構造電子デバイスである共鳴トンネルダイオードに適用して、その有用性を明らかにする。

3.1 ウィグナー関数モデル

3.1.1 有効質量の位置依存性を考慮した定式化

量子井戸構造の量子輸送を利用したデバイスでは、キャリアはその伝搬方向に垂直な横方向においては自由に運動することができるとして、一次元のキャリア輸送を考えることにする。ここでは、有効質量が位置によって変化する場合のウィグナー関数に関する Liouville 方程式の定式化を行う。この場合、各位置で確率密度の流れを保存する有効質量ハミルトニアンは、式 (2.41) から次式で与えられる。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \right) + v(x), \quad (3.1)$$

ポテンシャル $v(x)$ は、バンド端エネルギーの変化とバンド・ベンディングによるポテンシャル分布の変化を含んでいるとする。これを、座標表示された密度行列 $\rho(x, x', t)$ の運動方程式 (2.105) に代入すると

$$\begin{aligned} -j\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \right) + v(x) + \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \frac{d}{dx'} \right) - v(x') \right] \rho(x, x', t) \\ &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \frac{d}{dx} + \frac{1}{m^*(x)} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \frac{d}{dx'} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{m^*(x')} \frac{d^2}{dx'^2} \right] + v(x) - v(x') \right\} \rho(x, x', t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\left[\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \frac{d}{dx'} \right]}_A \rho(x, x', t) \\
&\quad - \frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\left[\frac{1}{m^*(x)} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{m^*(x')} \frac{d^2}{dx'^2} \right]}_B \rho(x, x', t) + [v(x) - v(x')] \rho(x, x', t) \quad (3.2)
\end{aligned}$$

となる。ここで、式(2.95)の変数変換を行うと

$$\frac{d}{dx} = \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \frac{d}{dx'} = \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial \chi}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x'} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (3.3)$$

$$x = \chi + \frac{\xi}{2}, \quad x' = \chi - \frac{\xi}{2} \quad (3.4)$$

となるので、式(3.2)の右辺第一および第二項は、それぞれ、次のように変形される。

$$\begin{aligned}
A &= \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) - \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \\
&= \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \right) \right] \times \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \\
&\quad - \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \right] \times \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \\
&= \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \right] \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \\
&+ \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \right] \frac{\partial}{\partial \xi} \\
&= \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \right] \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \\
&+ \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \right] \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (3.5)
\end{aligned}$$

ここで

$$\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} = \frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})}, \quad \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} = \frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \quad (3.6)$$

と置くと、式(3.5)は次のように書ける。

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial}{\partial \chi} \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (3.7)
\end{aligned}$$

さらに

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right), \quad \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \quad (3.8)$$

の関係（付録 D）を用いると、結局、A は次のように表すことができる。

$$A = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (3.9)$$

次に、右辺第 2 項について考える。

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^2 - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^2 \\ &= \frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} \left(\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \xi} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right) - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \left(\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \xi} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \xi} \\ &\quad + \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \end{aligned} \quad (3.10)$$

上式に式（3.6）で定義した $m^+(\chi, \xi)$ と $m^-(\chi, \xi)$ を用いると

$$B = \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \left(\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right) + \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \xi} \quad (3.11)$$

となる。従って、密度行列の運動方程式（3.2）は、重心座標 χ と相対座標 ξ を用いて、次式のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\chi + \frac{\xi}{2}, \chi - \frac{\xi}{2}, t)}{\partial t} &= -\frac{j\hbar}{2} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial \rho}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right] \\ &\quad - \frac{j\hbar}{2} \left[\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \left(\frac{1}{4} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial \xi^2} \right) + \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \chi \partial \xi} \right] \\ &\quad + \frac{j}{\hbar} \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] \rho \end{aligned} \quad (3.12)$$

さらに、ウィグナー関数の Liouville 方程式を導くために、上式の両辺を ξ に関してフーリエ変換すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d\xi e^{jk\xi} \rho &= -\frac{j\hbar}{2} \left[\frac{1}{2} \int d\xi e^{jk\xi} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial \rho}{\partial \chi} + \int d\xi e^{jk\xi} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right] \\ &\quad - \frac{j\hbar}{2} \left[\int d\xi e^{jk\xi} \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \left(\frac{1}{4} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial \xi^2} \right) + \int d\xi e^{jk\xi} \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \chi \partial \xi} \right] \\ &\quad + \frac{j}{\hbar} \int d\xi e^{jk\xi} \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] \rho \end{aligned} \quad (3.13)$$

となる。まず、左辺は次式のようにウィグナー関数を時間微分した項になる。

$$(\text{左辺}) = \frac{\partial}{\partial t} \int d\xi e^{jk\xi} \rho = \frac{\partial f(\chi, k)}{\partial t} \quad (3.14)$$

次に、右辺の各項を変形していく。その際に用いる χ と ξ に関する微分の項を、まとめて以下に示しておく。

$$\frac{\partial \rho}{\partial \chi} = \frac{1}{2\pi} \int dk' e^{-jk'\xi} \frac{\partial f}{\partial \chi}, \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial \chi^2} = \frac{1}{2\pi} \int dk' e^{-jk'\xi} \frac{\partial^2 f}{\partial \chi^2} \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \xi} = -\frac{j}{2\pi} \int dk' e^{-jk'\xi} k' f(\chi, k') \quad , \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial \xi^2} = -\frac{1}{2\pi} \int dk' e^{-jk'\xi} k'^2 f(\chi, k') \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial \chi \partial \xi} = -\frac{j}{2\pi} \int dk' e^{-jk'\xi} k' \frac{\partial f}{\partial \chi} \quad (3.17)$$

これらを用いながら、右辺の各項について計算を行う。

$$\begin{aligned} \text{式 (3.13) 右辺第一項} &= -\frac{j\hbar}{8\pi} \int d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \int dk' \frac{\partial f}{\partial \chi} e^{j(k-k')\xi} \\ &\quad -\frac{j\hbar}{8\pi} \int dk' \frac{\partial f}{\partial \chi} \int d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) e^{j(k-k')\xi} \end{aligned} \quad (3.18)$$

ここで、 $\frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right)$ が ξ に関して奇関数になることを用いると

$$\text{式 (3.18)} = \frac{\hbar}{8\pi} \int dk' \frac{\partial f}{\partial \chi} \int d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \sin[(k-k')\xi] \quad (3.19)$$

となる。式 (3.13) の右辺第二項に関しては、 $\frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right)$ が ξ に関して偶関数になることを用いると

$$\begin{aligned} \text{式 (3.13) 右辺第二項} &= -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' f(\chi, k') \int d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) e^{j(k-k')\xi} \\ &= -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' f(\chi, k') \int d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \cos[(k-k')\xi] \end{aligned} \quad (3.20)$$

となる。残りの右辺第三項から第五項を計算すると、それぞれ次のようになる。

$$\begin{aligned} \text{式 (3.13) 右辺第三項} &= -\frac{j\hbar}{4\pi} \int dk' \left[\frac{1}{4} \frac{\partial^2 f}{\partial \chi^2} - k'^2 f(\chi, \xi) \right] \int d\xi \frac{e^{j(k-k')\xi}}{m^-(\chi, \xi)} \\ &= \frac{\hbar}{16\pi} \int dk' \left[\frac{\partial^2 f}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, \xi) \right] \int d\xi \frac{\sin[(k-k')\xi]}{m^-(\chi, \xi)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{式 (3.13) 右辺第四項} &= -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' \frac{\partial f}{\partial \chi} \int d\xi \frac{e^{j(k-k')\xi}}{m^+(\chi, \xi)} \\ &= -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' \frac{\partial f}{\partial \chi} \int d\xi \frac{\cos[(k-k')\xi]}{m^+(\chi, \xi)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{式 (3.13) 右辺第五項} &= \frac{j}{2\pi\hbar} \int dk' f(\chi, \xi) \int d\xi \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] e^{j(k-k')\xi} \\ &= -\frac{1}{2\pi\hbar} \int dk' f(\chi, \xi) \int d\xi \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] \sin[(k-k')\xi] \end{aligned}$$

以上より、次の新しい Wigner 関数に関する Liouville 方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{8\pi} M_1(\chi, k-k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_2(\chi, k-k') f(\chi, k') \\ &\quad + \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{16\pi} M_3(\chi, k-k') \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right] \\ &\quad - \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_4(\chi, k-k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(\chi, k-k') f(\chi, k') \end{aligned} \quad (3.21)$$

但し

$$M_1(\chi, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \sin[(k - k')\xi] \quad (3.22)$$

$$M_2(\chi, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \cos[(k - k')\xi] \quad (3.23)$$

$$M_3(\chi, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \frac{\sin[(k - k')\xi]}{m^-(\chi, \xi)} \quad (3.24)$$

$$M_4(\chi, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \frac{\cos[(k - k')\xi]}{m^+(\chi, \xi)} \quad (3.25)$$

$$V(\chi, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \left[v \left(\chi + \frac{1}{2}\xi \right) - v \left(\chi - \frac{1}{2}\xi \right) \right] \sin[(k - k')\xi] \quad (3.26)$$

$$\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} = \frac{1}{m^*(\chi + \frac{1}{2}\xi)} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{1}{2}\xi)}, \quad \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} = \frac{1}{m^*(\chi + \frac{1}{2}\xi)} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{1}{2}\xi)} \quad (3.27)$$

と置いた。上式は、ポテンシャルの非局所性だけでなく、位置とともに変化する有効質量の非局所性も正確に取り入れた表現になっている。

この新しい Liouville 方程式について考察する。まず、式 (3.21) から従来の Liouville 方程式が導かれることを示す。今、式 (3.21) において有効質量を全デバイス領域で一定とし、 $m^*(x) = m^*$ とする。この時

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) = \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) = \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} = 0, \quad \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} = \frac{2}{m^*} \quad (3.28)$$

となるので、これらを式 (3.22) ~ (3.25) に用いると、それぞれ、次のようになる。

$$M_1(\chi, k - k') = M_2(\chi, k - k') = M_3(\chi, k - k') = 0, \quad M_4(\chi, k - k') = \frac{4\pi}{m^*} \delta(k - k') \quad (3.29)$$

これらを式 (3.21) に代入すると、Liouville 方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar}{4\pi m^*} \int dk' k' \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \int d\xi \cos[(k - k')\xi] - \frac{1}{\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} V(\chi, k - k') f(\chi, k') \quad (3.30)$$

となる。さらに、上式の cos 項の積分に関して

$$\int d\xi \cos[(k - k')\xi] = \text{Re} \left[\int d\xi e^{j(k - k')\xi} \right] = \text{Re} [2\pi \delta(k - k')] = 2\pi \delta(k - k') \quad (3.31)$$

の関係をを用いると、次式のように従来の Liouville 方程式が得られることが分かる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar k}{m^*} \frac{\partial f}{\partial \chi} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(\chi, k - k') f(\chi, k') \quad (3.32)$$

次に、Liouville 方程式 (3.21) の両辺を波数 k で積分すると、電流連続の式が得られることを示す。まず、左辺から計算すると

$$(\text{左辺}) = \int dk \frac{\partial f(\chi, k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} f(\chi, k) = 2\pi \frac{\partial n(\chi)}{\partial t} \quad (3.33)$$

となる。一方、右辺の $M_1(\chi, k-k')$ 、 $M_3(\chi, k-k')$ および $V(\chi, k-k')$ は $\sin[(k-k')\xi]$ の項を含むので、 k で積分すると零になる。残りの右辺第二項と第四項について計算する。

$$(\text{右辺第二項}) = -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' f(\chi, k') \int \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \int dk \cos[(k-k')\xi] \quad (3.34)$$

ここで

$$\int dk \cos[(k-k')\xi] = \text{Re} \left[\int dk e^{j(k-k')\xi} \right] = \text{Re} \left[e^{-jk'\xi} \int dk e^{jk\xi} \right] = \text{Re} \left[e^{-jk'\xi} 2\pi \delta(\xi) \right] = 2\pi \delta(\xi) \quad (3.35)$$

の関係を用いると

$$\begin{aligned} (\text{右辺第二項}) &= -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' f(\chi, k') \int \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) 2\pi \delta(\xi) \\ &= -\frac{\hbar}{2} \int dk' k' f(\chi, k') \int \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, 0)} \right) \\ &= -\frac{\hbar}{2} \int dk' k' f(\chi, k') \int \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{2}{m^*(\chi)} \right) \\ &= -\int dk' \hbar k' f(\chi, k') \int \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \end{aligned} \quad (3.36)$$

となる。同様にして、右辺第四項を計算すると次のようになる。

$$\begin{aligned} (\text{右辺第四項}) &= -\frac{\hbar}{4\pi} \int dk' k' \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \int d\xi \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \int dk \cos[(k-k')\xi] \\ &= -\frac{\hbar}{2} \int dk' k' \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \int d\xi \frac{\delta(\xi)}{m^+(\chi, \xi)} \\ &= -\int dk' \frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \end{aligned} \quad (3.37)$$

以上より、次の電流連続の式が得られることが分かる。

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial j(\chi)}{\partial \chi}} \quad (3.38)$$

但し、キャリア密度 $n(\chi)$ と電流密度 $j(\chi)$ は、それぞれ、次式で定義した。

$$n(\chi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(\chi, k) \quad (3.39)$$

$$j(\chi) = e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m^*(\chi)} f(\chi, k) \quad (3.40)$$

電流密度の式(3.40)は、有効質量が一定の場合の表現式(2.102)の有効質量 m^* に位置依存性が考慮された形になっている。

また、電子-電子相互作用を取り入れるために、ウィグナー関数の Liouville 方程式と次式のポアンソ方程式を自己無撞着に解くことにする。

$$\boxed{\frac{d}{d\chi} \left(\varepsilon(\chi) \frac{d\psi}{d\chi} \right) = -e(\Gamma + p - n)} \quad (3.41)$$

但し、 $\epsilon(\chi)$ は位置とともに変化する誘電率であり、 Γ はドーピング密度を表す。Liouville 方程式 (3.21) とポアソン方程式 (3.41) の二式は、次のポテンシャルとキャリア密度を通じて、互いに関係付けられる。

$$v(\chi) = -[\chi_e(\chi) - \chi_e(0)] - e[\psi(\chi) - \psi(0)] \quad , \quad n(\chi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(\chi, k) \quad (3.42)$$

但し、 χ_e は半導体材料の電子親和力である。

3.1.2 古典的極限

前節で定式化された新しいウィグナー関数の Liouville 方程式と古典論との対応を議論する。まず、式 (3.27) に現れる $\frac{1}{m^*(\chi+\xi/2)}$ と $\frac{1}{m^*(\chi-\xi/2)}$ を Taylor 展開して次式のように表す。

$$\frac{1}{m^*(\chi+\frac{\xi}{2})} = \frac{1}{m^*(\chi)} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\xi/2)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{\partial^{n+1}}{\partial \chi^{n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \quad (3.43)$$

$$\frac{1}{m^*(\chi-\frac{\xi}{2})} = \frac{1}{m^*(\chi)} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\xi/2)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{\partial^{n+1}}{\partial \chi^{n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \quad (3.44)$$

これら二式の和と差をとると、式 (3.27) で定義した $\frac{1}{m^-(\chi, \xi)}$ と $\frac{1}{m^+(\chi, \xi)}$ に対する式が、次のように得られる。

$$\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} = \frac{1}{m^*(\chi+\frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi-\frac{\xi}{2})} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\xi/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \quad (3.45)$$

$$\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} = \frac{1}{m^*(\chi+\frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi-\frac{\xi}{2})} = \frac{2}{m^*(\chi)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\xi/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \chi^{2n}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \quad (3.46)$$

上式を位置 χ で微分すると、それぞれ

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\xi/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+2}}{\partial \chi^{2n+2}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) = 2 \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\xi/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \quad (3.48)$$

となる。これらを式 (3.22) ~ (3.25) に代入し、 $M_1(\chi, k-k') \sim M_4(\chi, k-k')$ を微分形で表すと、それぞれ、次のようになる。

$$\begin{aligned} M_1(\chi, k-k') &= \frac{2}{j} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+2}}{\partial \chi^{2n+2}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^{2n+1} e^{j(k-k')\xi} \\ &= \frac{2}{j} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+2}}{\partial \chi^{2n+2}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{1}{j^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial k^{2n+1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(k-k')\xi} \\ &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{j^{2n+2}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+2}}{\partial \chi^{2n+2}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) 2\pi \delta(k-k') \frac{\partial^{2n+1}}{\partial k^{2n+1}} \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$M_2(\chi, k - k')$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(k-k')\xi} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^{2n} e^{j(k-k')\xi} \\
&= 4\pi \delta(k - k') \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial k^{2n}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(k-k')\xi} \right) \\
&= 4\pi \delta(k - k') \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) + 4\pi \delta(k - k') \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial k^{2n}} \quad (3.50)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_3(\chi, k - k') &= \frac{2}{j} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^{2n+1} e^{j(k-k')\xi} \\
&= \frac{2}{j} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{j^{2n+1}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n+1}}{\partial k^{2n+1}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(k-k')\xi} \right) \\
&= 4\pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{j^{2n+1}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \delta(k - k') \frac{\partial^{2n+1}}{\partial k^{2n+1}} \quad (3.51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_4(\chi, k - k') &= \frac{2}{m^*(\chi)} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(k-k')\xi} \\
&= 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \chi^{2n}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^{2n} e^{j(k-k')\xi} \\
&= \frac{4\pi \delta(k - k')}{m^*(\chi)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \chi^{2n}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial k^{2n}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{j(k-k')\xi} \right) \\
&= \frac{4\pi \delta(k - k')}{m^*(\chi)} + 4\pi \delta(k - k') \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \chi^{2n}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial k^{2n}} \quad (3.52)
\end{aligned}$$

但し、これらの導出の過程で式(2.118)の関係を用いた。これらをLiouville方程式(3.21)に代入すると、右辺第一項から第四項は、それぞれ、次のように表される。

$$\begin{aligned}
\text{式(3.21) 右辺第一項} &= \hbar \int \frac{dk'}{8\pi} M_1(\chi, k - k') \frac{\partial f}{\partial \chi} \\
&= \frac{\hbar}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{j^{2n+2}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+2}}{\partial \chi^{2n+2}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n+1}}{\partial k^{2n+1}} \left(\frac{\partial f(\chi, k)}{\partial \chi} \right) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar^{2n+2}}{j^{2n+2}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+2}}{\partial \chi^{2n+2}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n+1}}{\partial p^{2n+1}} \left(\frac{\partial f(\chi, p)}{\partial \chi} \right) \quad (3.53)
\end{aligned}$$

式(3.21) 右辺第二項

$$\begin{aligned}
&= -\hbar \int \frac{dk'}{4\pi} k' M_2(\chi, k - k') f(\chi, k') \\
&= -\hbar k \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) f(\chi, k) - \hbar k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial k^{2n}} f(\chi, k) \\
&= -p \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) f(\chi, p) - k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^{2n+1}}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial p^{2n}} f(\chi, p) \quad (3.54)
\end{aligned}$$

式 (3.21) 右辺第三項

$$\begin{aligned}
&= \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{16\pi} M_3(\chi, k-k') \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right] \\
&= \frac{\hbar}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{j^{2n+2}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n+1}}{\partial k^{2n+1}} \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k)}{\partial \chi^2} - 4k^2 f(\chi, k) \right] \\
&= \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar^{2n+2}}{j^{2n+2}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n+1}}{\partial p^{2n+1}} \left(\frac{\partial^2 f(\chi, k)}{\partial \chi^2} \right) \\
&\quad - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hbar^{2n}}{j^{2n+2}} \frac{(1/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1}}{\partial \chi^{2n+1}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n+1}}{\partial p^{2n+1}} (p^2 f(\chi, k)) \tag{3.55}
\end{aligned}$$

式 (3.21) 右辺第四項

$$\begin{aligned}
&= -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_4(\chi, k-k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \\
&= -\hbar k \frac{1}{m^*(\chi)} \frac{\partial f(\chi, k)}{\partial \chi} - \hbar k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \chi^{2n}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial k^{2n}} \left(\frac{\partial f(\chi, k)}{\partial \chi} \right) \\
&= -\frac{p}{m^*(\chi)} \frac{\partial f(\chi, k)}{\partial \chi} - k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^{2n+1}}{j^{2n}} \frac{(1/2)^{2n}}{2n!} \frac{\partial^{2n}}{\partial \chi^{2n}} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial^{2n}}{\partial p^{2n}} \left(\frac{\partial f(\chi, p)}{\partial \chi} \right) \tag{3.56}
\end{aligned}$$

上式 (3.53) ~ (3.56) において、 $\hbar \rightarrow 0$ とすると、各項の古典的極限の表現が、次式のように得られる。

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\text{式(3.53)}) = 0 \tag{3.57}$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\text{式(3.54)}) = -p \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) f(\chi, p) \tag{3.58}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\text{式(3.55)}) &= -\frac{1}{j^2} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial}{\partial p} (p^2 f(\chi, p)) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \left(2p f(\chi, p) + p^2 \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial p} \right) \\
&= p \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) f(\chi, k) + \frac{p^2}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial f(\chi, k)}{\partial p} \tag{3.59}
\end{aligned}$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\text{式(3.56)}) = -\frac{p}{m^*(\chi)} \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial \chi} \tag{3.60}$$

また、ポテンシャル項については従来と同じであるから、2章の結果より

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\text{式(2.119)}) = \frac{dv(\chi)}{d\chi} \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial p} \tag{3.61}$$

となる。以上の式 (3.57) ~ (3.61) より、ウィグナー関数の Liouville 方程式の古典的極限での表現は、次のようになることが分かる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -p \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) f(\chi, p) + p \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) f(\chi, p) + \frac{p^2}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial p}$$

$$= \left[\frac{p^2}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi)} \right) + \frac{\partial v}{\partial \chi} \right] \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial p} - \frac{p}{m^*(\chi)} \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial \chi} + \frac{\partial v}{\partial \chi} \frac{\partial f(\chi, p)}{\partial p} \quad (3.62)$$

上式は、有効質量の位置変化による力の項が加わったボルツマン輸送方程式になっている。これは、古典的に納得のいく表現であり、新しい Liouville 方程式が古典論と非常に良く対応していることを示している。このように、新しく定式化された Liouville 方程式 (3.21) は一見複雑な形をしているが、有効質量を一定とした場合には従来の Liouville 方程式と一致すること、古典的連続の式が導かれること、そして古典的極限では、有効質量の位置変化による力の項が加わったボルツマン輸送方程式に一致することの三つの点から判断して、Liouville 方程式 (3.21) は妥当であると考えている。

3.1.3 衝突項

これまでの議論では、キャリアの散乱過程については全く考慮しておらず、バリスティック輸送を仮定している。一般に、多体効果や散乱の効果を厳密に取り入れた形の量子力学的輸送方程式を表現することは可能であるが [12]、その複雑さのため具体的に計算を実行することは困難であり、未だ試みられたことはない。ここでは、古典的ボルツマン輸送方程式と同様に、緩和時間近似を用いて現象論的に衝突項を Liouville 方程式に付け加えることによって、散乱の効果を取り入れることにする。

単位時間に衝突によって波数 k から k' へ遷移する確率を $W(k, k')$ 、逆に k' から k へ遷移する確率を $W(k', k)$ とすると、衝突項は次のように表される。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C = \int dk' [W(k', k)f(\chi, k') - W(k, k')f(\chi, k)] \quad (3.63)$$

上式を変形すると

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C = \int dk' W(k', k)f(\chi, k') - f(\chi, k) \int dk' W(k, k') \quad (3.64)$$

式 (3.64) において、 k から他のすべての波数 k' への遷移を表す右辺第二項の積分を緩和時間 τ を用いて次のように置くことにする。

$$\int dk' W(k, k') = \frac{1}{\tau} \quad (3.65)$$

この時、式 (3.64) は次式のように表すことができる。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C = \int dk' W(k', k)f(\chi, k') - \frac{f(\chi, k)}{\tau} \quad (3.66)$$

熱平衡状態では、 $(\partial f / \partial t)_C = 0$ であるから

$$\int dk' W(k', k)f_{eq}(\chi, k') = \frac{f_{eq}(\chi, k)}{\tau} \quad (3.67)$$

が成り立つ。但し、 $f_{eq}(\chi, k)$ は熱平衡状態での分布関数を表す。今、 $W(k', k)$ の波数 k' による変化が小さいと仮定すると

$$W(k', k) \simeq \frac{1}{\tau} \frac{f_{eq}(\chi, k)}{\int dk' f_{eq}(\chi, k')} = \frac{1}{\tau} \frac{f_{eq}(\chi, k)}{\int dk f_{eq}(\chi, k)} \quad (3.68)$$

とできるから、これを式 (3.66) に代入すると、衝突項として次式の表現が得られる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_C &= \frac{1}{\tau} \frac{f_{eq}(\chi, k)}{\int dk f_{eq}(\chi, k)} \int dk' f(\chi, k') - \frac{f(\chi, k)}{\tau} \\ &= -\frac{1}{\tau} \left[f(\chi, k) - \frac{f_{eq}(\chi, k)}{\int dk f_{eq}(\chi, k)} \int dk' f(\chi, k') \right] \end{aligned} \quad (3.69)$$

上式の衝突項を Liouville 方程式 (3.21) の右辺に現象論的に付け加えると、次式のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{8\pi} M_1(\chi, k - k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_2(\chi, k - k') f(\chi, k') \\ &\quad + \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{16\pi} M_3(\chi, k - k') \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right] \\ &\quad - \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_4(\chi, k - k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(\chi, k - k') f(\chi, k') \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \left[f(\chi, k) - \frac{f_{eq}(\chi, k)}{\int dk f_{eq}(\chi, k)} \int dk' f(\chi, k') \right] \end{aligned} \quad (3.70)$$

このように、現象論的な緩和時間近似の妥当性については多くの疑問が残っているが、実際の数値計算を行う際の取り扱いの簡単さから、ほとんどの場合、この近似が用いられている。しかし、より高精度なデバイスシミュレーションを行うためには、第一章で述べた有限の散乱時間や ICFE 等を正確に取り入れることが必要となるであろう。

3.1.4 境界条件

量子輸送を利用する半導体デバイスは、その両端に電極を有し、そこから電子および正孔が量子サイズ構造部に注入される構造になっている。そのような半導体デバイスをシミュレーションする場合の境界条件について述べる。まず、ウィグナー関数の Liouville 方程式に対する境界条件について考える。量子サイズ構造から十分遠方では、電子は量子構造の影響を受けない完全に自由な伝導電子であると考えることができる。そのような領域 (reservoir) では、電子は熱平衡状態にあり、その分布は Fermi-Dirac 分布関数を用いて記述することができる。量子サイズ構造部に注入される電子は、このような reservoir の熱平衡分布関数に従うものとする。一方、量子サイズ構造部から出ていく電子は、reservoir との境界で反射されることなく全て reservoir によって吸収されるとする。このよう

なデバイス両端での境界条件は、次式で与えられる [8]。

$$f(0, k) = f_l(k) \quad k > 0 \quad , \quad f(L, k) = f_r(k) \quad k < 0 \quad (3.71)$$

$$f_{l,r}(k) = \frac{m_{l,r}^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}} \right) \right] \right\} \quad (3.72)$$

但し、添字 l, r は、それぞれ、左側および右側の reservoir を表す。上式 (3.72) は、温度 T と擬 Fermi 準位 E_f で表される Fermi-Dirac 分布関数を横方向の波数で積分して得られる (付録 E)。

一方、ポアソン方程式のポテンシャルに対する境界条件は次式で与えられる [27]。

$$\psi(0) = \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{n(0)}{\omega(0)n_i(0)} \right] \quad , \quad \psi(L) = V_b + \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{n(L)}{\omega(L)n_i(L)} \right] \quad (3.73)$$

ここで、 $\omega(\chi)$ は位置によって変化するバンドギャップを表現するために導入されたバンドグレーディング関数であり、次式で与えられる。

$$\omega(\chi) = \sqrt{\frac{N_v(0)N_c(\chi)}{N_c(0)N_v(\chi)}} \exp \left[\frac{E_G(\chi) - E_G(0)}{2k_B T} \right] \exp \left[\frac{\chi e(\chi) - \chi e(0)}{k_B T} \right] \quad (3.74)$$

但し、 N_c, N_v はそれぞれ伝導帯および価電子帯の有効状態密度であり、 E_G はエネルギーギャップを表す。

3.1.5 有限差分法による離散化

一般に、ウィグナー関数に関する Liouville 方程式とポアソン方程式を解析的に解くことは困難であるので、ここでは有限差分法を用いた数値解析によりこれら二式を解くことにする。まず、差分分割点を図 3.1 のように与える。横軸および縦軸は、それぞれ位置 χ と波数 k を表している。 $x = 0$ と $x = L$ のデバイスの両端における黒丸は、境界条件 (3.71) による励振を示している。ウィグナー関数は位相空間上の関数であるので、座標と波数の二つの空間において差分を行うが、その分割幅は、離散フーリエ変換を用いる関係上均一にする必要がある。位置 χ に関しては、デバイス領域 ($0 \leq \chi \leq L$) を N_χ 個の点に、分割幅 $\Delta_\chi = L/(N_\chi - 1)$ で離散化する。

$$\chi \in \{0, \Delta_\chi, 2\Delta_\chi, \dots, L\} \quad (3.75)$$

また、相対座標 ξ に関しては、その係数が $1/2$ であることを考慮して

$$\xi \in \{0, 2\Delta_\chi, 4\Delta_\chi, \dots, N_\xi \Delta_\chi\} \quad (3.76)$$

とする。但し、 N_ξ は ξ の分割数を表す。 ξ のサンプリング周期は $2\Delta_\chi$ であるので、ポテンシャル項は $k = \pi/\Delta_\chi$ の周期を持つようになる。従って、 k 空間に関しては第一ブリルアン領域 ($-\pi/2\Delta_\chi \leq k \leq \pi/2\Delta_\chi$) において、分割数 N_k 、分割幅 $\Delta_k = \pi/N_k \Delta_\chi$ として次式のように離散化する。

$$k \in \left\{ \frac{\pi}{\Delta_\chi} \left(\frac{j - \frac{1}{2}}{N_k} - \frac{1}{2} \right) \right\} \quad (3.77)$$

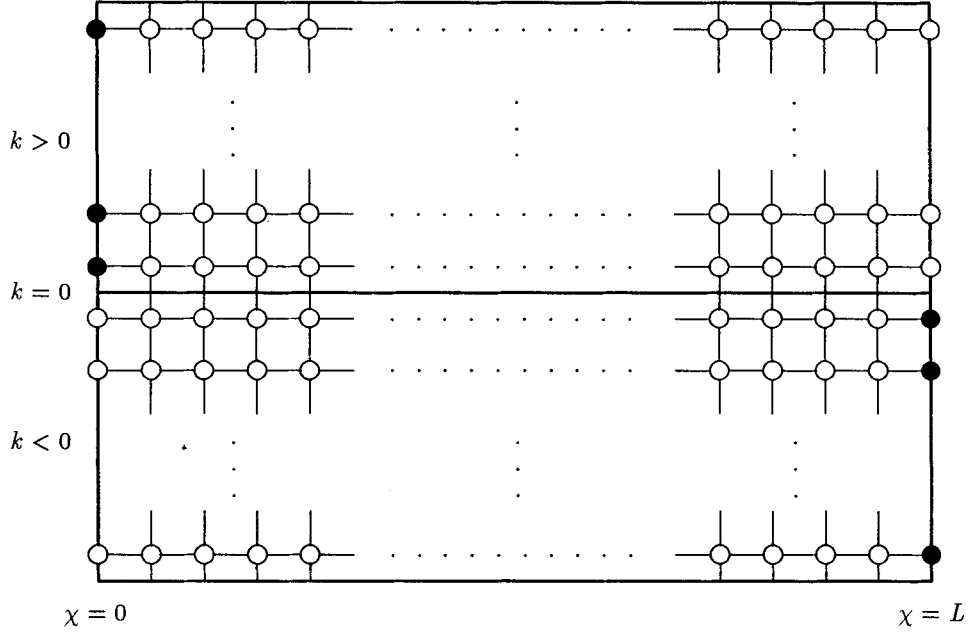


図 3.1: 位相空間の離散化

上式においては、後に述べる Liouville 方程式を離散化して得られる行列の対角項に零が現れないように、 $k = 0$ の点を含めないようにした。 N_ξ と N_k の値は、その比が $N_\xi/N_k = 1/2$ となるように与える（付録 F）。以上のように分割した位相空間上で Liouville 方程式とポアソン方程式を離散化する。

まず、Liouville 方程式の離散化を考える。その際に、右辺の各項に出てくる $M_1(\chi, k - k') \sim M_4(\chi, k - k')$ と $V(\chi, k - k')$ の離散化の式を導いておく。

(1) $M_1(\chi, k - k')$ と $M_2(\chi, k - k')$ の離散化

式 (3.22) と (3.23) における位置 χ に関する微分を、有限差分法を用いて離散化すると次のようになる。

$$M_1(\chi, k - k') = 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^-(\chi - \Delta_x, \xi)} \right] \sin[(k - k')\xi] \quad , k' < 0 \\ \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^-(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right] \sin[(k - k')\xi] \quad , k' > 0 \end{array} \right\} \quad (3.78)$$

$$M_2(\chi, k - k') = 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi - \Delta_x, \xi)} \right] \cos[(k - k')\xi] \quad , k' < 0 \\ \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^+(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right] \cos[(k - k')\xi] \quad , k' > 0 \end{array} \right\} \quad (3.79)$$

但し、 $k' < 0$ において後進差分、 $k' > 0$ において前進差分をとった。これは、後で述べる電流密度の離散化の際に、定常状態での電流密度が位置に依らず一定となるようにするためである。この時、Liouville 方程式 (3.21) の右辺第一と第二項を合わせて書くと、次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{8\pi} M_1(\chi, k - k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_2(\chi, k - k') f(\chi, k') \\
&= \hbar \sum_{\{k'\}} \frac{\Delta_k}{8\pi} M_1(\chi, k - k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \hbar \sum_{\{k'\}} \frac{\Delta_k}{4\pi} M_2(\chi, k - k') k' f(\chi, k') \\
&= \hbar \sum_{\{k'\}} \frac{4\Delta_k \Delta_x}{8\pi} \sum_{\{\xi\}} \sin[(k - k')\xi] \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^-(\chi - \Delta_x, \xi)} \right], k' < 0 \\ \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^-(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right], k' > 0 \end{array} \right\} \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \\
&- \hbar \sum_{\{k'\}} \frac{4\Delta_k \Delta_x}{4\pi} \sum_{\{\xi\}} \cos[(k - k')\xi] \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi - \Delta_x, \xi)} \right], k' < 0 \\ \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^+(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right], k' > 0 \end{array} \right\} k' f(\chi, k')
\end{aligned}$$

これから、 $M_1(\chi, k - k')$ と $M_2(\chi, k - k')$ の離散化された式は、次のように表すことができる。

$$M_1(\chi, k - k') = \frac{1}{2N_k} \sum_{\{\xi\}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^-(\chi - \Delta_x, \xi)} \right] \sin[(k - k')\xi], k' < 0 \\ \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^-(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right] \sin[(k - k')\xi], k' > 0 \end{array} \right\} \quad (3.80)$$

$$M_2(\chi, k - k') = \frac{1}{N_k} \sum_{\{\xi\}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi - \Delta_x, \xi)} \right] \cos[(k - k')\xi], k' < 0 \\ \frac{1}{\Delta_x} \left[\frac{1}{m^+(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right] \cos[(k - k')\xi], k' > 0 \end{array} \right\} \quad (3.81)$$

但し、 $\Delta_k = \pi/N_k \Delta_x$ の関係を用いた。

(2) $M_3(\chi, k - k')$ と $M_4(\chi, k - k')$ の離散化

式 (3.24) と (3.25) を離散化すると次のようになる。

$$M_3(\chi, k - k') = 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \frac{\sin[(k - k')\xi]}{m^-(\chi, \xi)} \quad (3.82)$$

$$M_4(\chi, k - k') = 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \frac{\cos[(k - k')\xi]}{m^+(\chi, \xi)} \quad (3.83)$$

この時、Liouville 方程式 (3.21) の右辺第三と第四項を合わせて書くと、次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{16\pi} M_3(\chi, k - k') \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right] - \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{4\pi} k' M_4(\chi, k - k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \\
&= \hbar \sum_{\{k'\}} \frac{\Delta_k}{16\pi} 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \frac{\sin[(k - k')\xi]}{m^-(\chi, \xi)} \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\hbar \sum_{\{k'\}} \frac{\Delta_k}{4\pi} 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \frac{\cos[(k-k')\xi]}{m^+(\chi, \xi)} k' \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \\
= & \hbar \sum_{\{k'\}} \frac{1}{4N_k} \sum_{\{\xi\}} \frac{\sin[(k-k')\xi]}{m^-(\chi, \xi)} \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right] \\
& -\hbar \sum_{\{k'\}} \frac{1}{N_k} \sum_{\{\xi\}} \frac{\cos[(k-k')\xi]}{m^+(\chi, \xi)} k' \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \tag{3.84}
\end{aligned}$$

これから、 $M_3(\chi, k-k')$ と $M_4(\chi, k-k')$ の離散化された式は次式のように表すことができる。

$$M_3(\chi, k-k') = \frac{1}{4N_k} \sum_{\{\xi\}} \frac{\sin[(k-k')\xi]}{m^-(\chi, \xi)} \tag{3.85}$$

$$M_4(\chi, k-k') = \frac{1}{N_k} \sum_{\{\xi\}} \frac{\cos[(k-k')\xi]}{m^+(\chi, \xi)} \tag{3.86}$$

(3) $V(\chi, k-k')$ の離散化

式(3.26)を離散化すると次のようになる。

$$V(\chi, k-k') = 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] \sin[(k-k')\xi] \tag{3.87}$$

この時、Liouville 方程式(3.21)の右辺第五項は次のようになる。

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(\chi, k-k') f(\chi, k') \\
= & -\frac{1}{\hbar} \sum_{\{k'\}} \frac{\Delta_k}{2\pi} V(\chi, k-k') f(\chi, k') \\
= & -\frac{1}{\hbar} \sum_{\{k'\}} \frac{\Delta_k}{2\pi} 4\Delta_x \sum_{\{\xi\}} \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] \sin[(k-k')\xi] f(\chi, k') \\
= & -\frac{1}{\hbar} \sum_{\{k'\}} \frac{2}{N_k} \sum_{\{\xi\}} \sin[(k-k')\xi] \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] f(\chi, k') \tag{3.88}
\end{aligned}$$

これから、 $V(\chi, k-k')$ の離散化された式は次式のように表すことができる。

$$V(\chi, k-k') = \frac{2}{N_k} \sum_{\{\xi\}} \sin[(k-k')\xi] \left[v(\chi + \frac{\xi}{2}) - v(\chi - \frac{\xi}{2}) \right] \tag{3.89}$$

以上より、Liouville 方程式(3.21)は次のように、波数 k' の和の形で表すことができる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\chi, k)}{\partial t} = & \hbar \sum_{\{k'\}} M_1(\chi, k-k') \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} - \hbar \sum_{\{k'\}} M_2(\chi, k-k') k' f(\chi, k') \\
& + \hbar \sum_{\{k'\}} M_3(\chi, k-k') \left[\frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} - 4k'^2 f(\chi, k') \right] - \hbar \sum_{\{k'\}} M_4(\chi, k-k') k' \frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \\
& - \frac{1}{\hbar} \sum_{\{k'\}} V(\chi, k-k') f(\chi, k') \tag{3.90}
\end{aligned}$$

但し、 $M_1(\chi, k - k')$ 、 $M_2(\chi, k - k')$ 、 $M_3(\chi, k - k')$ および $V(\chi, k - k')$ は、それぞれ、式 (3.80)、(3.81)、(3.85)、(3.86) および (3.89) で与えられる。

次に、ウィグナー関数の位置 χ に関する微分項の離散化について考える。一階微分は、 $k' < 0$ で前進差分、 $k' > 0$ で後進差分をとり、次式のように与えることにする。

$$\frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} = \begin{cases} \frac{f(\chi + \Delta_x, k') - f(\chi, k')}{\Delta_x}, & k' < 0 \\ \frac{f(\chi, k') - f(\chi - \Delta_x, k')}{\Delta_x}, & k' > 0 \end{cases} \quad (3.91)$$

これは、デバイス両端で境界条件との接続を良くするためである。また、二階微分は次式のように与える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(\chi, k')}{\partial \chi^2} &= \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\partial f(\chi, k')}{\partial \chi} \right) = \frac{\frac{\partial f(\chi + \frac{\Delta_x}{2}, k')}{\partial \chi} - \frac{\partial f(\chi - \frac{\Delta_x}{2}, k')}{\partial \chi}}{\partial \chi} \\ &= \frac{f(\chi + \Delta_x, k') - f(\chi, k') - [f(\chi, k') - f(\chi - \Delta_x, k')]}{\Delta_x^2} \\ &= \frac{f(\chi + \Delta_x, k') - 2f(\chi, k') + f(\chi - \Delta_x, k')}{\Delta_x^2} \end{aligned} \quad (3.92)$$

これらを式 (3.90) に代入すると、離散化した Liouville 方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\chi, k)}{\partial t} &= \hbar \sum_{\{k'\}} M_1(\chi, k - k') \frac{1}{\Delta_x} \begin{cases} f(\chi + \Delta_x, k') - f(\chi, k') & , k' < 0 \\ f(\chi, k') - f(\chi - \Delta_x, k') & , k' > 0 \end{cases} \\ &\quad - \hbar \sum_{\{k'\}} M_2(\chi, k - k') k' f(\chi, k') \\ &+ \hbar \sum_{\{k'\}} M_3(\chi, k - k') \frac{1}{\Delta_x^2} [f(\chi + \Delta_x, k') - 2f(\chi, k') + f(\chi - \Delta_x, k') - 4\Delta_x^2 k'^2 f(\chi, k')] \\ &- \hbar \sum_{\{k'\}} M_4(\chi, k - k') k' \frac{1}{\Delta_x} \begin{cases} f(\chi + \Delta_x, k') - f(\chi, k') & , k' < 0 \\ f(\chi, k') - f(\chi - \Delta_x, k') & , k' > 0 \end{cases} \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \sum_{\{k'\}} V(\chi, k - k') f(\chi, k') \\ &\equiv \mathcal{L}f(\chi, k) \end{aligned} \quad (3.93)$$

ここで、離散化された位置座標 χ および波数 k の要素を、それぞれ次のように表すことにする。

$$\left. \begin{aligned} \chi_n &= n\Delta_x & (n = 1, 2, \dots, N_\chi) \\ k_m &= -\frac{\pi}{2\Delta_x} + \frac{\pi}{\Delta_x N_k} \left(m - \frac{1}{2} \right) & (m = 1, 2, \dots, N_k) \\ k_{m'} &= -\frac{\pi}{2\Delta_x} + \frac{\pi}{\Delta_x N_k} \left(m' - \frac{1}{2} \right) & (m' = 1, 2, \dots, N_k) \end{aligned} \right\} \quad (3.94)$$

この時、式 (3.93) は次のように書くことができる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(n, m)}{\partial t} &= \frac{\hbar}{\Delta_x} \sum_{\{m'\}} M_1(n, m - m') \left\{ \begin{array}{l} f(n+1, m') - f(n, m') \quad , 1 \leq m' \leq N_k/2 \\ f(n, m') - f(n-1, m') \quad , N_k/2 + 1 \leq m' \leq N_k \end{array} \right\} \\
&\quad - \hbar \sum_{\{m'\}} M_2(n, m - m') k_{m'} f(n, m') \\
&+ \frac{\hbar}{\Delta_x^2} \sum_{\{m'\}} M_3(n, m - m') [f(n+1, m') - 2f(n, m') + f(n-1, m') - 4\Delta_x^2 k_{m'}^2 f(n, m')] \\
&- \frac{\hbar}{\Delta_x} \sum_{\{m'\}} M_4(n, m - m') k_{m'} \left\{ \begin{array}{l} f(n+1, m') - f(n, m') \quad , 1 \leq m' \leq N_k/2 \\ f(n, m') - f(n-1, m') \quad , N_k/2 + 1 \leq m' \leq N_k \end{array} \right\} \\
&\quad - \frac{1}{\hbar} \sum_{\{m'\}} V(n, m - m') f(n, m') \quad (3.95)
\end{aligned}$$

但し、上式において

$$f(\chi_n, k_m) = f(n, m) \quad , \quad M_1(\chi_n, k_m - k_{m'}) = M_1(n, m - m') \quad , \quad \dots \quad (3.96)$$

と表している。定常状態 ($\partial f / \partial t = 0$) では、式 (3.95) は

$$\sum_{\{m'\}} A(n, m, m') f(n-1, m') + \sum_{\{m'\}} B(n, m, m') f(n, m') + \sum_{\{m'\}} C(n, m, m') f(n+1, m') = FS(n, m) \quad (3.97)$$

となる。この時の $A(n, m, m')$ 、 $B(n, m, m')$ 、 $C(n, m, m')$ および $FS(n, m)$ の行列要素は、それぞれ、次のように表される。

$A(n, m, m')$

$$= \begin{cases} \frac{\hbar}{\Delta_x^2} M_3(n, m - m') & , 1 \leq m' \leq \frac{N_k}{2} \\ \frac{\hbar}{\Delta_x^2} M_3(n, m - m') - \frac{\hbar}{\Delta_x} [M_1(n, m - m') - k_{m'} M_4(n, m - m')] & , \frac{N_k}{2} + 1 \leq m' \leq N_k \end{cases} \quad (3.98)$$

$B(n, m, m')$

$$= \begin{cases} \left. \begin{array}{l} -\frac{\hbar}{\Delta_x} [M_1(n, m - m') - k_{m'} M_4(n, m - m')] - \hbar k_{m'} M_2(n, m - m') \\ -\frac{2\hbar(1 + 2\Delta_x^2 k_{m'}^2)}{\Delta_x^2} M_3(n, m - m') - \frac{V(n, m - m')}{\hbar} \end{array} \right\} & , 1 \leq m' \leq \frac{N_k}{2} \\ \left. \begin{array}{l} \frac{\hbar}{\Delta_x} [M_1(n, m - m') - k_{m'} M_4(n, m - m')] - \hbar k_{m'} M_2(n, m - m') \\ -\frac{2\hbar(1 + 2\Delta_x^2 k_{m'}^2)}{\Delta_x^2} M_3(n, m - m') - \frac{V(n, m - m')}{\hbar} \end{array} \right\} & , \frac{N_k}{2} + 1 \leq m' \leq N_k \end{cases} \quad (3.99)$$

$C(n, m, m')$

$$= \begin{cases} \frac{\hbar}{\Delta_x^2} M_3(n, m - m') - \frac{\hbar}{\Delta_x} [M_1(n, m - m') - k_{m'} M_4(n, m - m')] & , 1 \leq m' \leq \frac{N_k}{2} \\ \frac{\hbar}{\Delta_x^2} M_3(n, m - m') & , \frac{N_k}{2} + 1 \leq m' \leq N_k \end{cases} \quad (3.100)$$

$$FS(n, m) = \begin{cases} - \sum_{m'} A(1, m, m') f_l(m') & , n = 1 \\ - \sum_{m'} C(N_x + 1, m, m') f_r(m') & , n = N_x \\ 0 & , 2 \leq n \leq N_x - 1 \end{cases} \quad (3.101)$$

但し

$$M_1(n, m - m') = \frac{1}{2N_k} \sum_{\{i\}} \sin[(m - m')\Delta_k \cdot 2i\Delta_x] \\ \times \frac{1}{\Delta_x} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{m^-(n, i)} - \frac{1}{m^-(n-1, i)} \\ \frac{1}{m^-(n+1, i)} - \frac{1}{m^-(n, i)} \end{array} \right. , 1 \leq m' \leq \frac{N_k}{2} \\ \left. , \frac{N_k}{2} + 1 \leq m' \leq N_k \right\} \quad (3.102)$$

$$M_2(n, m - m') = \frac{1}{N_k} \sum_{\{i\}} \cos[(m - m')\Delta_k \cdot 2i\Delta_x] \\ \times \frac{1}{\Delta_x} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{m^+(n, i)} - \frac{1}{m^+(n-1, i)} \\ \frac{1}{m^+(n+1, i)} - \frac{1}{m^+(n, i)} \end{array} \right. , 1 \leq m' \leq \frac{N_k}{2} \\ \left. , \frac{N_k}{2} + 1 \leq m' \leq N_k \right\} \quad (3.103)$$

$$M_3(n, m - m') = \frac{1}{4N_k} \sum_{\{i\}} \frac{\sin[(m - m')\Delta_k \cdot 2i\Delta_x]}{m^-(n, i)} \quad (3.104)$$

$$M_4(n, m - m') = \frac{1}{N_k} \sum_{\{i\}} \frac{\cos[(m - m')\Delta_k \cdot 2i\Delta_x]}{m^+(n, i)} \quad (3.105)$$

$$V(n, m - m') = \frac{2}{N_k} \sum_{\{i\}} \sin[(m - m')\Delta_k \cdot 2i\Delta_x] [v(n+i) - v(n-i)] \quad (3.106)$$

$$\frac{1}{m^-(n, i)} = \frac{1}{m^*(n+i)} - \frac{1}{m^*(n-i)} \quad , \quad \frac{1}{m^+(n, i)} = \frac{1}{m^*(n+i)} + \frac{1}{m^*(n-i)} \quad (3.107)$$

である。また、式(3.101)の $f_l(m')$ と $f_r(m')$ は、境界条件で用いられる関数(3.72)である。式(3.97)を解く際には、ブロック三対角行列方程式の形にすることにより、計算機のメモリを節約することができる[28]。

散乱項(3.69)は、式(3.99)の行列要素 $B(n, m, m')$ に、次式で表される行列 $S(n)$ を加えるこ

とで取り入れることができる。

$$\begin{aligned}
S(n) &= \begin{bmatrix} \frac{1-\Delta_k f_{eq}(n,1)}{\tau} & -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,1)}{\tau} & \dots & -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,1)}{\tau} \\ -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,2)}{\tau} & \frac{1-\Delta_k f_{eq}(n,2)}{\tau} & \dots & -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,2)}{\tau} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,N_k)}{\tau} & -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,N_k)}{\tau} & \dots & \frac{1-\Delta_k f_{eq}(n,N_k)}{\tau} \end{bmatrix} \\
&= \begin{cases} 1 - \frac{\Delta_k f_{eq}(n,m)}{\tau} & (m = m', \quad m, m' = 1, 2, \dots, N_k) \\ -\frac{\Delta_k f_{eq}(n,m)}{\tau} & (m \neq m', \quad m, m' = 1, 2, \dots, N_k) \end{cases} \quad (3.108)
\end{aligned}$$

次に、キャリア密度と電流密度の離散化を行う。式(3.39)より、離散化されたキャリア密度を次式で与えることにする。

$$n(\chi) = \frac{\Delta_k}{2\pi} \sum_k f(\chi, k) \quad (3.109)$$

さらに、離散化された電流密度の表現を得るために、離散化された Liouville 方程式(3.93)の両辺を波数 k について和をとる。右辺の $M_1(\chi, k - k')$ 、 $M_3(\chi, k - k')$ および $V(\chi, k - k')$ は、 $\sin[(k - k')\xi]$ の項を含むので零となる。従って、残りの項より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \Delta_k f(\chi, k) &= -\hbar \sum_{k'} \sum_k \Delta_k M_2(\chi, k - k') k' f(\chi, k') \\
&\quad - \hbar \sum_{k'} \sum_k \Delta_k \frac{M_4(\chi, k - k') k'}{\Delta_x} \begin{cases} f(\chi + \Delta_x, k') - f(\chi, k') & , k' < 0 \\ f(\chi, k') - f(\chi - \Delta_x, k') & , k' > 0 \end{cases} \quad (3.110)
\end{aligned}$$

となるのが分かる。上式の右辺第一項について、まず考える。式(3.81)を用いると、 $M_2(\chi, k - k')$ の和は次のようになる。

$$\sum_k \Delta_k M_2(\chi, k - k') = \frac{\Delta_k}{N_k \Delta_x} \sum_{\{\xi\}} \sum_{\{k\}} \cos[(k - k')\xi] \begin{cases} \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi - \Delta_x, \xi)} & , k' < 0 \\ \frac{1}{m^+(\chi + \Delta_x, \xi)} - \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} & , k' > 0 \end{cases} \quad (3.111)$$

ここで、 $\xi \neq 0$ の時は、 $\sum_{\{k\}} \cos[(k - k')\xi] = 0$ となるので、上式は $\xi = 0$ の時のみ値を持つ。従って、次のように変形することができる。

$$\begin{aligned}
\sum_k \Delta_k M_2(\chi, k - k') &= \frac{\Delta_k}{2N_k \Delta_x} \sum_{\{k\}} 1 \begin{cases} \frac{1}{m^+(\chi, 0)} - \frac{1}{m^+(\chi - \Delta_x, 0)} & , k' < 0 \\ \frac{1}{m^+(\chi + \Delta_x, 0)} - \frac{1}{m^+(\chi, 0)} & , k' > 0 \end{cases} \\
&= \frac{\Delta_k}{2N_k \Delta_x} N_k \begin{cases} \frac{2}{m^*(\chi)} - \frac{2}{m^*(\chi - \Delta_x)} & , k' < 0 \\ \frac{2}{m^*(\chi + \Delta_x)} - \frac{2}{m^*(\chi)} & , k' > 0 \end{cases} \\
&= \frac{\Delta_k}{\Delta_x} \begin{cases} \frac{1}{m^*(\chi)} - \frac{1}{m^*(\chi - \Delta_x)} & , k' < 0 \\ \frac{1}{m^*(\chi + \Delta_x)} - \frac{1}{m^*(\chi)} & , k' > 0 \end{cases} \quad (3.112)
\end{aligned}$$

右辺第二項については、式(3.86)を用いると同様に

$$\begin{aligned}\sum_k \Delta_k M_4(\chi, k - k') &= \frac{\Delta_k}{N_k} \sum_{\{\xi\}} \sum_{\{k\}} \cos[(k - k')\xi] \frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \\ &= \frac{\Delta_k}{2N_k} \sum_{\{k\}} 1 \cdot \frac{1}{m^+(\chi, 0)} = \frac{\Delta_k}{2N_k} N_k \frac{2}{m^*(\chi)} = \frac{\Delta_k}{m^*(\chi)}\end{aligned}\quad (3.113)$$

と変形できる。以上の二式を式(3.109)に代入すると

$$\begin{aligned}2\pi \frac{\partial n(\chi)}{\partial t} &= -\frac{1}{\Delta_x} \left[\hbar \Delta_x \sum_{\{k'\}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{m^*(\chi)} - \frac{1}{m^*(\chi - \Delta_x)} \quad , k' < 0 \\ \frac{1}{m^*(\chi + \Delta_x)} - \frac{1}{m^*(\chi)} \quad , k' > 0 \end{array} \right\} k' f(\chi, k') \right. \\ &\quad \left. + \hbar \Delta_k \sum_{\{k'\}} \frac{k'}{m^*(\chi)} \left\{ \begin{array}{l} f(\chi + \Delta_x, k') - f(\chi, k') \quad , k' < 0 \\ f(\chi, k') - f(\chi - \Delta_x, k') \quad , k' > 0 \end{array} \right\} \right] \\ &= -\frac{1}{\Delta_x} \left\{ \Delta_k \sum_{k' < 0} \left[\frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} f(\chi, k') - \frac{\hbar k'}{m^*(\chi - \Delta_x)} f(\chi, k') \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} f(\chi + \Delta_x, k') - \frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} f(\chi, k') \right] \right. \\ &\quad \left. + \Delta_k \sum_{k' > 0} \left[\frac{\hbar k'}{m^*(\chi + \Delta_x)} f(\chi, k') - \frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} f(\chi, k') \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} f(\chi, k') - \frac{\hbar k'}{m^*(\chi)} f(\chi - \Delta_x, k') \right] \right\}\end{aligned}\quad (3.114)$$

となる。上式の両辺を 2π で割ると次の離散化された電流連続の式が得られる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial n(\chi)}{\partial t} &= -\frac{1}{\Delta_x} \left\{ \frac{\Delta_k}{2\pi} \left[\sum_{k < 0} \frac{\hbar k}{m^*(\chi)} f(\chi + \Delta_x, k) + \sum_{k > 0} \frac{\hbar k}{m^*(\chi + \Delta_x)} f(\chi, k) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{k < 0} \frac{\hbar k}{m^*(\chi - \Delta_x)} f(\chi, k) - \sum_{k > 0} \frac{\hbar k}{m^*(\chi)} f(\chi - \Delta_x, k) \right] \right\} \\ &= -\frac{1}{e} \frac{j\left(\chi + \frac{\Delta_x}{2}\right) - j\left(\chi - \frac{\Delta_x}{2}\right)}{\Delta_x}\end{aligned}\quad (3.115)$$

上式より、離散化された電流密度の式は、次式で表されることが分かる。

$$j\left(\chi + \frac{\Delta_x}{2}\right) = e \frac{\Delta_k}{2\pi} \left[\sum_{k < 0} \frac{\hbar k}{m^*(\chi)} f(\chi + \Delta_x, k) + \sum_{k > 0} \frac{\hbar k}{m^*(\chi + \Delta_x)} f(\chi, k) \right]\quad (3.116)$$

式(3.115)より、この電流密度の離散化式を用いると、定常状態では電流密度が位置に依らず一定になることが分かる。

デバイスの過渡応答を計算する場合には、ウィグナー関数の時間微分をCrank-Nicolsonの方法を用いて、旧時刻 t と新時刻 $t + \Delta_t$ の関数値を相加平均して次式のように表す。

$$\frac{\partial f(\chi, k)}{\partial t} \simeq \frac{f(\chi, k, t + \Delta_t) - f(\chi, k, t)}{\Delta_t}$$

$$= \frac{\mathcal{L}_{t+\Delta_t} f(\chi, k, t + \Delta_t) + \mathcal{L}_t f(\chi, k, t)}{2} \quad (3.117)$$

但し、 \mathcal{L} は式(3.93)で定義した演算子である。左辺に新時刻 $t + \Delta_t$ の関数を、右辺に旧時刻 t の関数を集めて書くと

$$\frac{1}{2}\mathcal{L}_{t+\Delta_t} f(\chi, k, t + \Delta_t) - \frac{1}{\Delta_t} f(\chi, k, t + \Delta_t) = -\frac{1}{2}\mathcal{L}_t f(\chi, k, t) - \frac{1}{\Delta_t} f(\chi, k, t) \quad (3.118)$$

となる。この時、離散化された Liouville 方程式(3.97)は、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2}A(n, t + \Delta_t), \frac{1}{2}B(n, t + \Delta_t) - T(n), \frac{1}{2}C(n, t + \Delta_t) \right] \begin{bmatrix} f(n-1, t + \Delta_t) \\ f(n, t + \Delta_t) \\ f(n+1, t + \Delta_t) \end{bmatrix} - \frac{1}{2}FS(n, t + \Delta_t) \\ & = \left[-\frac{1}{2}A(n, t), -\frac{1}{2}B(n, t) - T(n), -\frac{1}{2}C(n, t) \right] \begin{bmatrix} f(n-1, t) \\ f(n, t) \\ f(n+1, t) \end{bmatrix} + \frac{1}{2}FS(n, t) \end{aligned}$$

但し、上式では、記号を簡単にするために、波数の指標 m, m' を省略している。従って、新時刻の解 $f(n, t + \Delta_t)$ は、次式のように旧時刻での解 $f(n, t)$ を用いて順次求めていくことができる。

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2}A(n, t + \Delta_t), \frac{1}{2}B(n, t + \Delta_t) - T(n), \frac{1}{2}C(n, t + \Delta_t) \right] \begin{bmatrix} f(n-1, t + \Delta_t) \\ f(n, t + \Delta_t) \\ f(n+1, t + \Delta_t) \end{bmatrix} \\ & = \left[-\frac{1}{2}A(n, t), -\frac{1}{2}B(n, t) - T(n), -\frac{1}{2}C(n, t) \right] \begin{bmatrix} f(n-1, t) \\ f(n, t) \\ f(n+1, t) \end{bmatrix} + \frac{1}{2}[FS(n, t) + FS(n, t + \Delta_t)] \end{aligned} \quad (3.119)$$

但し、行列 $T(n)$ は次式で与えられる。

$$T(n) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta_t} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Delta_t} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{1}{\Delta_t} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{1}{\Delta_t} \end{bmatrix} = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_t} & , (m = m', \quad m, m' = 1, 2, \dots, N_k) \\ 0 & , (m \neq m', \quad m, m' = 1, 2, \dots, N_k) \end{cases} \quad (3.120)$$

一方、ポアソン方程式に対しても同様に有限差分法を用いて離散化を行い、ブロック三対角方程式

の形にして計算を実行する。まず、ポアソン方程式 (3.41) を離散化すると次のようになる。

$$\frac{\epsilon\left(\chi + \frac{1}{2}\Delta_x\right) \frac{\psi(\chi + \Delta_x) - \psi(\chi)}{\Delta_x} - \epsilon\left(\chi - \frac{1}{2}\Delta_x\right) \frac{\psi(\chi) - \psi(\chi - \Delta_x)}{\Delta_x}}{\Delta_x} = -e[\Gamma(\chi) + p(\chi) - n(\chi)] \quad (3.121)$$

上式を整理すると

$$\eta_1(n)\psi(n-1) + \eta_2(n)\psi(n) + \eta_3(n)\psi(n+1) = R(n) \quad (3.122)$$

となる。但し

$$\begin{aligned} \eta_1(n) &= \frac{\epsilon\left(\chi - \frac{1}{2}\Delta_x\right)}{\Delta_x^2} \\ \eta_2(n) &= -\frac{\epsilon\left(\chi - \frac{1}{2}\Delta_x\right) + \epsilon\left(\chi + \frac{1}{2}\Delta_x\right)}{\Delta_x^2} \quad (n = 2, 3, \dots, N_x - 1) \\ \eta_3(n) &= \frac{\epsilon\left(\chi + \frac{1}{2}\Delta_x\right)}{\Delta_x^2} \\ R(n) &= -e[\Gamma(\chi) + p(\chi) - n(\chi)] \end{aligned} \quad (3.123)$$

と置いた。ここでは、ポテンシャル ψ を微小量 $\delta\psi$ だけ変化させて式 (3.122) を解き、得られた解が一定の値に収束するまで計算を繰り返して行うという方法を用いる。そこで、式 (3.122) において $\psi \rightarrow \psi + \delta\psi$ とすると

$$\begin{aligned} &\eta_1(n)[\psi(n-1) + \delta\psi(n-1)] + \eta_2(n)[\psi(n) + \delta\psi(n)] + \eta_3(n)[\psi(n+1) + \delta\psi(n+1)] \\ &= -e\left[\Gamma(n) + p_i(n)e^{e(\psi_p - \psi)/k_B T} e^{-e\delta\psi/k_B T} - n_i(n)e^{e(\psi - \psi_n)/k_B T} e^{e\delta\psi/k_B T}\right] \end{aligned} \quad (3.124)$$

となる。ここで、次の関係を用いた。

$$n = n_i e^{e(\psi - \psi_n)/k_B T}, \quad p = p_i e^{e(\psi_p - \psi)/k_B T} \quad (3.125)$$

式 (3.124) の右辺に現れる $e^{\pm e\delta\psi/k_B T}$ を展開して $\delta\psi$ の二次以上の項を無視すると、それぞれ

$$\begin{aligned} p_i(n)e^{e(\psi_p - \psi)/k_B T} e^{-e\delta\psi/k_B T} &\simeq p_i(n)e^{e(\psi_p - \psi)/k_B T} \left(1 - \frac{\delta\psi}{k_B T}\right) \\ &= p(n) - \frac{e}{k_B T} p(n) \cdot \delta\psi(n) \\ n_i(n)e^{e(\psi - \psi_n)/k_B T} e^{e\delta\psi/k_B T} &\simeq n_i(n)e^{e(\psi - \psi_n)/k_B T} \left(1 + \frac{\delta\psi}{k_B T}\right) \\ &= n(n) + \frac{e}{k_B T} n(n) \cdot \delta\psi(n) \end{aligned} \quad (3.126)$$

となり、これらを用いて式 (3.124) を書き直すと次式が得られる。

$$\eta_1(n)\delta\psi(n-1) + \left[\eta_2(n) - \frac{e^2 n(n)}{k_B T}\right] \delta\psi(n) + \eta_3(n)\delta\psi(n+1) = R'(n) \quad (3.127)$$

但し

$$R'(n) = -e[\Gamma(n) + p(n) - n(n)] - \eta_1(n)\psi(n-1) - \eta_2(n)\psi(n) - \eta_3(n)\psi(n+1) \quad (3.128)$$

と置いた。さらに $\delta\psi(n)$ の係数を

$$\eta_{D2}(n) = \eta_2(n) - \frac{e^2}{k_B T} n(n) \quad (3.129)$$

と置くと、式(3.127)は次のように表すことができる。

$$\eta_1(n)\delta\psi(n-1) + \eta_{D2}(n)\delta\psi(n) + \eta_3(n)\delta\psi(n+1) = R'(n) \quad (3.130)$$

上式を行列表示すると次のようになる。

$$\begin{bmatrix} \eta_{D2}(2) & \eta_3(2) & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \eta_1(3) & \eta_{D2}(3) & \eta_3(3) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & \eta_1(N_x-2) & \eta_{D2}(N_x-2) & \eta_3(N_x-2) \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \eta_1(N_x-1) & \eta_{D2}(N_x-2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\psi(2) \\ \delta\psi(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta\psi(N_x-2) \\ \delta\psi(N_x-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R'(2) - \eta_1(2)\delta\psi(1) \\ R'(3) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ R'(N_x-2) \\ R'(N_x-1) - \eta_3(N_x-1)\delta\psi(N_x) \end{bmatrix} \quad (3.131)$$

ここでは、計算量を考えて式(3.131)の逆行列を計算し直接 $\delta\psi(n)$ を求めることをしないで、以下のような解き方をする。まず、式(3.131)の各要素を書くと次のようになる。

$$\begin{aligned} \eta_{D2}(2)\delta\psi(2) + \eta_3(2)\delta\psi(3) &= R''(2) \\ \eta_1(3)\delta\psi(2) + \eta_{D2}(3)\delta\psi(3) + \eta_3(3)\delta\psi(4) &= R'(3) \\ &\vdots \\ \eta_1(n)\delta\psi(n-1) + \eta_{D2}(n)\delta\psi(n) + \eta_3(n)\delta\psi(n+1) &= R'(n) \\ &\vdots \\ \eta_1(N_x-2)\delta\psi(N_x-3) + \eta_{D2}(N_x-2)\delta\psi(N_x-2) + \eta_3(N_x-2)\delta\psi(N_x-1) &= R'(N_x-2) \\ \eta_1(N_x-1)\delta\psi(N_x-2) + \eta_{D2}(N_x-1)\delta\psi(N_x-1) &= R''(N_x-1) \end{aligned} \quad (3.132)$$

但し

$$\begin{aligned} R''(2) &= R'(2) - \eta_1(2)\delta\psi(1) \\ R''(N_x - 1) &= R'(N_x - 1) - \eta_3(N_x - 1)\delta\psi(N_x) \end{aligned} \quad (3.133)$$

と置いた。今、 $n = 2, 3, \dots, N_x - 2$ の場合に、式 (3.132) の各式が次式のように、 $\delta\psi(n-1)$ と $\delta\psi(n)$ で表すことができるとする。

$$A(n)\delta\psi(n-1) + B(n)\delta\psi(n) = C(n) \quad (3.134)$$

上式を変形して

$$\delta\psi(n) = \frac{C(n) - A(n)\delta\psi(n-1)}{B(n)} \quad (3.135)$$

とした式において、 $n \rightarrow n+1$ とすると

$$\delta\psi(n+1) = \frac{C(n+1) - A(n+1)\delta\psi(n)}{B(n+1)} \quad (3.136)$$

とる。これを式 (3.130) に代入すると

$$\eta_1(n)\delta\psi(n-1) + \eta_{p2}(n)\delta\psi(n) = R'_p(n) \quad (3.137)$$

が得られる。但し

$$\eta_{p2}(n) = \eta_{D2}(n) - \frac{\eta_3(n)A(n+1)}{B(n+1)} \quad (3.138)$$

$$R'_p(n) = R'(n) - \frac{\eta_3(n)C(n+1)}{B(n+1)} \quad (3.139)$$

と置いた。一方、 $n = N_x - 1$ の時には、式 (3.132) から、そのまま、式 (3.137) の形になっているのが分かる。この場合、 $\eta_{p2}(N_x - 1)$ と $R'_p(N_x - 1)$ は、それぞれ、次のようになる。

$$\begin{aligned} \eta_{p2}(N_x - 1) &= \eta_{D2}(N_x - 1) \\ R'_p(N_x - 1) &= R''(N_x - 1) \end{aligned} \quad (3.140)$$

以上より、解くべき方程式は次式のようなになる。

$$\begin{aligned} \eta_{p2}(2)\delta\psi(2) &= R'_p(2) \\ \eta_1(3)\delta\psi(2) + \eta_{p2}(3)\delta\psi(3) &= R'_p(3) \\ &\vdots \\ \eta_1(N_x - 1)\delta\psi(N_x - 2) + \eta_{p2}(N_x - 1)\delta\psi(N_x - 1) &= R'_p(N_x - 1) \end{aligned} \quad (3.141)$$

ここで、 $\eta_{p2}(n)$ および $R'_p(n)$ は、それぞれ次式で表される。

$$\eta_{p2}(n) = \begin{cases} \eta_{D2}(n) - \frac{\eta_3(n)A(n+1)}{B(n+1)}, & n = 2, 3, \dots, N_x - 2 \\ \eta_{D2}(n), & n = N_x - 1 \end{cases} \quad (3.142)$$

$$R'_p(n) = \begin{cases} R'(n) - \frac{\eta_3(n)C(n+1)}{B(n+1)}, & n = 2, 3, \dots, N_x - 2 \\ R''(n), & n = N_x - 1 \end{cases} \quad (3.143)$$

さらに、式 (3.141) を解くために次の量を考えることにする。

$$W_s(n) = \eta_{p2}(n)\delta\psi(n) \quad (3.144)$$

まず、 $n = 2$ の場合は明らかに $W_s(2) = R_p(2)$ が成り立つ。次に、 $n = 3, 4, \dots, N_x - 1$ の場合は、式 (3.141) の一般式を、この $W_s(n)$ を用いて表すと

$$\eta_1(n)\delta\psi(n-1) + W_s(n) = R_p(n) \quad (3.145)$$

と書ける。式 (3.144) で $n = n - 1$ として変形すると

$$\delta\psi(n-1) = \frac{W_s(n-1)}{\eta_{p2}(n-1)} \quad (3.146)$$

とできるので、これを式 (3.145) に代入すると

$$W_s(n) = R_p(n) - \frac{\eta_1(n)W_s(n-1)}{\eta_{p2}(n-1)} \quad (3.147)$$

が得られる。従って

$$W_s(n) = \begin{cases} R_p(n) - \frac{\eta_1(n)W_s(n-1)}{\eta_{p2}(n-1)}, & n = 3, 4, \dots, N_x - 1 \\ R_p(n), & n = 2 \end{cases} \quad (3.148)$$

と置くと、式 (3.141) の解 $\delta\psi(n)$ は、次式から求めることができる。

$$\delta\psi(n) = \frac{W_s(n)}{\eta_{p2}(n)} \quad (n = 2, 3, \dots, N_x - 3) \quad (3.149)$$

上式から得られる $\delta\psi$ がある範囲内に収まるまで計算を繰り返して行い、ポテンシャル ψ を決定する。

3.2 二重障壁構造共鳴トンネルダイオードの電子伝導

3.1節で定式化された新しいウィグナー関数モデルを二重障壁構造共鳴トンネルダイオードに適用し、モデルの妥当性を確かめるとともに、共鳴トンネルダイオードの様々な静的および動的特性について検討する。

3.2.1 二重障壁構造における共鳴トンネル効果

図3.2(a)に示すように、非常に薄い二つのトンネル障壁と一つの量子井戸から成る構造を考える。量子井戸層は、 $\sim 5\text{nm}$ と薄いために量子準位が形成されている。この二重障壁構造に電極から電子波を入射した場合、その量子準位と一致したエネルギーを持つ電子波はトンネル効果によって反対側の電極へ通り抜けることができる。障壁層($\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$)を 2.8nm 、井戸層(GaAs)を 4.5nm とした構造で、バイアスを加えていない場合の透過確率を、第2章2.3節で述べた方法で計算した結果を図3.2(b)に示す。現実のデバイスでは、量子準位が有限の幅をもつために透過することができる電子のエネルギーも図のように広がるようになる。このように、量子準位と一致するエネルギーの所で透過確率が共鳴的に増大する現象を共鳴トンネル効果と呼んでいる。また、井戸内の量子準位の位置は、電極に加える電圧によって変化させることができる。図3.3(a)のように、印加電圧を増加させて井戸内の量子準位を左側電極のFermi準位と一致するようすると、共鳴トンネル効果によって電流は共鳴的に大きく流れるようになる。しかし、さらに電圧が増加して図3.3(b)の状態になると、量子準位が左側電極の伝導帯の底よりも下に位置するようになるために、電子波のトンネリングが起こらなくなり、電流は減少するようになる。さらに大きな電圧を加えると、トンネル障壁を熱的に飛び越えて流れる電子が多くなるため、再び電流が増加するようになる。従って、共鳴トンネルダイオードの電流・電圧特性には、図3.3(c)のように負性抵抗部分が現れることになる。

最近の半導体結晶成長技術の進歩によって、障壁層や量子井戸層の厚さをほぼ設計通りに作製す

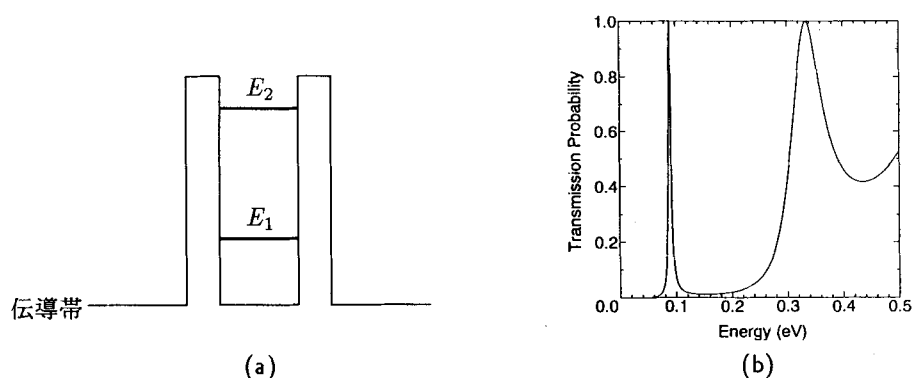


図3.2: 共鳴トンネル効果 (a) 二重障壁構造のエネルギー分布 (b) 透過確率

ることが可能となり、室温においても優れた特性を持つ共鳴トンネルダイオードが実現されるようになってきた。電流・電圧特性における電流のピークとバレーの比である PV 比は 40 以上の値が得られている [29]。また、 $\sim 700\text{GHz}$ での発振 [30] や 2.5THz という高い周波数でのミリ波検出 [31] 等が報告されており、デバイスへの応用においても大きな期待がもたれている。

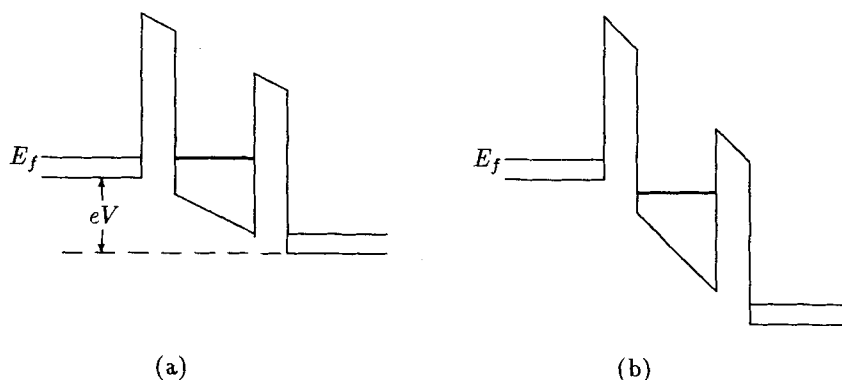
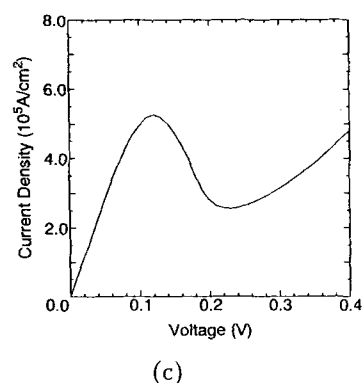


図3.3: 電圧印加時の共鳴トンネルダイオード.
(a) 共鳴時および (b) 非共鳴時の伝導帯エネルギー分布と (c) 電流・電圧特性.



3.2.2 電流・電圧特性

新しいウィグナー関数モデルの妥当性を確かめるために、図3.4に示す二重障壁構造共鳴トンネルダイオード (RTD) をシミュレーションモデルとしてその静特性を計算する。二重障壁構造部は、 4.5nm の GaAs 量子井戸層と 2.8nm の $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 障壁層から成るとする。デバイスの両側には 17.5nm の GaAs 電極が接続されている。電極の外部には、電子が熱平衡分布状態をとる reservoir を仮定する。伝導帯不連続値は 0.27eV を与える。計算を行う際の分割数は、それぞれ $N_x = 81$ 、 $N_k = 60$ 、 $N_t = 30$ とし、分割幅には GaAs の単原子層間隔と同じ値 $\Delta_x = 5.65\text{\AA}$ を与えた。電子の有効質量は、GaAs 層で $0.067m_0$ 、AlGaAs 層で $0.092m_0$ とした。GaAs 電極のドーピング密度は $2 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ を与え、井戸および障壁層はアンドープと仮定する。比誘電率は GaAs 層で 12.9、AlGaAs 層で 12.03

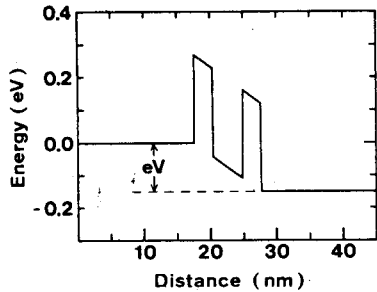


図 3.4: 二重障壁構造共鳴トンネルダイオードのシミュレーションモデル

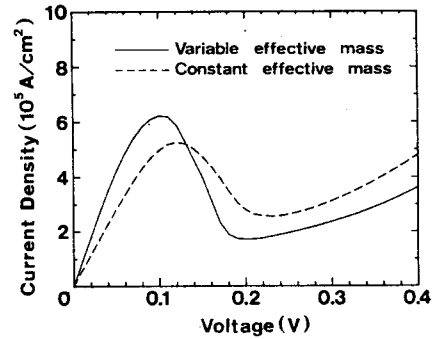


図 3.5: 電流・電圧特性の比較

とする。また、散乱は無視し、計算は全て室温 (300K) で行った。このモデルの構造は、Frensley が従来のウィグナー関数モデルで計算したもの [8] と同じであり、新しいウィグナー関数モデルとの比較のためにこの構造を用いることにする。

まず、位置によって変化する有効質量の影響を調べるために、RTD の電流・電圧特性を定常状態の離散化 Liouville 方程式を用いて計算する。電圧を図 3.4 のように井戸層と障壁層に均一にかかる (フラットバンドモデル) として計算した結果を、図 3.5 の実線で示す。破線は、デバイスの全領域で有効質量を一定 ($0.067m_0$) とした場合の結果であり、従来のウィグナー関数モデルによる結果を表している。この図から、新しいウィグナー関数モデルでは、共鳴がより低い電圧で起こることと電流の PV 比が約 1.8 倍大きくなることが分かる。この結果は、有効質量の位置変化が量子構造デバイスの輸送特性において重要な役割を果たすことを示している。特に、従来のウィグナー関数モデルで計算される PV 比は、実験で得られる値よりも小さくなることが問題となっていたが [8]、有効質量の位置依存性を考慮していなかったことがその原因であることが明かとなった。ウィグナー関数モデルと実験結果との比較は、後で詳しく行うことにする。

次に、空間電荷効果を調べるために、離散化された Liouville 方程式とポアソン方程式を自己無撞着に解いた結果を図 3.6 に示す。実線が自己無撞着計算の結果を、一点鎖線がフラットバンドモデル

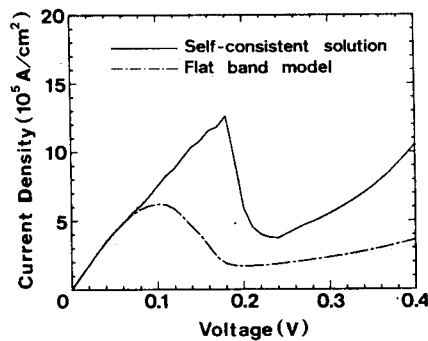


図 3.6: 電流・電圧特性の自己無撞着計算

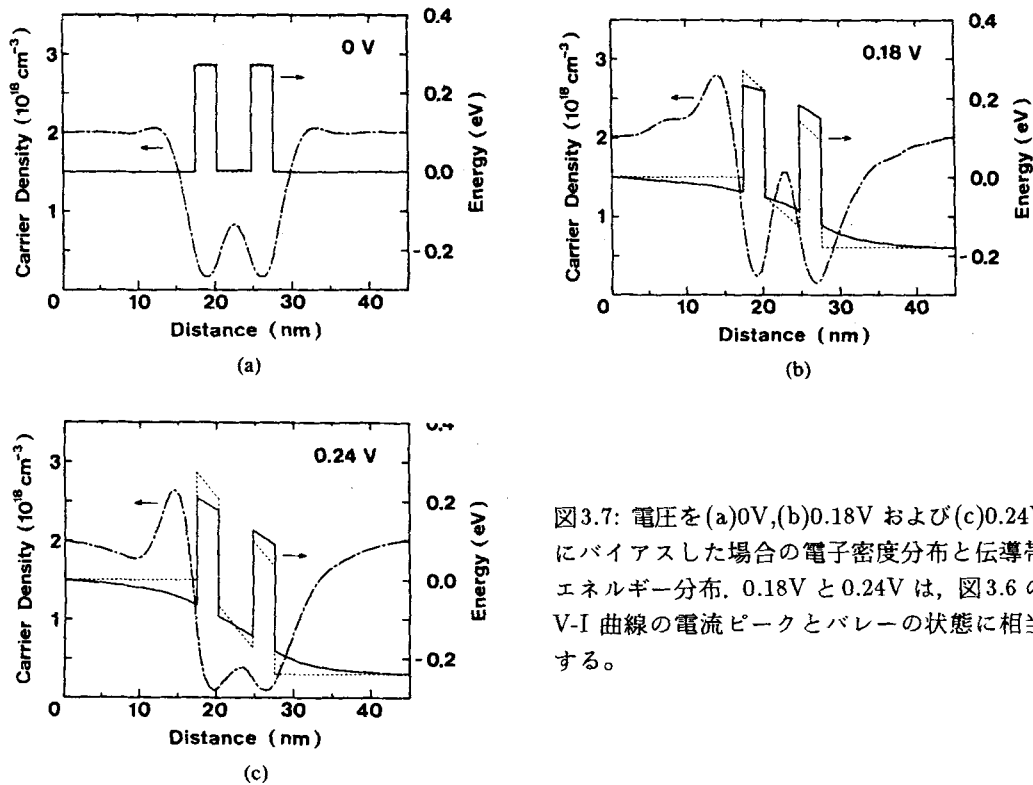


図3.7: 電圧を(a)0V,(b)0.18V および(c)0.24V にバイアスした場合の電子密度分布と伝導帯エネルギー分布. 0.18V と0.24V は, 図3.6のV-I 曲線の電流ピークとバレーの状態に相当する。

の結果をそれぞれ表している。また、図3.7には、電圧を(a)0V、(b)0.18V(ピーク)、(c)0.24V(バレー)にバイアスした時の電子密度分布と伝導帯エネルギー分布を示す。点線は、フラットバンドモデルで用いた伝導帯エネルギー分布を表している。図3.7(b)から、共鳴時の量子井戸層における電界が、井戸内の電荷蓄積によりフラットバンドモデルよりも弱くなっていることが分かる。その結果、図3.6の自己無撞着計算の曲線において、共鳴がより高い電圧で起こることになる。また、電圧が加わると、電子が左側の電極部で蓄積され、右側の電極部で空乏化される様子が図3.7(b)と(c)に示されている。空間電荷がこのように分布することにより、本来中性である電極内にも電界が生じ電子を加速するようになる。従って、図3.6に示されているように、空間電荷効果が考慮されると電流密度の値が大きくなるのである。以上の結果は、空間電荷が量子構造デバイスの特性に大きな影響を及ぼすことを示しており、高精度なデバイスシミュレーションを行うには、ポテンシャルにおける自己無撞着な計算を行う必要があることが分かる。

以上の計算には非弾性散乱過程が全く含まれていないにも関わらず、電極部に蓄積層と空乏層が形成されていることは注目に値する[32]。電子の速度はその有効質量の逆数に比例して大きくなるので、障壁層では小さく、井戸層および電極部では大きくなると考えられる。この時、電子が障壁層に入射する場合には減速され、逆に障壁層から出ていく場合には加速されるようになる。その結果、蓄

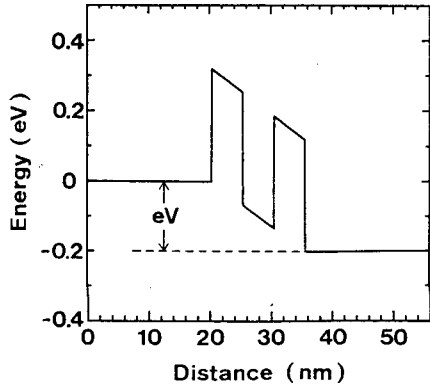


図 3.8: 共鳴トンネルダイオードのデバイスモデル

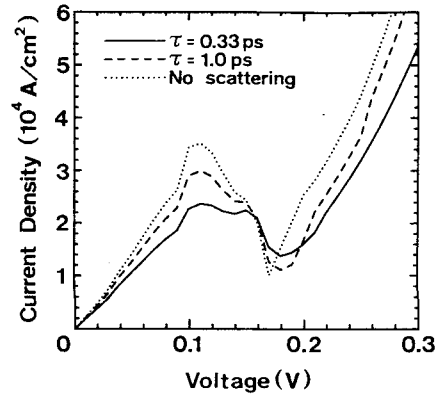


図 3.9: 電流・電圧特性の計算結果. 実線, 破線および点線は, それぞれ, $\tau = 0.33\text{ps}$, 0.1ps , ∞ の場合に対応する。

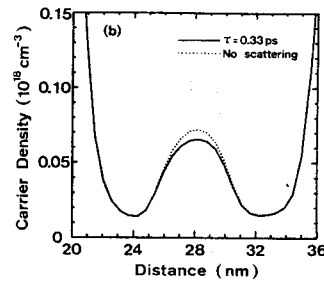
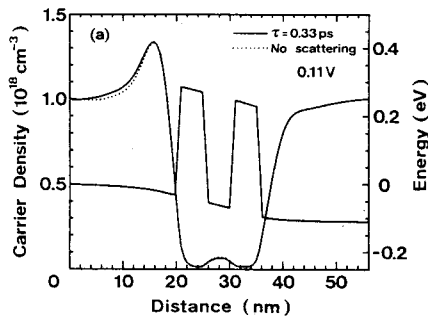


図 3.10: (a) 電圧を 0.11V にバイアスした時の電子密度分布と伝導帯エネルギー分布と (b) 井戸部を拡大した電子密度分布. 実線および点線は, それぞれ, $\tau = 0.33\text{ps}$, ∞ に対応する. 0.11V は, 図 3.9 の V-I 曲線の電流ピークに相当する。

積層が左側の電極に、空乏層が右側の電極に形成されるようになるのである。

以上までの結果から、新しいウィグナー関数モデルの妥当性が示された。次に、このウィグナー関数モデルと実験結果の比較を行うために、図 3.8 に示すような実験で用いられた RTD の構造 [33] と同じモデルを用いて、電流・電圧特性を計算する。GaAs 量子井戸および AlGaAs 障壁の厚さはともに 5.1nm とし、障壁層の Al 混晶比は 0.35 と仮定する。GaAs 電極部のドーピング密度 N_D は 10^{18}cm^{-3} とし、障壁および井戸層はアンドープとする。Al_{0.35}Ga_{0.65}As 層の有効質量と比誘電率は、それぞれ $0.096m_0$ 、 11.89 である。室温での実験では、ピーク電流密度 J_P が $2.1 \times 10^4\text{A/cm}^2$ 、PV 比 (Peak-to-valley 電流比) が 1.75 と報告されている [8][33]。図 3.9 に、室温で計算した RTD の電流・電圧特性を示す。緩和時間 τ は、 1.0ps 、 0.33ps とし、散乱のない $\tau = \infty$ の結果も示している。 τ が小さくなるにつれて、ピーク電流密度、PV 比ともに減少していることが分かる。 $\tau = 0.33\text{ps}$ の曲線では、ピーク電流密度が $2.4 \times 10^4\text{A/cm}^2$ 、PV 比が 1.72 となっており、実験結果と良い一致をし

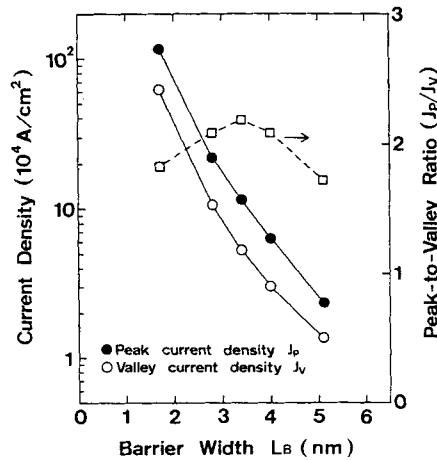


図3.11: ピーク、バレー電流密度とPV比の障壁幅依存性

ている。しかし、図3.9のI-V特性で電流がピークとなる電圧の位置は、実験に比べて小さくなっている。これは、実験では直列抵抗や接触抵抗による電圧降下が含まれているためと考えられる。また、図3.9の負性抵抗領域において、その傾きが平になるplateaulikeな構造が見られる。このようなplateaulikeな性質は、いくつかの実験の測定結果でも観測されている[34]-[36]。その原因についての明確な説明はなされていないが、我々は、電圧変化による伝導帯のポテンシャル分布の変化を調べることによって、二つ目のピークの所で別のトンネリングが起こっていると考えている。電圧を加えると、左側の障壁に隣接してできる三角ポテンシャル井戸に準二次元電子ガスが形成されるようになる。そこでの量子化エネルギーが、二つの障壁に挟まれたメインの量子井戸の基本量子エネルギーと一致すると、共鳴トンネル現象が二番目のピークに相当する電圧で起こると考えられる。

図3.10(a)はI-V曲線のピークにバイアスした時の電子密度分布と伝導帯エネルギー分布を示している。実線および点線は、それぞれ $\tau = 0.33$ psおよび $\tau = \infty$ に相当する。左側電極においては、散乱によって電子がより多く蓄積される様子が分かる。一方、右側電極の空乏層の分布は殆ど変化していない。さらに、図3.10(b)のように井戸内の電子密度分布を拡大して見ると、井戸に捕らえられた電子数が散乱によって減少しているのが分かる。これは、散乱がある場合には、電子の波数空間での分布が広がるために、二重障壁をトンネルする電子が少なくなることを表しており、図3.9のピーク電流密度の減少につながる。

図3.11は、障壁幅に対するピークおよびバレー電流密度とPV比の変化を示している。ピーク電流密度は、簡単な透過確率法によって予想されているように[37]、障壁幅の増加とともにほぼ指数関数的に減少していることが分かる。さらに、PV比が3.4nmの障壁幅で最大となっているのが分かる。障壁が薄くなると、非共鳴トンネル過程によって流れる電流が大きくなるために、バレー電流密度の方がピーク電流密度よりも大きく増加していく。一方、障壁が厚くなると、共鳴トンネル現象が

起こりにくくなるが、バレー電流は熱励起された電子が障壁を越えて流れる過程に支配されているために、バレー電流よりもピーク電流の方がより大きく減少していく。このようなPV比の障壁幅依存性は、InGaAs/AlAs RTDにおいて実験的に報告されている[37]。材料系は我々のモデルとは異なっているが、同様な現象として説明できると考えている。

3.2.3 過渡応答特性

大信号過渡特性を議論するために、I-V特性のピーク・バレー間で電圧をスイッチした時の電流応答を調べる。すべての時間でポテンシャルの自己無撞着計算を行い、緩和時間は0.33ps、温度は300Kと仮定する。

まず、RTDのダイナミック特性の障壁幅依存性を調べる。井戸幅と障壁の高さをそれぞれ5.1nm、0.32eVと固定し、障壁幅のみを5.1nm、3.4nm、1.7nmと変化させた。図3.12(a)および(b)は、それぞれ、(a)ピークからバレー、(b)バレーからピークへ、 $t=0$ で電圧をスイッチさせた時の外部回路に誘導される電流密度の過渡応答の計算結果を示している。外部誘導電流密度は次式で計算される。

$$J(t) = \frac{1}{V} \int_0^L dx J(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \quad (3.150)$$

ここで、 V 、 L 、 $J(x)$ および $\psi(x)$ は、それぞれ、バイアス電圧、デバイス長、電流密度およびポテンシャルである。負性抵抗領域で電圧をスイッチさせているにも関わらず、両スイッチングともに初期の

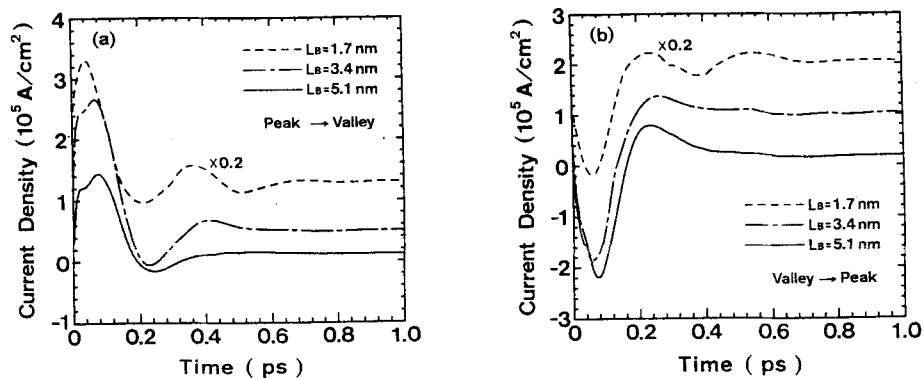


図3.12: (a) ピークからバレーへ、(b) バレーからピークへ電圧をスイッチさせた時の、外部誘導電流密度の過渡応答。障壁幅は、5.1nm、3.4nm および 1.7nm と変化させている。

電流変化は正の抵抗としての動きを示している。その初期の電流オーバーシュートとアンダーシュートは、薄い障壁の場合に、若干速くなっているが、ほぼ0.5psの間に起こっている。一方、透過確率法では、RTDの共鳴状態の寿命は $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$ (ΔE は、透過確率の半値半幅で障壁幅に強く依存する)で見積られ、薄い障壁ほど Δt は小さくなることが良く知られている[38]-[44]。しかし、共鳴状

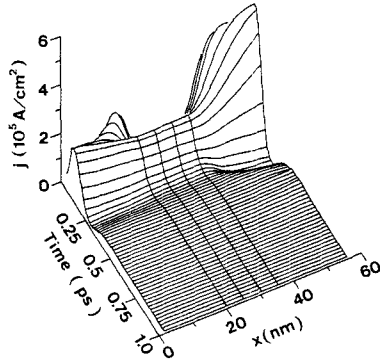


図3.13: RTDの各位置による電流密度の時間変化. 障壁幅は5.1nmとし, 電圧はピークからバレーへスイッチしている。

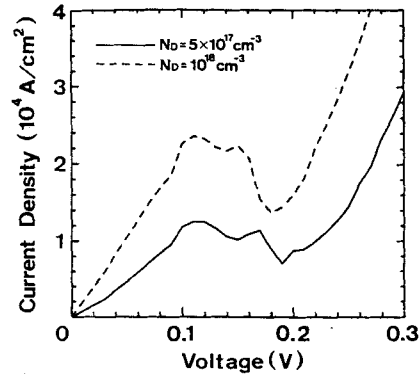


図3.14: ドーピング密度による電流・電圧の変化. 障壁幅は5.1nm, ドーピング密度は $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ である。

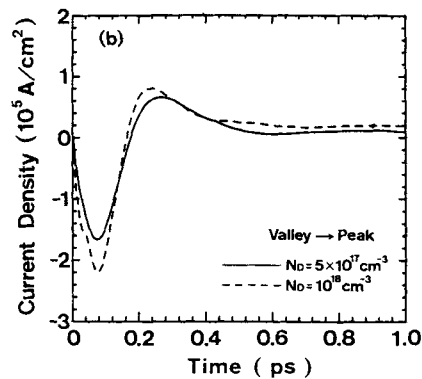
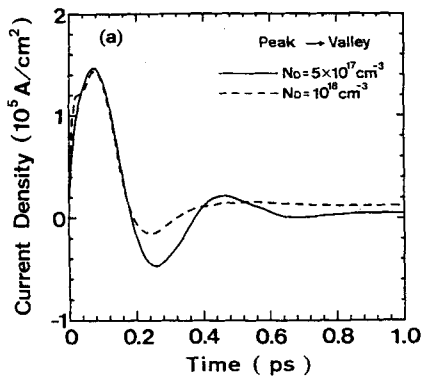


図3.15: ドーピング密度を $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ とした時の電流過渡応答. 電圧は, (a) ピークからバレーへ, (b) バレーからピークへスイッチさせている。破線は, 10^{18}cm^{-3} に対する結果を示している。

態の寿命 Δt は、共鳴エネルギー領域にある電子の運動に対するダイナミックな時間スケールを与えており、デバイスのスイッチング時間には対応していないことに注意されたい。従って、どのようなパラメータがRTDの本質的なスイッチング時間を決めているのかを調べる必要がある。図3.13に示す、RTDの各位置における電流密度の時間変化を見ると、電極部の電流が相対的に大きいことが分かる。これは、外部電流への電極部の電流の寄与が無視できないことを意味している。図3.13は、障壁幅5.1nmで、電圧をピークからバレーへスイッチした場合の結果である。従って、外部誘導電流の過渡応答が、電極部の電流変化の影響を受けていること、つまり、電極部の電子の動きがRTDのダイナミックな振舞いにある役割を果たしていることが分かる。そこで、電極のドーピング密度 N_D を変化させてみる。図3.14に、障壁幅5.1nmのRTDで、 $N_D = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ とした時の電流・電

圧特性を示す。破線は、 $N_D = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ の結果である。予想されるように、電流密度はほぼ半分に減少している。スイッチング特性に関しては、イオン化ドナー密度が小さくなるために電子のプラズマ振動の周期が長くなり、その結果、初期の電流オーバーシュートとアンダーシュートの起こる時間も長くなると予想される。しかし、図 3.15 から、ドーピング密度の変化によっても、初期の応答時間はほとんど影響を受けていないことが分かる。

以上の結果から、RTD のスイッチング時間は、二重障壁の厚さや電極のドーピング密度などのデバイス構造にほとんど依存しないと思われる。そこで、次に電子の有効質量が AlGaAs 系よりも小さい材料を用いれば、より高速な応答が期待できると考えて、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ と $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ から成る RTD[45]-[47] を考えることにする。 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ と $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ の電子の有効質量は、そ

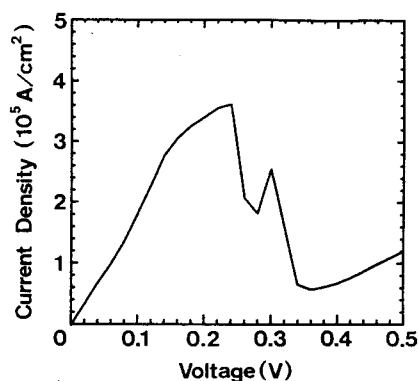


図 3.16: InGaAs/InAlAs RTD の電流・電圧特性

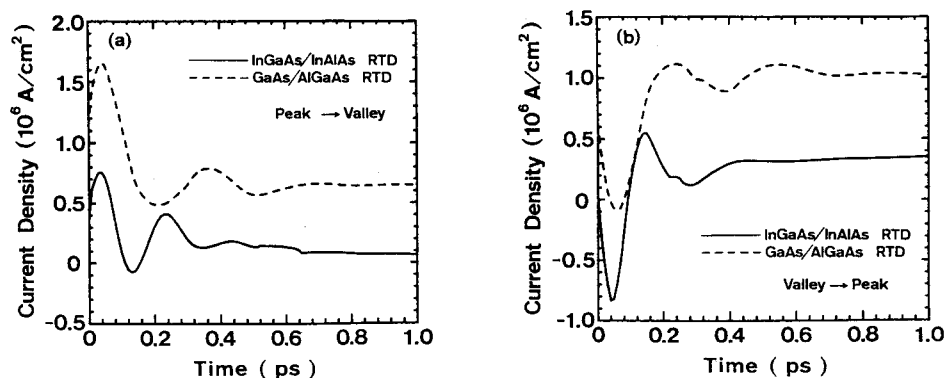


図 3.17: InGaAs/InAlAs RTD の電流過渡応答。電圧は、(a) ピークからバレーへ、(b) バレーからピークへスイッチさせている。破線は、障壁幅 1.7nm の GaAs/AlGaAs RTD の結果を示す。

れぞれ、 $0.042m_0$ 、 $0.075m_0$ と AlGaAs 系に比べて小さい。シミュレーションモデルは、 5.1nm の $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 量子井戸層と 2.8nm の $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ 障壁層で構成されているとする。電極のピーピング密度は、 10^{18}cm^{-3} とする。図3.16に、電流・電圧特性の計算結果を示す。伝導帯バンドの不連続値が 0.53eV と大きいため、PV 比は AlGaAs 系よりもかなり大きい 6.4 という値が得られている。さらに、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ RTD の電流過渡応答を図3.17に示す。比較のために、障壁幅 1.7nm の $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ RTD の結果を破線で示している。図より明らかなように、初期の電流応答が速くなっている。従って、RTD のスイッチング時間は、電子の有効質量が軽い材料系を用いることによって短縮できると言うことができる。

3.2.4 周波数応答特性

RTD の小信号交流応答を求めるために、交流電圧信号振幅 v_ω を直流電圧 V_0 に重畳して、デバイス両端に加える。ただし、図3.18に示すように、デバイス内の交流振幅は位置に比例して大きくなるよ

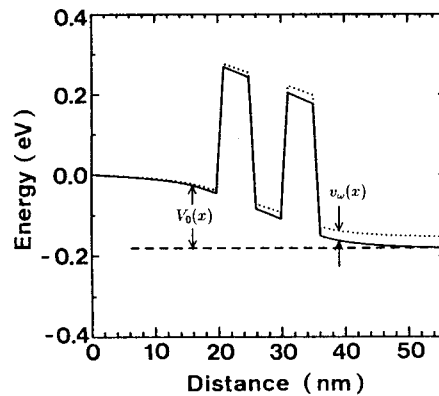


図3.18: 共鳴トンネルダイオードの小信号解析モデル

うに設定する。この時、RTD 内のポテンシャルエネルギー分布 $V(x, t)$ は次式のように与えられる。

$$V(x, t) = V_0(x) + \frac{1}{2}\lambda [v_\omega(x)e^{i\omega t} + \text{c.c.}] \quad (3.151)$$

ここで、c.c. は複素共役を表し、 $V_0(x)$ は定常状態のポテンシャル分布、 $v_\omega(x)$ は微小交流電圧信号の振幅、 λ は摂動パラメータである。外部回路に誘導される電流は、次式のように展開される。

$$J(t) = J_0(V_0) + \frac{1}{2}\lambda[y(\omega)v_\omega e^{i\omega t} + \text{c.c.}] + \frac{1}{2}\lambda^2 a_{rect}(\omega)v_\omega^2 + \frac{1}{4}\lambda^2[a_{2\omega}(\omega)v_\omega^2 e^{2i\omega t} + \text{c.c.}] + \dots \quad (3.152)$$

ここで、 $V_0 = [V_0(L) - V_0(0)]/e$ および $v_\omega = [v_\omega(L) - v_\omega(0)]/e$ である。式(3.152)の係数 y 、 a_{rect} および $a_{2\omega}$ は、それぞれ、線形アドミッタンス、整流係数および二次高調波発生係数を表す。今、Liouville 方程式(3.70)の右辺を演算子記号 \mathcal{L} を用いて

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \mathcal{L}f \quad (3.153)$$

と表すことにする。この時、Liouville 演算子 \mathcal{L} は次式のように直流成分と交流成分の和で書くことができる。

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \frac{1}{2}\lambda \left(\mathcal{L}_\omega e^{j\omega t} + \mathcal{L}_\omega^* e^{-j\omega t} \right) \quad (3.154)$$

また、Wigner 関数は次式のように二次の項まで展開する。

$$f = f_0 + \frac{1}{2}\lambda \left(f_\omega e^{i\omega t} + \text{c.c.} \right) + \lambda^2 f_{rect} + \frac{1}{2}\lambda^2 \left(f_{2\omega} e^{2i\omega t} + \text{c.c.} \right) \quad (3.155)$$

Liouville 演算子 (3.154) とウィグナー関数の展開式 (3.155) を Liouville 方程式 (3.154) に代入して、両辺を λ の次数と角周波数 ω に関して等しい項で比較すると、次の四つの式が得られる (付録 G)。

$$\mathcal{L}_0 f_0 = 0, \quad f_\omega = -\frac{1}{\mathcal{L}_0 - j\omega} \mathcal{L}_\omega f_0 \quad (3.156)$$

$$f_{2\omega} = \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{L}_0 - 2j\omega} \mathcal{L}_\omega \frac{1}{\mathcal{L}_0 - j\omega} \mathcal{L}_\omega f_0, \quad f_{rect} = \frac{1}{2\mathcal{L}_0} \text{Re} \left(\mathcal{L}_\omega^* \frac{1}{\mathcal{L}_0 - j\omega} \mathcal{L}_\omega f_0 \right) \quad (3.157)$$

上式を解いて、各周波数成分に対応するウィグナー関数 $f_i(x, k)$ ($i = 0, rect, \omega, 2\omega$) を求めた後、電流密度を

$$J[f_i] = \frac{1}{V_0} \int_0^L dx \frac{d\psi(x)}{dx} \left[e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m^*(x)} f_i(x, k) \right] \quad (3.158)$$

$$(i = 0, rect, \omega, 2\omega) \quad (3.159)$$

により計算すると、式 (3.152) の係数 y 、 a_{rect} および $a_{2\omega}$ は、それぞれ、次式により求めることができる [48]-[50]。

$$J_0 = J[f_0] \quad (3.160)$$

$$y(\omega) = J[f_\omega]/v_\omega \quad (3.161)$$

$$a_{rect}(\omega) = \frac{1}{2} J[f_{rect}]/v_\omega^2 \quad (3.162)$$

$$a_{2\omega}(\omega) = \frac{1}{2} J[f_{2\omega}]/v_\omega^2 \quad (3.163)$$

まず、GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As RTD の線形アドミッタンスの障壁幅依存性を調べる。図 3.19 に、障壁幅を (a)5.1nm、(b)3.4nm および (c)1.7nm とした場合の線形アドミッタンスの周波数依存性を示す。挿入図に、それぞれのバイアス電圧の位置を示している。実線がアドミッタンスの実部を、破線が虚部を表している。また、点線は、次式で計算した変位電流成分を示している。

$$y_{displace}(\omega) = \frac{j\omega}{v_\omega V_0} \int_0^L d\chi \varepsilon(\chi) \frac{dv_\omega}{d\chi} \frac{dV_0}{d\chi} \equiv \omega C \quad (3.164)$$

コンダクタンスを表す $\text{Re}(y)$ は、低周波領域では I-V 曲線の負性抵抗部分の傾きに相当する負の一定値をとるが、THz 領域になると正に反転しているのが分かる。これは、高周波になると電極部の電子のプラズマ振動による電磁波の吸収が起こるためであると考えられる。電極の電子密度を 10^{18}cm^{-3} として計算したプラズマ振動周波数は 9.7THz であり、ほぼコンダクタンスが最大となる周波数に対

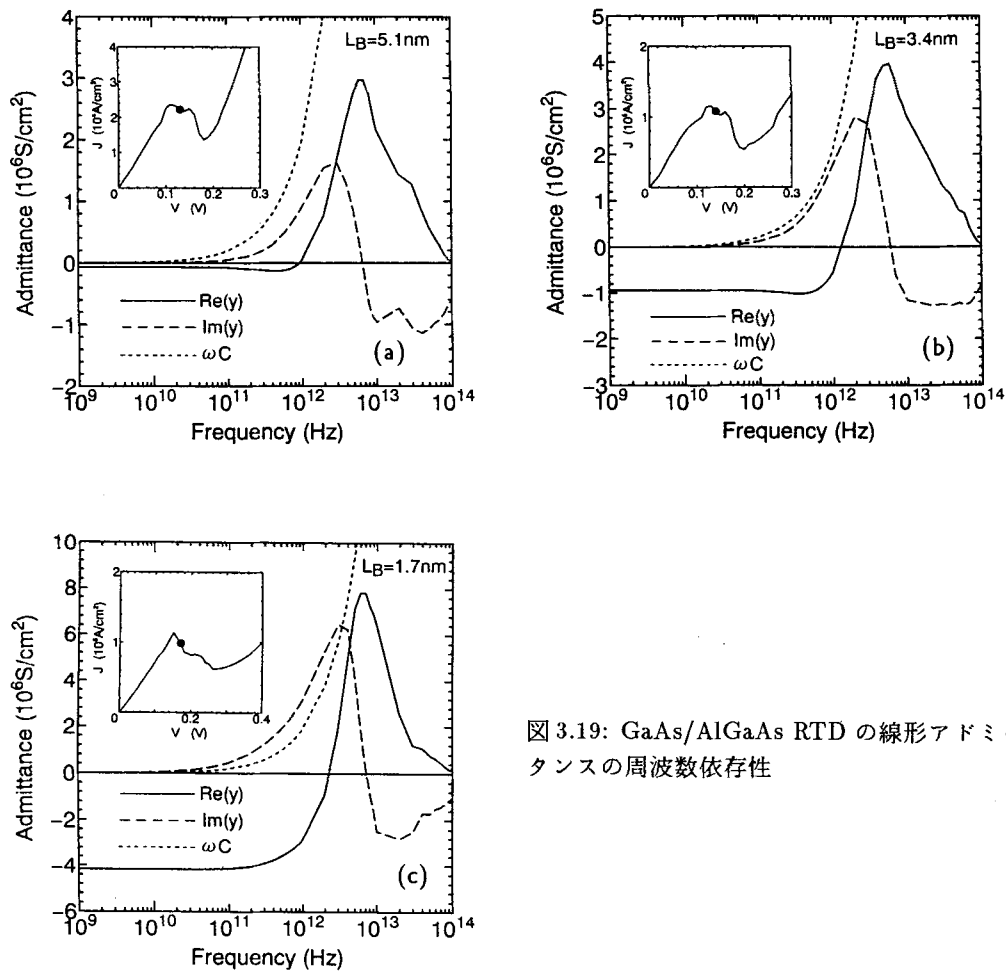


図 3.19: GaAs/AlGaAs RTD の線形アドミッタンスの周波数依存性

応している。障壁が薄い程、より高い周波数まで負性コンダクタンスが現れているが、これは、単に、薄い障壁ほど負性コンダクタンスの値が大きいため、高周波までプラズマ振動吸収の影響が現れにくいことによる。図 3.19 の結果は、これまでの報告例 [11],[48]-[50] に比べて低い周波数でコンダクタンスの反転が起こっていることも注目値する。著者らのシミュレーションでは、セルフコンシステントな計算を行って空間電荷分布を正確に求め、プラズマ振動効果を正しく見積っているからである。一方、 $\text{Im}(y)$ の曲線を見ると、低周波では正となり容量性を示すが、コンダクタンスが正のピークをとる周波数以上では、逆に負になり誘導性になることが分かる。プラズマ周波数以上では、電子の慣性のため、電子が電圧変化に追従できないためであろう。次に、散乱による線形アドミッタンスの変化を調べる。図 3.20 は、障壁幅を 5.1nm とした場合の (a) $\text{Re}(y)$ と (b) $\text{Im}(y)$ の緩和時間依存性

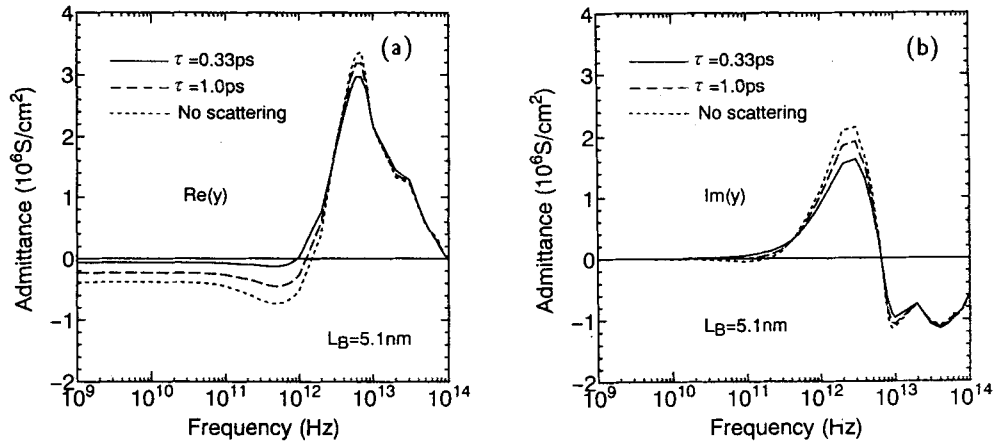


図 3.20: GaAs/AlGaAs RTD の線形アドミッタンスの (a) 実部および (b) 虚部の緩和時間依存性

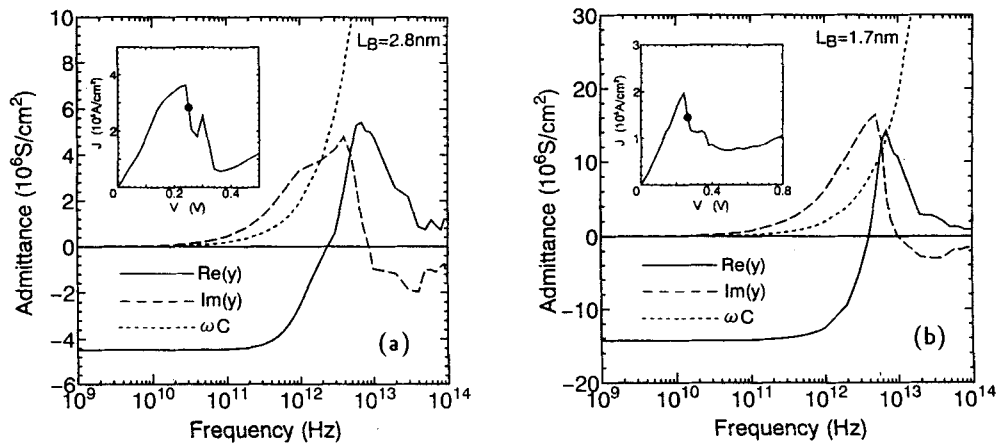


図 3.21: InGaAs/InAlAs RTD の線形アドミッタンスの周波数依存性

を示す。コンダクタンス $\text{Re}(y)$ が正のピークをとる周波数以上では、 $\text{Re}(y)$ および $\text{Im}(y)$ とともに緩和時間によってほとんど変化しないことが分かる。これは、プラズマ周波数以上では、散乱効果よりも電極部における電子のプラズマ振動によって RTD のアドミッタンスが決められていることを示している。一方、 $\text{Re}(y)$ が負になる周波数領域では図 3.9 の電流・電圧特性から分かるように、負性抵抗の値が緩和時間の減少とともに小さくなるので、コンダクタンスが正に反転する周波数が低くなる。また、この時の $\text{Im}(y)$ は、図 3.20(b) より緩和時間の減少とともに小さくなり、誘導的になっていくことが分かる。

図 3.21 は、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ RTD で障壁幅を (a) 2.8nm と (b) 1.7nm とした場合の線形アドミッタンスの計算結果である。図 3.19 の AlGaAs 系 RTD に比べて、より高い周波数まで負性

コンダクタンスが現れていることが分かる。これは、この材料系では電極の電子の有効質量が $0.042m_0$ と小さく、プラズマ周波数が1.2THzに増大するために、より高周波までプラズマ振動吸収の影響が現れにくくなることによる。

次に、以上の結果を用いてRTDのrfパワーの周波数依存性を計算する。デバイス面積を $1-\Omega$ の回路抵抗に整合するよう選ぶと、rfパワーは次式で与えられる[11]。

$$P = \frac{V_{rf}^2}{2} \frac{1}{1 + (B/G)^2} \quad (3.165)$$

但し、 G はコンダクタンスの実部を、 B は伝導電流成分と変位電流成分の和をとった全サセプタンスを表している。 V_{rf} はコンダクタンスが一定になる電圧範囲である。図3.22(a)および(b)は、それぞれ、(a)GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As RTDと(b)In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As RTDに対して計算したrfパワーを示している。但し、縦軸は低周波数時のrfパワーで規格化している。高周波領域では、図3.19および図3.21の点線で示されているように、サセプタンスの変位電流成分が周波数に比例して増大するために、rfパワーは急激に減少するようになる。しかし、障壁の幅を薄くすると、負性コンダクタンスの値が大きくなるために、変位電流成分の影響が現れにくくなり、より高い周波数まで発振パワーが維持されていることが分かる。また、図3.22(b)から分かるように、電子の有効質量が軽いIn_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As RTDにおいては、GaAs系よりも高い周波数領域での発振が可能であり、高周波発振素子としても優れた特性を期待することができる。

次に、静特性の電流ピークを与える電圧にバイアスした時の非線形応答について議論する。GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As RTDの障壁幅を(a)5.1nm(b)、3.4nmおよび(c)1.7nmとした場合の整流係数 a_{rect} および二次高調波発生係数 $a_{2\omega}$ の周波数依存性を図3.23に示す。いずれの障壁幅においても、 $a_{2\omega}$ は高周波で減少していくが、 a_{rect} は1-8THz領域で共鳴的に大きくなっている。空間電荷の効果を取り

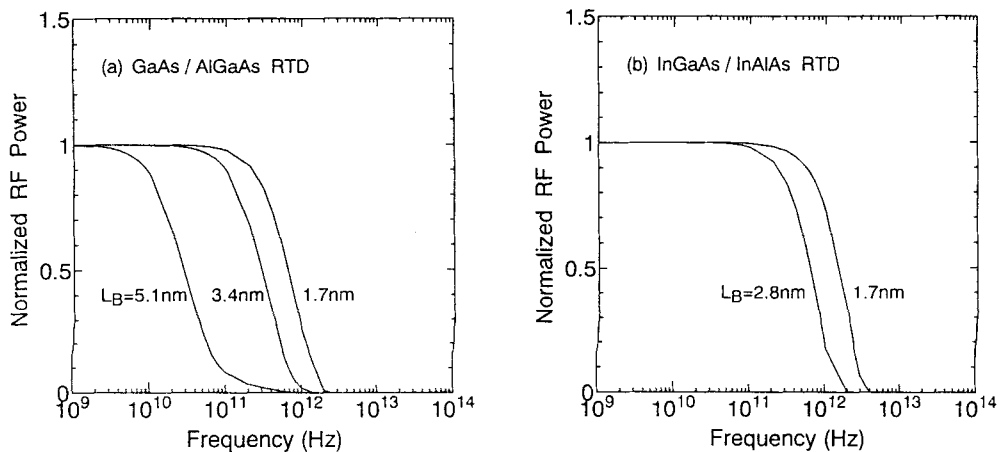


図 3.22: (a)GaAs/AlGaAs RTD および (b)InGaAs/InAlAs RTD の rf パワーの周波数依存性

入っていない Frensley[48]-[50] の結果でも同じ周波数領域で a_{rect} の増大が起こっていることから、これは電極部の電子によるものではないと考えられるが、現在のところその理由は明らかでない。しかし、GaAs/AlGaAs RTD での実験において、 a_{rect} が 2.5THz で大きくなることが報告されており [31]、Wigner 関数モデルのシミュレーション結果と良い一致を示している。また、障壁が薄い程、 a_{rect} の値自体が大きくなっていることから、検波特性は、障壁幅の小さい RTD の方が優れていると言える。図 3.24 は、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ RTD の障壁幅を (a)2.8nm と (b)1.7nm とした場合の非線形応答特性の計算結果を示している。 $a_{2\omega}$ は、GaAs/AlGaAs RTD と同様に高周波で減少していくが、 a_{rect} は、GaAs/AlGaAs RTD よりも高い 1-20THz 領域で共鳴的に大きくなっていることが分かる。InGaAs/InAlAs RTD の場合には、GaAs/AlGaAs RTD と異なり障壁幅を薄くすると低周波領域での a_{rect} の値は小さくなるが、 $\sim 5\text{THz}$ 付近では逆に大きくなっており、特に、高周波数領域において GaAs/AlGaAs RTD よりも優れた検波特性を期待することができる。

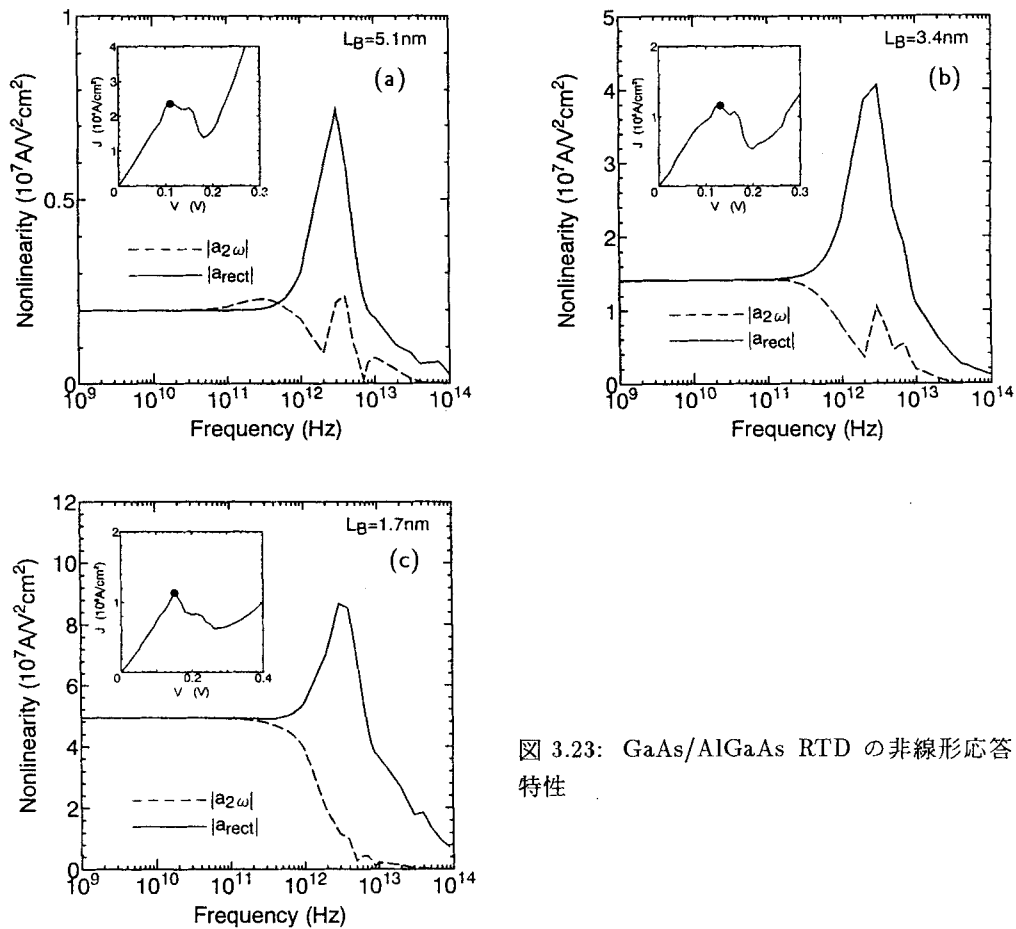


図 3.23: GaAs/AlGaAs RTD の非線形応答特性

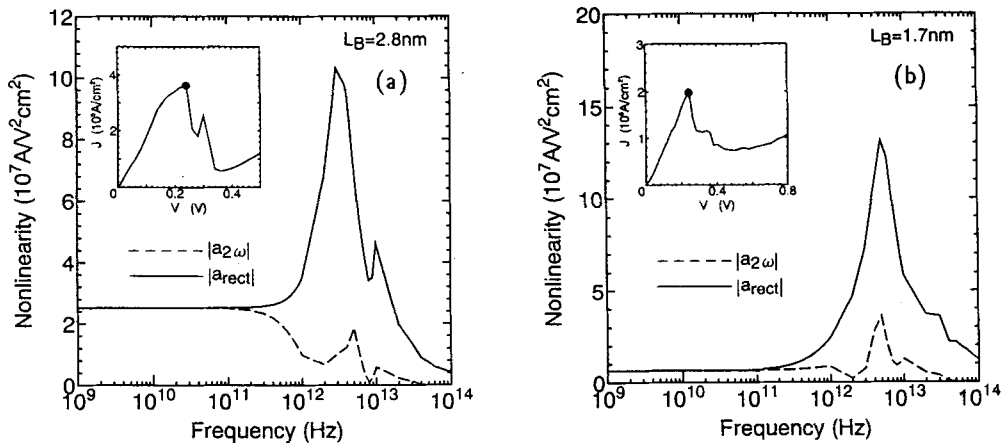


図 3.24: InGaAs/InAlAs RTD の非線形応答特性

3.3 透過確率モデルとの比較

量子サイズ構造デバイスの定常特性を解析する別の方法として、第 2 章 2.3 節で述べた透過確率法 [51] が良く知られている。ウィグナー関数モデルとこの透過確率法との比較を次に行う。新しいウィグナー関数モデルの妥当性を調べるために用いた図 3.4 のシミュレーションモデルに対して、両手法で計算した電流・電圧を図 3.25 に示す。実線がウィグナー関数モデル、破線が透過確率法による結果を表している。図 3.25 の計算においては、両モデルとも、ポテンシャルにおける自己無撞着性と散乱過程は取り入れられていないが、有効質量の位置変化は考慮されている。透過確率法では、reservoir 内で仮定された Fermi-Dirac 分布関数が、そのまま形を変えないで電極領域を伝搬するよ

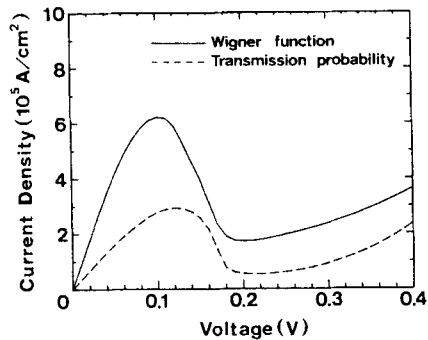


図 3.25: ウィグナー関数モデルと透過確率法の比較。両モデルの計算において、ポテンシャルの自己無撞着性は含まれていないが、有効質量の位置変化は考慮している。

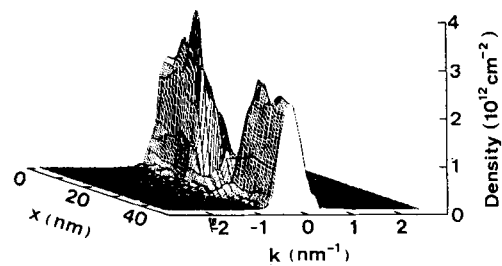


図 3.26: 共鳴状態 ($V=0.1V$) でのウィグナー分布関数

うに取り扱うために、位置による分布関数の変化を取り入れることができない。これに対してウィグナー関数モデルでは、図 3.26 に示すように、たとえポテンシャル分布が電極内で一定であったとしても、reservoir 内で励起された分布関数が障壁層に近づくにつれて、障壁のポテンシャル反発力によって k 空間で広がるようになる。この分布関数の広がりによって、電子の平均エネルギーが増加するようになる。その結果、電子が共鳴を起こす電圧が低くなったり、また、より多くの電子が障壁を飛び越えて流れるようになるために、電流密度も高くなる。これが、図 3.25 の二曲線に差が生じる原因である。

Chapter 4

量子井戸構造光デバイスの電気伝導

長波長帯光通信のキーデバイスである半導体レーザやアバランシェ・フォトダイオードに量子井戸構造を導入して、デバイスの特性を改善しようとする試みが、現在活発に行われている。本章では、このような量子井戸構造を有する光デバイスを解析・設計する際に必要となる量子輸送モデルについて議論し、アバランシェ・フォトダイオードと量子井戸構造半導体レーザのキャリア輸送に注目して、ウィグナー関数モデルを用いた解析を行う。

4.1 アバランシェ・フォトダイオードの正孔量子輸送特性

4.1.1 SAM型構造 APD

ヘテロ構造を有する InP/InGaAs アバランシェ・フォトダイオード (APD) は、 $1.3\mu\text{m}$ ないしは、 $1.55\mu\text{m}$ の長波長帯における光通信用受光素子として注目されている [52][53]。このフォトダイオードは、逆バイアスを印加した状態で光照射を行うと、正孔が InGaAs 層で光励起され、アバランシェ増倍層である InP 層に流れ込む、いわゆる、SAM 型 (Separated Absorption and Multiplication regions) 構造を持つ。典型的な SAM 型従来構造をもつ InP/InGaAs APD を図 4.1(a) に、また、ヘテロ接合付近のバンド形状を図 4.1(b) に示す。その際、価電子帯バンド不連続のため、正孔の一部がヘテロ接合部に蓄積されることが、応答速度を制限する一つの原因となっている。この正孔蓄積を軽減し高速化を計ることを目的として、従来より、1) ヘテロ接合部に四元層をいく層か挿入する方法 [54]、2) 擬四元グレーディッド・ギャップ層を挿入する方法 [55] 等が提案されている。実際に、これらの構造をヘテロ接合部に挿入することによって、ヘテロ界面での正孔蓄積を軽減することに成功している。しかし、これらヘテロ接合部の遷移領域を最適設計するためには、次に述べる三点を考慮できる量子力学的シミュレーション手法を用いなければならない。まず、第一に、ヘテロ接合部における価電子帯バンド不連続によって形成された三角ポテンシャルの部分に離散化された量子準位が発生するが、このような量子効果を解析できる手法でなければならない。第二に、キャリアが量子準位に

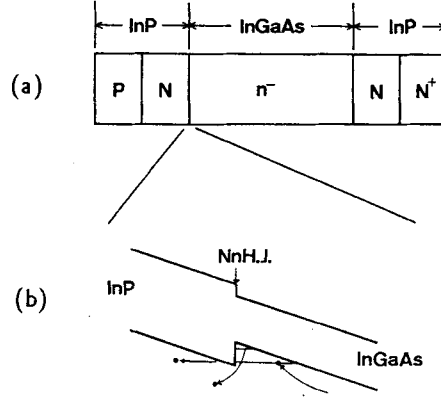


図 4.1: 典型的な InP/InGaAs 長波長帯 APD . (a) デバイス構造と (b) バンド図.

捕獲されたり、脱出したりする効果を見積るために、キャリアの散乱効果を取り入れることのできる解析法である必要がある。第三に、APD の応答速度を評価するために、時間応答を解析することのできる手法でなければならない。以上の三つの要件を満たす解析法として、ウィグナー関数に基付いた量子輸送モデルを用いて、APD の量子力学的シミュレーションを行った。

4.1.2 ウィグナー関数による正孔量子輸送の記述

デバイスモデルとしては、図 4.2(a)SAM 型従来構造、(b) 四元層挿入 (QI;Quaternary Inserted) 構造、および (c) グレーディッド・ギャップ (GB;Graded Bandgap) 構造の三種類を用いる。ヘテロ界面における正孔輸送を問題としているので、図 4.2(a)、(b) および (c) に示すようにヘテロ接合付近の有限の領域を考えることにする。QI および GB 構造の遷移層幅 t は可変とする。APD の残りの領域は、古典的なシミュレーションモデルで十分解析できると考えられる。モデリングのために、仮想電極が各構造の両端に接続されていると仮定する。高い逆バイアスを印加して使用する APD の動作状態では、ヘテロ接合付近の電流は正孔電流が支配的となるので、以下では正孔輸送のみを議論することにする。ヘテロ接合部の三角ポテンシャル井戸内の量子サブバンドに捕らえられた正孔は、熱放出によってのみサブバンドから抜け出すことができる。このような正孔量子輸送を記述する量子輸送方程式は次式のように書かれる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar k}{m^*} \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(x, k - k') f(x, k') - \frac{1}{\tau} \left[f(x, k) - f_0(x, k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} f(x, k') \right] \quad (4.1)$$

$$V(x, k - k') = 2 \int_0^{\infty} d\xi \sin[(k - k')\xi] \left[E_V \left(x + \frac{\xi}{2} \right) - E_V \left(x - \frac{\xi}{2} \right) \right] \quad (4.2)$$

但し、 $E_V(x)$ は価電子帯エネルギー分布を表している。ここでは、最初の試みとして、有効質量をデバイス内で一定として議論することにする。キャリアの衝突項は緩和時間近似で取り入れている。正

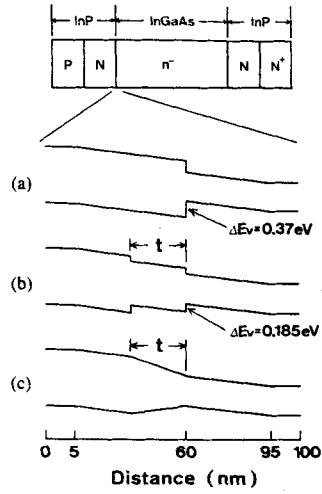


図 4.2: InP/InGaAs APD におけるヘテロ接合のシミュレーションモデル. (a)SAM 型従来構造, (b) 四元層挿入 (QI) 構造, (c) グレーディッドギャップ (GB) 構造

孔密度 $p(x)$ および正孔電流 $j_p(x)$ はそれぞれ次式で与えられる。

$$p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(x, k) \quad , \quad j_p(x) = e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m^*} f(x, k) \quad (4.3)$$

また、ポアソン方程式は

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -e(\Gamma + p) \quad (4.4)$$

と書かれる。Liouville 方程式 (4.1) とポアソン方程式 (4.4) は、次式によって互いに関係付けられている。

$$E_V(x) = \chi_e(x) + E_G(x) + e\psi(x) - [\chi_e(0) + E_G(0) + e\psi(0)] \quad (4.5)$$

但し、 χ_e および E_G は、それぞれ半導体材料の電子親和力とエネルギーギャップである。

ウィグナー関数に対する境界条件は、共鳴トンネルダイオードの時と同様に次式で与える。

$$f(0, k) = f_l(k) \quad k > 0 \quad , \quad f(L, k) = f_r(k) \quad k < 0 \quad (4.6)$$

$$f_{l,r}(k) = \frac{m_{l,r}^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}} \right) \right] \right\} \quad (4.7)$$

但し、添字 l, r はそれぞれ左側、右側電極での値を表す。正孔の擬フェルミ準位 $E_{f_{l,r}}$ は、我々の研究室で開発された古典的シミュレータ [56] で得られた境界での正孔密度 $p(0)$ と $p(L)$ から与えられる。一方、ポアソン方程式のポテンシャルに対する境界条件は次式で与えられる。

$$\psi(0) = \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{n_i(0)}{\omega(0)p(0)} \right] \quad , \quad \psi(L) = V_b + \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{n_i(L)}{\omega(L)p(L)} \right] \quad (4.8)$$

但し、上式の $\omega(x)$ は、式 (3.74) で定義されたバンドグレーディング関数である。

有限差分法を用いて離散化された Liouville 方程式、ポアソン方程式、正孔密度および正孔電流密度は、それぞれ、次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, k)}{\partial t} = & -\frac{\hbar k}{m^* \Delta_x} \times \left\{ \begin{array}{l} f(x + \Delta_x, k) - f(x, k) \quad , k < 0 \\ f(x, k) - f(x - \Delta_x, k) \quad , k > 0 \end{array} \right\} - \frac{1}{\hbar} \sum_{k'} V(x, k - k') f(x, k') \\ & - \frac{1}{\tau} \left[f(x, k) - f_0(x, k) \frac{\Delta_k}{2\pi} \sum_{k'} f(x, k') \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

但し

$$V(x, k - k') = \frac{2}{N_k} \sum_{\xi} \sin[(k - k')\xi] \left[E_V \left(x + \frac{1}{2}\xi \right) - E_V \left(x - \frac{1}{2}\xi \right) \right] \quad (4.10)$$

$$\frac{\epsilon \left(x + \frac{1}{2}\Delta_x \right) \frac{\psi(x + \Delta_x) - \psi(x)}{\Delta_x} - \epsilon \left(x - \frac{1}{2}\Delta_x \right) \frac{\psi(x) - \psi(x - \Delta_x)}{\Delta_x}}{\Delta_x} = -e [\Gamma(x) + p(x)] \quad (4.11)$$

$$p(x) = \sum_k \frac{\Delta_k}{2\pi} f(x, k) \quad (4.12)$$

$$j_p \left(x + \frac{1}{2}\Delta_x \right) = e \frac{\Delta_k}{2\pi} \left[\sum_{k < 0} \frac{\hbar k}{m^*} f(x + \Delta_x, k) + \sum_{k > 0} \frac{\hbar k}{m^*} f(x, k) \right] \quad (4.13)$$

離散化された Liouville 方程式 (4.9) とポアソン方程式 (4.11) に対して、第三章と同様な操作を行い、ポテンシャルエネルギー $\Delta E_V(x)$ の変化が全デバイス領域において 10meV 以下になるまで、繰り返し計算を行うことにする。

4.1.3 ヘテロ界面における正孔蓄積の遷移層厚依存性

計算において、正孔の有効質量 m^* と緩和時間 τ はデバイス内で一定とし、それぞれ、 $0.573m_0$ と 0.1ps を与える。 $\tau = 0.1\text{ps}$ は 300K で衝突距離 15nm に相当する。比誘電率は InP 層で 12.4、InGaAs 層で 13.5、また、ドーピング密度 Γ は N-InP 層で $1.5 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ 、 n^- -InGaAs 層で $8.0 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ とする。

まず、QI 構造における正孔蓄積の遷移層厚依存性を調べる。図 4.3 は、印加電圧 1.8V で四元層の厚さを変化させた時の QI 構造における (a) 正孔密度分布と (b) 価電子帯エネルギー分布を示す。電圧 1.8V は、APD が動作モードとなる平均電界 $1.8 \times 10^5\text{V/cm}$ に相当する。各図において、点線はアブラプトヘテロ構造での分布を示している。図 4.3(a) においては、二つのヘテロ界面付近で常に正孔蓄積が起きているのが分かる。しかし、左側の蓄積は右側よりも少なく、四元層厚 t が大きくなると減少している。これは、正孔が薄い四元層を伝搬しながら加速されるために、散乱を受けにくくなることによる。一方、右側の蓄積の変化は複雑である。最初の $t = 5\text{nm}$ までは増加するが、その後は四元層厚が増加するとともに減少し定常値に落ち着いていく。これは、図 4.3(b) に示すように、 $t = 10\text{nm}$ までは二つのヘテロ接合部にできる三角量子井戸がお互いに重なり合うので、より低エネル

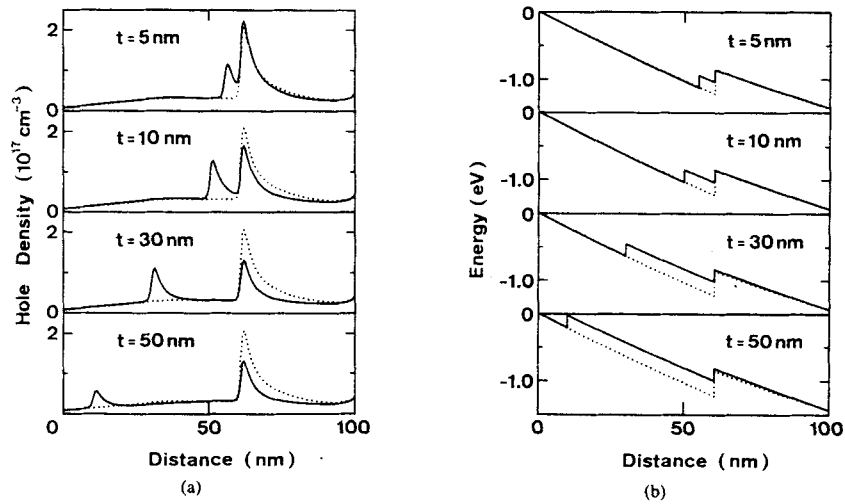


図4.3: QI 構造における (a) 正孔密度分布と (b) 価電子帯エネルギー分布の四元層厚依存性. 印加電圧は 1.8V を与えた (平均電界は $1.8 \times 10^5 \text{V/cm}$). 点線は, アブラプトヘテロ構造での分布を示す。

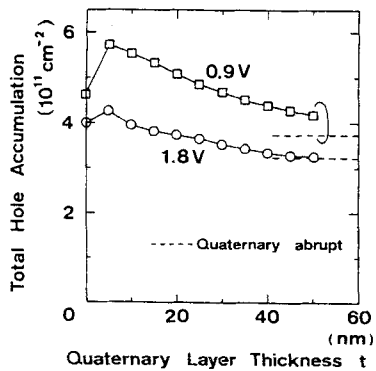


図4.4: 全正孔蓄積量の四元層厚依存性. 0.9V および 1.8V は, それぞれ $0.9 \times 10^5 \text{V/cm}$ と $1.8 \times 10^5 \text{V/cm}$ の平均電界に相当する。

ギーサブバンドをもった広い量子井戸が形成され、その結果、より多くの正孔が蓄積されるようになるためである。さらに、遷移層が長くなって二つの井戸の結合が分離されると、右側の蓄積は一定の分布に落ち着くことになる。図4.4は、1.8Vと0.9Vの印加電圧に対する全正孔蓄積量の四元層厚依存性を示す。この図は、全デバイス領域に渡って正孔密度を積分することによって得られる。 $t=0$ はアブラプトヘテロ構造に対応する。参考のために、InGaAsP-InP四元アブラプトヘテロ構造での正孔蓄積量を水平の破線で示している。その値が、QI構造を用いて正孔蓄積量を軽減させることができる減少限界値を与える。ここで、1.8Vにおいては50nmの四元層厚によって既に減少限界値に到達していることに注意されたい。0.9Vのバイアス電圧ではデバイス内の電界が小さいために、二つの井戸の結合が長く続き、50nm程度の薄い四元層では減少限界値に到達していないことが分かる。

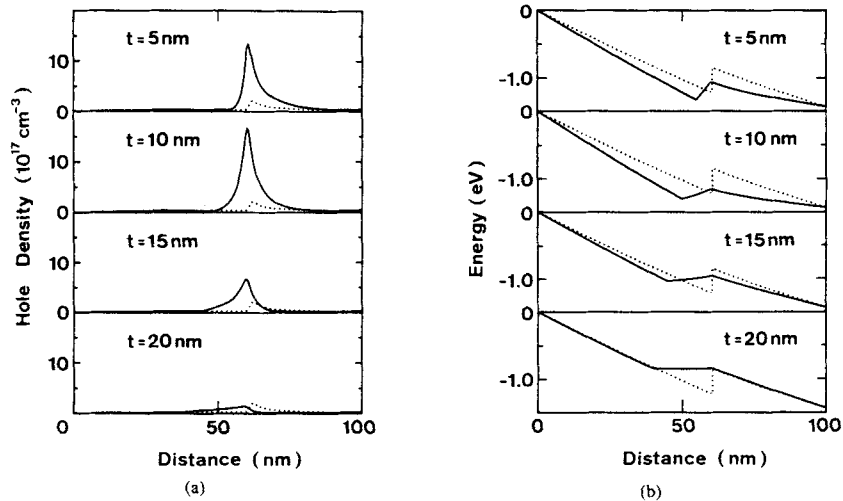


図 4.5: GB 構造における (a) 正孔密度分布と (b) 価電子帯エネルギー分布の四元層厚依存性. 印加電圧は 1.8V を与えた (平均電界は $1.8 \times 10^5 \text{V/cm}$). 点線は, アブラプトヘテロ構造での分布を示す。

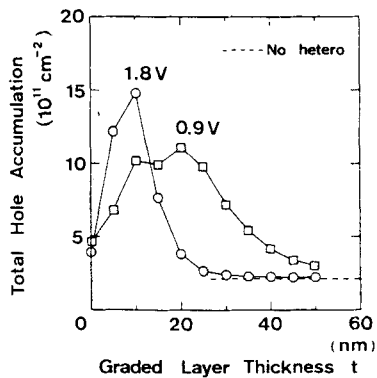


図 4.6: 全正孔蓄積量のグレーディッド・ギャップ層厚依存性. 0.9V および 1.8V は, それぞれ $0.9 \times 10^5 \text{V/cm}$ と $1.8 \times 10^5 \text{V/cm}$ の平均電界に相当する。

次に、GB 構造について議論する。図 4.5(a) と (b) は、印加電圧 1.8V でグレーディッド・バンドギャップ層の厚さを変化させた時の GB 構造における (a) 正孔密度分布と (b) 価電子帯エネルギー分布を示す。点線は、アブラプトヘテロ構造での分布を示している。 $t = 15 \text{nm}$ よりも薄いグレーディッドでは、かなり多くの正孔がヘテロ界面付近に捕らえられている。これは、図 4.5(b) に示すように、遷移層において加速電界が生じるような十分に厚いグレーディッド層を挿入しないと、より広い三角量子井戸が形成されてしまうためである。 $t = 15 \text{nm}$ までは、捕らえられた多量の空間電荷によって価電子帯エネルギー分布が大きく変形されるとともに、減速電界が遷移層に存在するようになる。しかし、 $t = 20 \text{nm}$ を越えて三角量子井戸がなくなると遷移層で正孔が加速されるので、正孔蓄積は急激に減少していく。図 4.6 は、1.8V と 0.9V の印加電圧に対する全正孔蓄積量のグレーディッド・バン

ドギャップ層厚依存性を示す。水平の破線は、価電子帯にバンド不連続が存在しない時の全正孔蓄積量を表しており、GB 構造を用いて正孔蓄積量を軽減させることができる減少限界値を与える。1.8V においては、30nm 程度の薄いグレーディット層挿入で減少限界値に到達しているのが分かる。これに対して、0.9V のバイアス電圧では、デバイス内の電界が小さいために、より厚いグレーディット層にしないと三角量子井戸がなくなる。その結果、減少限界値には到達しないのである。

ここで、今回のシミュレーションに用いた GB 構造は、本当の意味でのグレーディッド・ギャップ合金であり、文献 [55] で提案されている擬四元構造 (超格子) ではないことを強調しておく。文献 [57] で示されているように、グレーディッド・ギャップ超格子の概念は、重い正孔の量子輸送に対しては妥当ではなくなる。さらに、文献 [57] で議論されている図 4.7(a) の超格子構造は、正孔蓄積の軽減に役立たないことが、本節で用いた量子輸送モデルで計算した図 4.7(b) の結果から分かる。これは、正孔が、その重い有効質量のために、最初の薄い障壁を十分にトンネルすることができないからである。

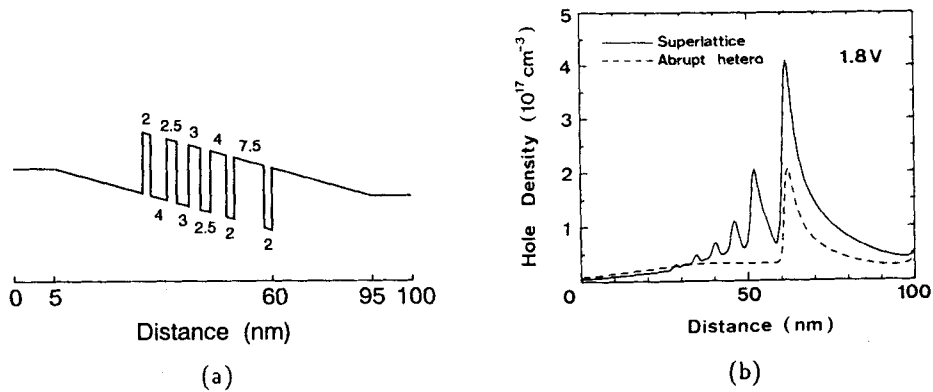


図 4.7: 擬四元 (超格子) 構造における (a) 価電子帯エネルギー分布と (b) 正孔密度分布の計算結果。

4.1.4 δ ドーピング接合

長波長 APD のヘテロ界面における正孔蓄積を取り除く別の方法として提案されているドーピング界面双極子 (DID; Doping Interface Dipole) [58] について、次に議論する。モデルとして、図 4.8 に示すように、イオン化されたドナーとアクセプターが、それぞれ、InGaAsP 層と InP 層において、ヘテロ界面を挟んで同じ距離の所に挿入された構造を用いる。ここでは、その DID の位置と幅を図 4.8 のように固定し、そのドーピング密度 N のみを変化させることにする。図 4.9(a) と (b) は、印加電圧 1.8V での (a) 正孔密度分布と (b) 価電子帯エネルギー分布の計算結果を示す。図において、実線、破線および点線は、それぞれ $N = 2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 、 $N = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ および $N = 0$ (アブラプトヘテロ構造) に対応する。図 4.9(a) から、ヘテロ接合に捕らえられた正孔密度は、ドーピング密度の増加とともに減少することが分かる。これは、主に、DID 密度が増えると図 4.9(b) に示すように、大きな

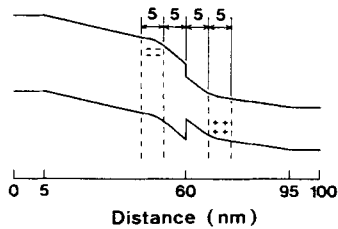


図 4.8: DID 層挿入ヘテロ接合のバンド図.

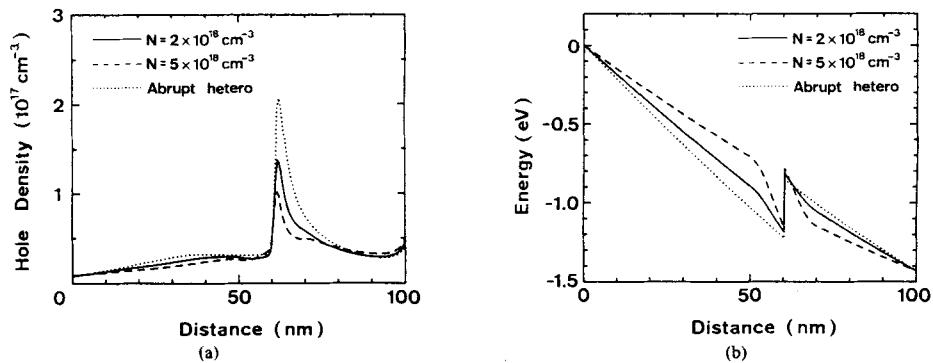


図 4.9: DID 構造における (a) 正孔密度分布と (b) 価電子帯エネルギー分布のドーピング密度依存性. 印加電圧は 1.8V を与えた (平均電界は 1.8×10^5 V/cm).

バンド・ベンディングによってヘテロ界面の三角量子井戸が鋭くなることによる。鋭い井戸内では量子サブバンドのエネルギー準位が高くなるので、サブバンドに捕らえられた正孔は熱放出によって容易に井戸から抜け出すことができるようになる。また、特に高密度の DID に対しては、正孔が井戸から抜け出す別の過程が考えられる。図 4.9(b) の $N = 5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ に対する破線において、55nm から 60nm の間の領域で正孔密度が僅かに増加しているのが分かる。これらは、InP 層にある三角障壁をトンネルしてきた正孔である。しかし、図から分かるように、正孔の重い有効質量のために、トンネル効果は正孔輸送において支配的ではない。図 4.10 は、DID 構造における全正孔蓄積量のドーピング密度依存性を示す。印加電圧は 1.8V である。水平の破線は、QI および GB 構造を用いた場合の理論的な減少限界値を示している。図 4.10 より、DID の密度を大きくすれば、QI 構造よりも効果的に正孔蓄積量を低減できることが分かる。また、GB 層挿入構造が正孔蓄積量減少に最も有効な構造であることも分かる。

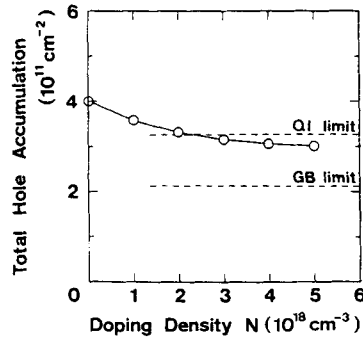


図4.10: DID 構造における全正孔蓄積量のドーピング密度依存性. 印加電圧は 1.8V (平均電界は $1.8 \times 10^5 \text{ V/cm}$) である。

4.2 量子井戸レーザーの電子・正孔量子輸送特性

4.2.1 SCH 構造量子井戸レーザー

量子井戸構造半導体レーザーは、半導体レーザーの基本特性である利得および微分利得を増大できることや、線幅増大係数を低減できることが理論的に予測されている [59][60]。このため、レーザーの動作特性について、発振閾値の低下、直接変調帯域の拡大、発振スペクトル線幅の低減等の改善が期待され、現在活発な研究が行われている。近年の結晶成長技術や微細加工技術の進歩により、既に設計通りの量子井戸レーザーを作製できる技術が立ち上がりつつあることから、量子井戸レーザーの設計技術を確立することが重要になってきている。これまで、量子井戸レーザーの設計に用いられてきた古典的な流体論 [61] や現象論的なレート方程式 [62] に代わり、量子効果を取り入れることのできる本格的な量子輸送モデルが期待されている。本節では、図4.11 に示すような光・キャリア分離閉じ込め形 (SCH; Separated Confinement Heterostructure) の量子井戸レーザーを対象にして、動的な特性解析にも適用できる量子輸送モデルについて議論する。図4.11 の SCH 構造量子井戸レーザーの特性解析に

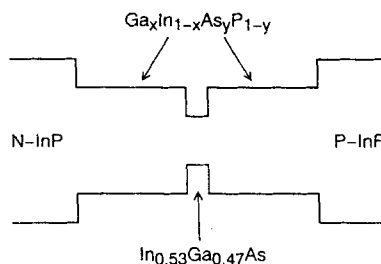


図4.11: SCH 構造量子井戸レーザー

使われる量子輸送モデルは、光閉じ込め層内のキャリアの拡散、量子井戸中へのキャリアの捕獲、量子井戸内外におけるキャリア再結合、量子井戸からのキャリアの脱出、量子井戸間のトンネリング等の輸送現象を記述できるモデルでなければならない。現在、これらの輸送現象を全て考慮できる解析法は知られていない。本節では、このような量子輸送モデルの確立を目指した研究の第一歩として、レーザ発振閾値以下で電子・正孔再結合を無視した時のキャリア輸送に注目したウィグナー関数モデルについて議論する。

4.2.2 ウィグナー関数による電子・正孔量子輸送の記述

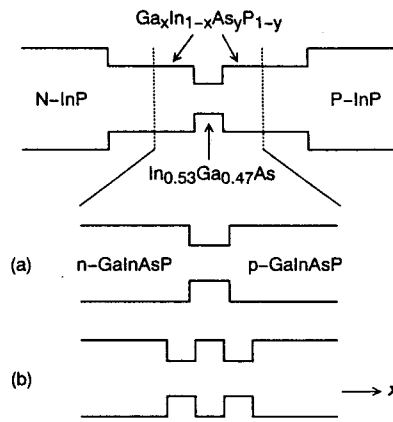


図4.12: SCH 構造量子井戸レーザのシミュレーションモデル。(a) 単一量子井戸構造, (b) 二重量子井戸構造。

シミュレーションモデルとして、図4.12(a) 単一量子井戸構造と (b) 二重量子井戸構造を用いる。SCH 構造量子井戸レーザの輸送特性は、本質的には、量子井戸構造部における電子と正孔の量子輸送によって決まるため、図4.12(a) および (b) のように、量子井戸構造付近の有限の領域で考えることにする。レーザの残りの領域は、古典的なシミュレーションモデルで十分解析できると考えられる。半導体レーザにおいては、常に、電子と正孔がその動作に関与してくるので、両方のキャリアの輸送を同時に取り扱わなくてはならない。ここでは、レーザ発振閾値以下で電子・正孔再結合を無視した時のキャリア輸送について議論するために、電子と正孔に対する次の二つの Liouville 方程式を用いることにする。

電子に対して

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} = -\frac{\hbar k}{m_e^*} \frac{\partial f_e}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V_e(x, k-k') f_e(x, k') - \frac{1}{\tau} \left[f_e(x, k) - f_e^0(x, k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} f_e(x, k') \right] \quad (4.14)$$

正孔に対して

$$\frac{\partial f_h}{\partial t} = -\frac{\hbar k}{m_h^*} \frac{\partial f_h}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V_h(x, k-k') f_h(x, k') - \frac{1}{\tau} \left[f_h(x, k) - f_h^0(x, k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} f_h(x, k') \right] \quad (4.15)$$

ここで

$$V_e(x, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \sin[(k - k')\xi] \left[E_C \left(x + \frac{\xi}{2} \right) - E_C \left(x - \frac{\xi}{2} \right) \right] \quad (4.16)$$

$$V_h(x, k - k') = 2 \int_0^\infty d\xi \sin[(k - k')\xi] \left[E_V \left(x + \frac{\xi}{2} \right) - E_V \left(x - \frac{\xi}{2} \right) \right] \quad (4.17)$$

である。但し、添字 e と h は、それぞれ、電子と正孔を表す。また、 $E_C(x)$ と $E_V(x)$ は、それぞれ伝導帯と価電子帯のエネルギー分布を表している。上式では、電子と正孔の有効質量をデバイス内で一定と仮定している。キャリアの衝突項は緩和時間近似で取り入れている。電子密度 $n(x)$ 、正孔密度 $p(x)$ および電子電流 $j_e(x)$ 、正孔電流 $j_h(x)$ は、それぞれ、次式で与えられる。

$$n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f_e(x, k) \quad , \quad p(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f_h(x, k) \quad (4.18)$$

$$j_e(x) = e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m_e^*} f_e(x, k) \quad , \quad j_h(x) = e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m_h^*} f_h(x, k) \quad (4.19)$$

また、ポアソン方程式は

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -e(\Gamma + p - n) \quad (4.20)$$

と書かれる。Liouville 方程式 (4.14) と (4.15) は、ポアソン方程式 (4.20) と次式の伝導帯および価電子帯エネルギー分布を通じて、互いに関連し合っている。

$$E_C(x) = \chi_e(x) - \chi_e(0) - e[\psi(x) - \psi(0)] \quad (4.21)$$

$$E_V(x) = \chi_e(x) + E_G(x) + e\psi(x) - [\chi_e(0) + E_G(0) + e\psi(0)] \quad (4.22)$$

但し、 χ_e および E_G は、それぞれ半導体材料の電子親和力とエネルギーギャップである。

境界条件は、それぞれ、次のように与える。

電子に対して

$$f_e(0, k) = f_e^l(k) \quad k > 0 \quad , \quad f_e(L, k) = 0 \quad k < 0 \quad (4.23)$$

正孔に対して

$$f_h(0, k) = 0 \quad k > 0 \quad , \quad f_h(L, k) = f_h^r(k) \quad k < 0 \quad (4.24)$$

$$f_{e,h}^{l,r}(k) = \frac{m_{e,h}^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{e,h}^*} - E_{f_{e,h}} \right) \right] \right\} \quad (4.25)$$

但し、肩文字 l, r は、それぞれ、左側および右側電極における値を示す。これらの境界条件は、左側の n-InGaAsP からは電子のみが、右側の p-InGaAsP からは正孔のみがデバイス内に注入されることを表している。一方、ポアソン方程式のポテンシャルに対する境界条件は次式で与えられる。

$$\psi(0) = \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{n(0)}{\omega(0)n_i(0)} \right] \quad , \quad \psi(L) = V_b - \frac{k_B T}{e} \ln \left[\frac{\omega(L)P(L)}{n_i(L)} \right] \quad (4.26)$$

Liouville 方程式 (4.14)、(4.15) およびポアソン方程式 (4.20) を有限差分法を用いて離散化し、自己無撞着な解を得るために、ポテンシャルエネルギーの変化が全デバイス領域において 10meV 以下になるまで繰り返し計算を行うことにする。

4.2.3 定常キャリア分布

まず、図4.12(a)の単一量子井戸構造におけるキャリア輸送を考える。量子井戸層および光ガイド層は、それぞれ、70Åの $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ と175Åの $\text{In}_{0.72}\text{Ga}_{0.28}\text{As}_{0.61}\text{P}_{0.39}$ で構成されているとする。光ガイド層のエネルギーギャップは、波長に換算して、1.3 μm である。温度は300Kで、緩和時間は、電子、正孔ともに0.1psと仮定する。電子と正孔の有効質量はデバイス内で一定とし、それぞれ、 $0.063m_0$ と $0.513m_0$ を与える。ドーピング密度は、光ガイド層で $5 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ とし、量子井戸層はアンドープと仮定する。伝導帯および価電子帯のバンド不連続値 ΔE_C と ΔE_V の比は、 $\Delta E_C : \Delta E_V = 40 : 60$ と仮定して、それぞれ、0.082eV、0.122eVとした。図4.13は、単一量子井戸構造における電子・正孔密度分布と伝導帯・価電子帯エネルギー分布を各バイアス電圧に対して計算した結果を示す。図4.13

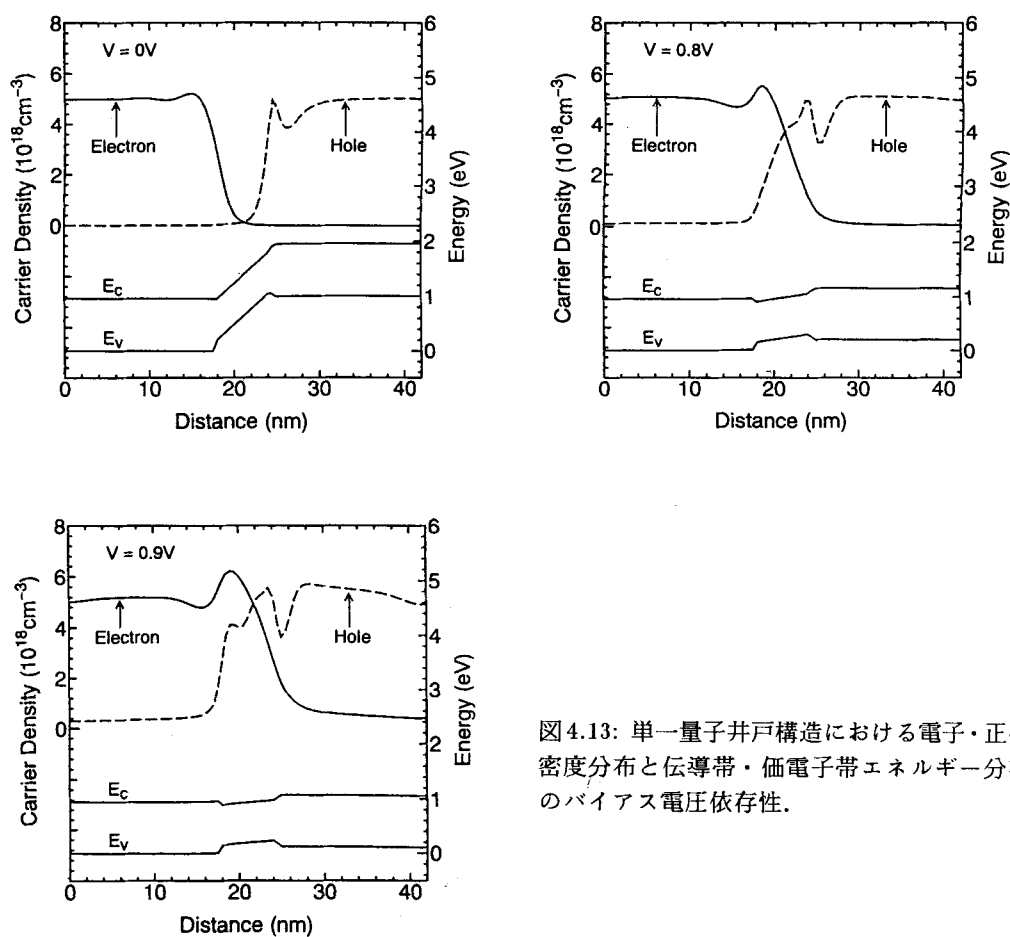


図4.13: 単一量子井戸構造における電子・正孔密度分布と伝導帯・価電子帯エネルギー分布のバイアス電圧依存性.

に示すように、電圧が加わっていない熱平衡状態 ($V=0$) では、量子井戸構造部の大きな内蔵電界のために、電子および正孔ともに井戸内にはほとんど分布していないことが分かる。順バイアス電圧を加えていくと、量子井戸に電子と正孔が注入されていく。量子井戸内の電子密度分布は、電子の有効質量と伝導帯バンド不連続値が小さいために、基底準位のみによる単一のピークが現れているが、正孔密度分布には、複数のピークが現れている。これは、価電子帯ではそのバンド不連続値と正孔の有効質量が大きいために、複数の量子準位が形成されることによる。さらに、そのピークの数バイアス電圧によって変化することに注意されたい。これは、井戸に加わる電界の強さによって、井戸内の量子準位が変化するためである。また、バイアス電圧が増加して量子井戸部のポテンシャル分布がフラットな状態に近付くと、障壁層へのキャリアの漏れが無視できなくなるのが分かる。これは、キャリアが量子井戸に捕獲されずに反対側の InP 層に流れていたり、或いは、一度井戸に捕らえられたキャリアが熱放出によって、井戸から脱出するためと考えられる。量子井戸レーザの利得や変調特性を議論する時には、このような量子準位数の変化やキャリアの漏れを正しく見積る必要があると思われる。

次に、図 4.12(b) の二重量子井戸構造におけるキャリア輸送を考える。二つの量子井戸の幅は 70\AA と固定し、その間の障壁幅は 70\AA と 20\AA の二種類を用いた。その他のパラメータは単一量子井戸構造の場合と同じ値を与えた。図 4.14(a) と (b) は、二重量子井戸構造における電子・正孔密度分布と伝導帯・価電子帯エネルギー分布を各バイアス電圧に対して計算した結果を示す。まず、図 4.14(a) では、熱平衡状態ではほとんど分布していなかったキャリアが、バイアスの増加とともに各井戸に注入されていく様子が分かる。しかし、二つの量子井戸に挟まれた障壁層が 70\AA と厚いために、トンネリングが起こりにくく、電子および正孔ともに二番目の井戸にはあまり分布していない。一方、障壁層を 20\AA と薄くした図 4.14(b) を見ると、特に、有効質量の小さい電子は障壁をトンネルすることができ、比較的均一な電子密度分布が実現されているのが分かる。これに対して、有効質量の大きい正孔は 20\AA と薄い障壁でも十分にトンネルすることができないので、均一な正孔密度分布が得られていない。多重量子井戸構造を用いた量子井戸レーザでは、キャリアが各井戸に均一に分布しているのが望ましいが、図 4.13 および図 4.14 から分かるように、特に正孔に関しては、均一な分布を実現するのが難しい。障壁層を薄くすると、トンネリングが起こり易くなり、二番目以降の井戸により多くの正孔が注入されるようになるが、逆にキャリアの二次元性が弱くなるので、障壁はあまり薄くできない。障壁幅をある程度厚く保った状態で、正孔の均一分布を実現するためには、量子井戸層に歪を加えて正孔の有効質量を小さくすることが有利であると考えられる。近年、歪の入った量子井戸レーザの研究が活発に行われるようになり、その特性が無歪の場合に比べて改善されることが報告されている。このような歪量子井戸レーザのキャリア輸送を解析するには、第三章で定式化したように、有効質量の位置変化を考慮した量子輸送モデルを用いなければならないだろう。

最後に、ウィグナー関数を用いた量子輸送モデルを量子井戸構造半導体レーザの設計技術として確立するためには、本節で議論したキャリアの量子輸送現象だけでなく、電子・正孔再結合過程を取り

入れた新しい輸送モデルの定式化が不可欠であることを付け加えておく。

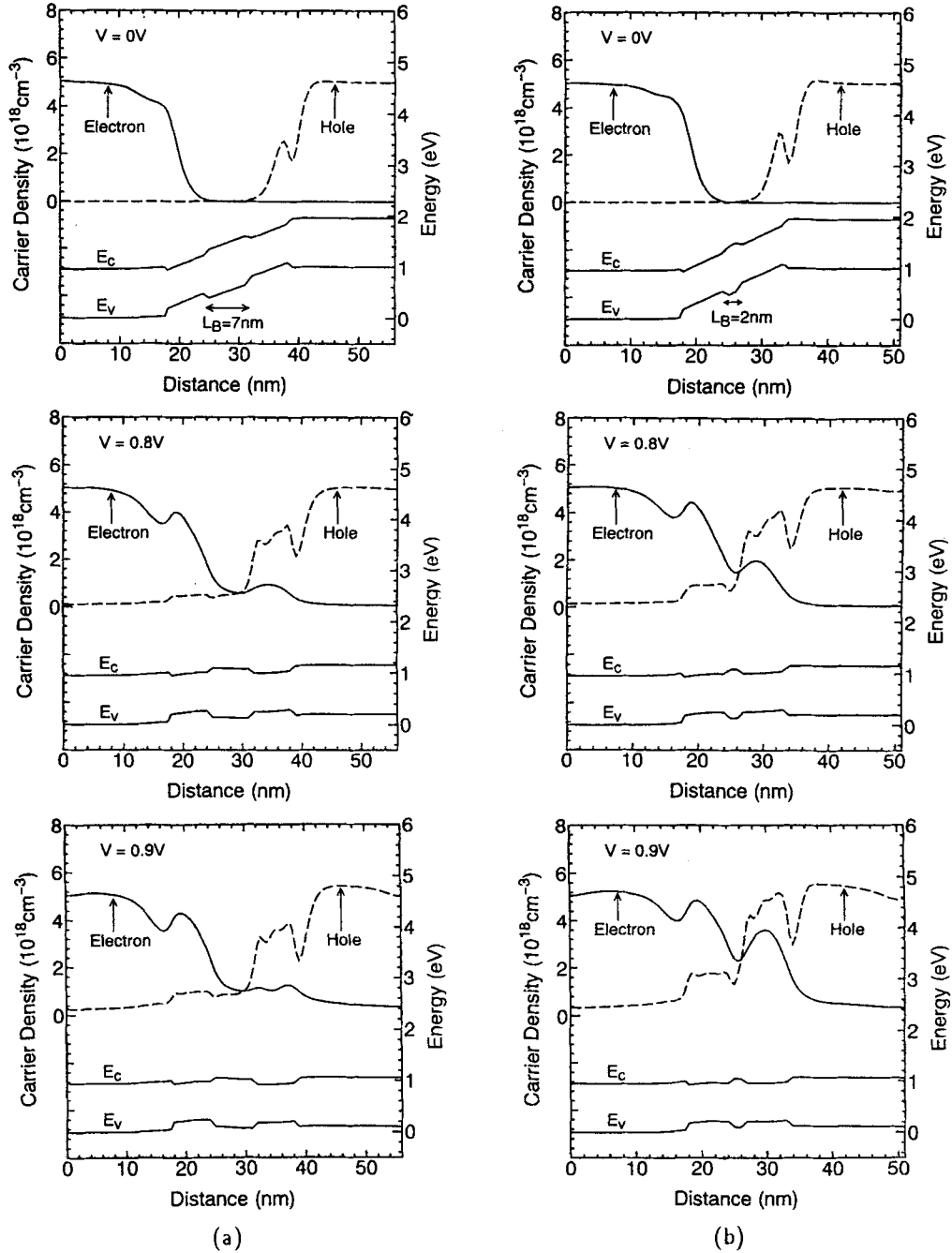


図4.14: 二重量子井戸構造における電子・正孔密度分布と伝導帯・価電子帯エネルギー分布のバイアス電圧依存性. 障壁幅 L_B は, (a)7nm および (b)2nm とした。

Chapter 5

電子導波路の量子輸送モデル

前章までに議論した共鳴トンネルダイオード、長波長アバランシェフォトダイオードおよび量子井戸レーザは、いずれも量子井戸構造を利用したデバイスであり、電子波は伝搬方向の一次元でのみ量子化されている。これから議論する電子導波路(量子細線)は、電子波の伝搬方向に垂直な二方向において量子化されており、電子波は、光波・マイクロ波伝送線路と同様に導波モードのみが伝搬するようになる。これまで、電子導波路のバリスティックな輸送特性の解析には、電子波の透過確率を用いて表現されるランダウア公式が主として用いられてきたが、ダイナミックな輸送特性や散乱過程を含んだ特性を定量的に論じることはできなかった。本章では、量子力学的輸送モデルである Wigner 関数モデルを電子導波路に適用するために、低温で重要になるイオン化不純物散乱の効果を取り入れたモデルの定式化を行い、量子化コンダクタンスにおける散乱の効果や非線形応答特性について検討を行う。

5.1 スプリット・ゲートHEMT構造電子導波路

図 5.1(a) に示す HEMT 構造の GaAs/AlGaAs ヘテロ界面に存在する 2 次元電子ガスを、デバイス上部のスプリット・ゲートに負の電圧を加えて、 y 方向において電氣的に閉じ込めると、図 5.1(b) のように 1 次元電子ガスを形成することができる。スプリット・ゲートの電圧 V_g を負へ下げていくと、 y 方向に対しても量子化が起こるようになり、電子波の 2 次元閉じ込めが可能となる。この 1 次元電子ガスが高移動度 GaAs 層中を x 方向に伝搬するようにしたものをスプリット・ゲート HEMT 構造電子導波路と呼ぶ。現在では、高解像度電子線リソグラフィと MBE 等を用いて、このような電子導波路の作製が可能となっている [63]。このような電子導波路内では、電子波は、光波・マイクロ波伝送線路と同様に導波モードのみが伝搬するようになり、極低温 ($T \simeq 0$) における二端子コンダクタンスは、図 5.2 に示すように導波路幅の関数として量子化されることが知られている [64][65]。図 5.1 の構造を用いると、スプリット・ゲート電極に加える負の電圧を変化させることによって、導波路の幅を制御することができる。

最近では、スプリット・ゲート構造で実現される一次元 constriction 部をインジェクターとして活用しようとする試みが行われ始めている。現在は、電子導波路のデバイスとしての可能性が模索されている段階であるが、今後の研究の進展が期待される。

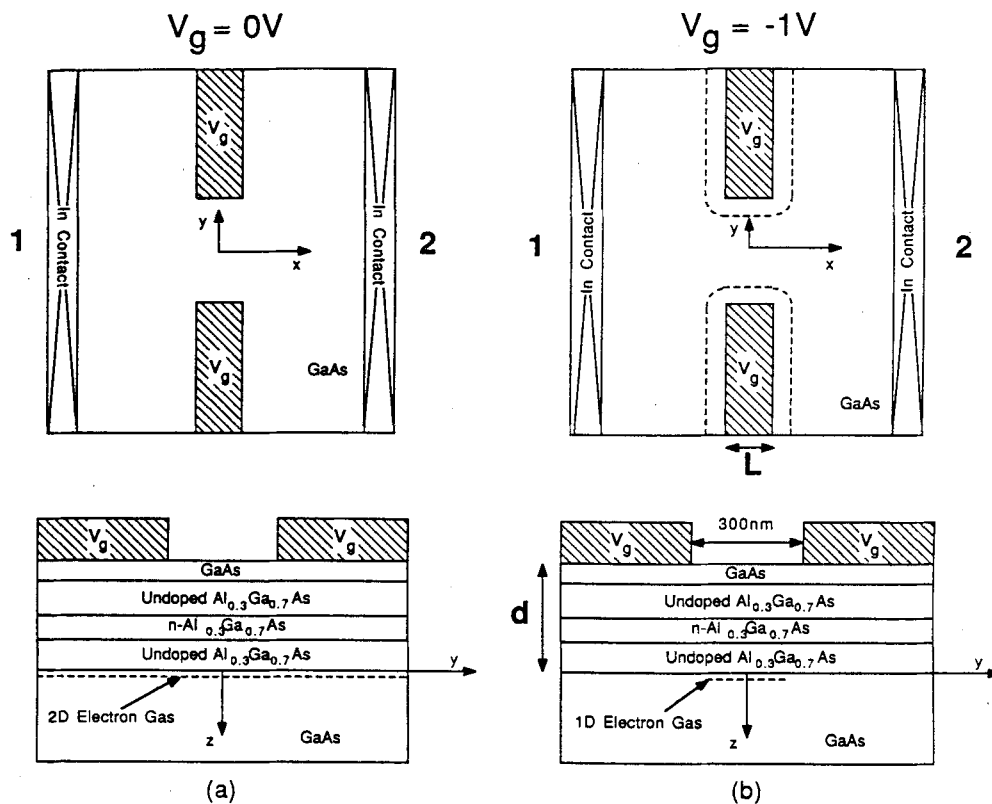


図5.1: スプリット・ゲート HEMT 構造電子導波路。ゲート電圧 V_g は、(a) $V_g = 0$ および (b) $V_g < 0$ である。

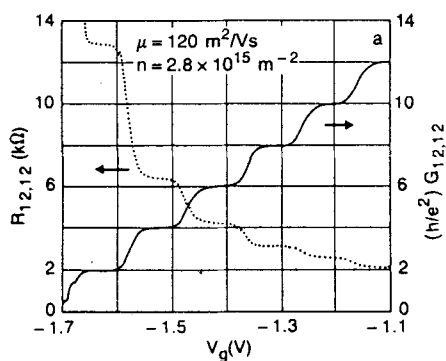


図5.2: 電子導波路におけるコンダクタンスの量子化

5.2 ウィグナー関数モデル

5.2.1 電子導波路における定式化

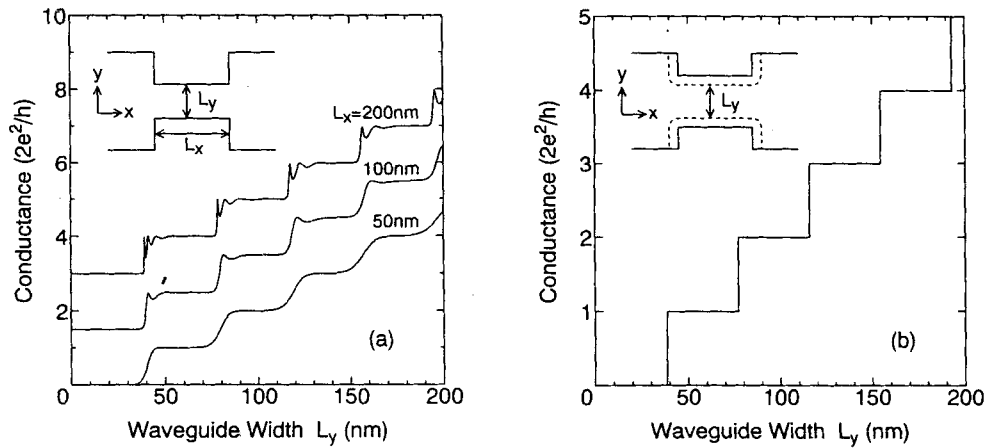


図 5.3: 電子導波路の量子化コンダクタンス。挿入図は、導波路の構造を示している。

スプリット・ゲート HEMT 構造電子導波路は、1次元(1D)constriction 部と2次元(2D)コンタクト部で構成される。この1D constriction と2D コンタクトが不連続に接続されている場合、二つの不連続部に挟まれた constriction 内で起こる電子波の共鳴により、電子導波路の二端子コンダクタンスは図 5.3(a) に示すように振動する [66][67]。図 5.3(a) は、モードマッチング法(付録 H)により計算した二端子コンダクタンスを示している。また、1D constriction の長さが短くなると、2D コンタクト間の電子波のトンネリングによりコンダクタンスのステップがぼやけてくる。これに対して、実験で用いられるスプリット・ゲート構造では、図 5.3(b) に示すように 1D constriction が滑らかに広がりながら 2D コンタクトに接続される。ここでは、constriction の幅が断熱的に変化しており、2D コンタクトでのモード間遷移や反射が全く起こらないと仮定する [68]。さらに、1D constriction が十分長くトンネリングが無視できる時には、図 5.3(b) のように、コンダクタンスは完全なステップ状に量子化されるようになる。今回は、このような理想的な電子導波路をシミュレーションモデルとして用いることにする。

電子導波路における量子輸送モデルの定式化を行うために、図 5.4 の構造を考える。電子波の伝搬方向 x に垂直な y, z 方向の閉じ込めには無限大のポテンシャル障壁を仮定し、深さ方向 (z) には基本モードのみを考慮する。電子導波路両端のコンタクトは、電子が熱平衡分布状態にある reservoir を仮定する。このような電子導波路に対するハミルトニアンは次式のように書かれる。

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + v(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

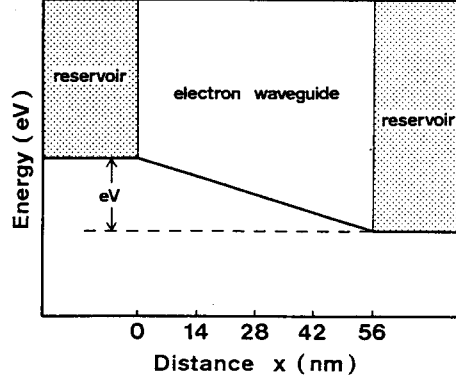


図5.4: 電子導波路のシミュレーションモデル

電子波の伝搬方向には材料の変化がないので、上式において電子導波路内の有効質量 m^* は一定としている。このハミルトニアンを用いると、密度行列の運動方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)}{\partial t} &= \frac{j}{\hbar} [H(\mathbf{r}_1) - H(\mathbf{r}_2)] \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \\ &= \frac{j}{\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_2^2} \right) \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + [v(\mathbf{r}_1) - v(\mathbf{r}_2)] \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \right\} \end{aligned} \quad (5.2)$$

但し、 $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ は座標表示された密度行列で次式で定義される。

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i P(E_i) \varphi_{E_i}(\mathbf{r}_1) \varphi_{E_i}^*(\mathbf{r}_2) \quad (5.3)$$

ここで、変数変換

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (5.4)$$

を行い、重心座標 \mathbf{r} と相対座標 \mathbf{u} と用いると、ウィグナー関数は次式で定義される。

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{u} \rho \left(\mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{u}, \mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{u} \right) e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}} \quad (5.5)$$

ここで、式(5.2)の両辺をフーリエ変換すると、ウィグナー関数に関する3次元のLiouville方程式が、次のように得られる。

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial t} = -\frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}') \quad (5.6)$$

但し

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = -j \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{u} \left[v \left(\mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{u} \right) - v \left(\mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{u} \right) \right] e^{j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{u}} \quad (5.7)$$

である。 y, z 方向の閉じ込めポテンシャルが無有限大の場合、ポテンシャル項(5.7)の u_y, u_z の積分範囲は

$$2|y| - L_y \leq u_y \leq -2|y| + L_y, \quad 2|z| - L_z \leq u_z \leq -2|z| + L_z \quad (5.8)$$

に限られる。但し、 L_y および L_z は、それぞれ導波路の幅と厚さである。この時、式 (5.7) は次のようになる。

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = -j \int_{-\infty}^{\infty} du_x \left[v \left(x + \frac{u_x}{2} \right) - v \left(x - \frac{u_x}{2} \right) \right] e^{j(k_x - k'_x)u_x} \\ \times \int_{2|y|-L_y}^{-2|y|+L_y} du_y e^{j(k_y - k'_y)u_y} \int_{2|z|-L_z}^{-2|z|+L_z} du_z e^{j(k_z - k'_z)u_z} \quad (5.9)$$

ここで

$$\int_{2|y|-L_y}^{-2|y|+L_y} du_y e^{j(k_y - k'_y)u_y} = \frac{1}{j(k_y - k'_y)} \left[e^{j(k_y - k'_y)(L_y - 2|y|)} - e^{-j(k_y - k'_y)(L_y - 2|y|)} \right] \\ = \frac{2 \sin[(k_y - k'_y)(L_y - 2|y|)]}{k_y - k'_y}$$

と計算できるので、式 (5.7) は次式のように表すことができる。

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = -j \frac{2 \sin[(k_y - k'_y)(L_y - 2|y|)]}{k_y - k'_y} \frac{2 \sin[(k_z - k'_z)(L_z - 2|z|)]}{k_z - k'_z} \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} du_x \left[v \left(x + \frac{u_x}{2} \right) - v \left(x - \frac{u_x}{2} \right) \right] e^{j(k_x - k'_x)u_x} \quad (5.10)$$

次に、3次元の Liouville 方程式 (5.6) から一次元の量子輸送方程式を導くために、まず、波動関数 $\varphi_{E_i}(\mathbf{r})$ を横方向の固有関数を用いて

$$\varphi_{E_i}(\mathbf{r}) = \varphi_x(x, K_x) \varphi_y(y, K_y^n) \varphi_z(z, K_z^1) \quad (5.11)$$

と表す。但し

$$\varphi_y(y, K_y^n) = \frac{1}{\sqrt{2L_y}} e^{-\frac{jK_y^n L_y}{2}} \left[e^{jK_y^n(y + \frac{L_y}{2})} - e^{-jK_y^n(y + \frac{L_y}{2})} \right] \quad (5.12)$$

$$\varphi_z(z, K_z^1) = \frac{1}{\sqrt{2L_z}} e^{-\frac{jK_z^1 L_z}{2}} \left[e^{jK_z^1(z + \frac{L_z}{2})} - e^{-jK_z^1(z + \frac{L_z}{2})} \right] \quad (5.13)$$

で与えられる。 $K_y^n = n\pi/L_y$ および $K_z^1 = \pi/L_z$ は、それぞれ y 、 z 方向の量子化された波数である。 n は、幅 (y) 方向のモード番号であり、深さ (z) 方向には基本モードのみを考慮している。この時の密度行列は、式 (5.3) より次のようになる。

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_n \sum_{K_x} P(K_x, K_y^n, K_z^1) \varphi_x(x_1, K_x) \varphi_y(y_1, K_y^n) \varphi_z(z_1, K_z^1) \\ \times \varphi_x^*(x_2, K_x) \varphi_y^*(y_2, K_y^n) \varphi_z^*(z_2, K_z^1) \\ = \frac{1}{4L_y L_z} \sum_n \sum_{K_x} P(K_x, K_y^n, K_z^1) \\ \times \left[e^{jK_z^1(z_1 + \frac{L_z}{2})} - e^{-jK_z^1(z_1 + \frac{L_z}{2})} \right] \left[e^{-jK_z^1(z_2 + \frac{L_z}{2})} - e^{jK_z^1(z_2 + \frac{L_z}{2})} \right] \\ \times \left[e^{jK_y^n(y_1 + \frac{L_y}{2})} - e^{-jK_y^n(y_1 + \frac{L_y}{2})} \right] \left[e^{-jK_y^n(y_2 + \frac{L_y}{2})} - e^{jK_y^n(y_2 + \frac{L_y}{2})} \right] \\ \times \varphi_x(x_1, K_x) \varphi_x^*(x_2, K_x)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4L_y L_z} \sum_n \sum_{K_x} P(K_x, K_y^n, K_z^1) \\
&\quad \times \left[e^{jK_z^1(z_1-z_2)} + e^{-jK_z^1(z_1-z_2)} - e^{jK_z^1 L_z} e^{jK_z^1(z_1+z_2)} - e^{-jK_z^1 L_z} e^{-jK_z^1(z_1+z_2)} \right] \\
&\quad \times \left[e^{jK_y^n(y_1-y_2)} + e^{-jK_y^n(y_1-y_2)} - e^{jK_y^n L_y} e^{jK_y^n(y_1+y_2)} - e^{-jK_y^n L_y} e^{-jK_y^n(y_1+y_2)} \right] \\
&\quad \times \varphi_x(x_1, K_x) \varphi_x^*(x_2, K_x)
\end{aligned} \tag{5.14}$$

ここで、式(5.4)の変数変換を行うと

$$\begin{aligned}
\rho\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{u}}{2}\right) &= \frac{1}{4L_y L_z} \sum_n \sum_{K_x} P(K_x, K_y^n, K_z^1) \\
&\quad \times \left[e^{jK_z^1 u_z} + e^{-jK_z^1 u_z} - e^{jK_z^1(L_z+2z)} - e^{-jK_z^1(L_z+2z)} \right] \\
&\quad \times \left[e^{jK_y^n u_y} + e^{-jK_y^n u_y} - e^{jK_y^n(L_y+2y)} - e^{-jK_y^n(L_y+2y)} \right] \\
&\quad \times \varphi_x\left(x + \frac{u_x}{2}, K_x\right) \varphi_x^*\left(x - \frac{u_x}{2}, K_x\right)
\end{aligned} \tag{5.15}$$

となる。上式を、 \mathbf{u} に関して Fourier 変換すると、ウィグナー関数は次のようになる。

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) &= \int d\mathbf{u} \rho\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{u}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\mathbf{u}}{2}\right) e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}} \\
&= \sum_n \sum_{K_x} P(K_x, K_y^n, K_z^1) f_z^1(z, k_z) f_y^n(y, k_y) \\
&\quad \times \int du_x \varphi_x\left(x + \frac{u_x}{2}, K_x\right) \varphi_x^*\left(x - \frac{u_x}{2}, K_x\right) e^{jk_x u_x}
\end{aligned} \tag{5.16}$$

但し、 y および z 方向に関するウィグナー関数 $f_y^n(y, k_y)$ と $f_z^1(z, k_z)$ は、それぞれ、次のように表される(付録I)。

$$\begin{aligned}
f_y^n(y, k_y) &= \frac{1}{L_y} \left\{ \frac{\sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} + \frac{\sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n} \right. \\
&\quad \left. - 2 \cos[K_y^n(L_y + 2y)] \frac{\sin[k_y(L_y - 2|y|)]}{k_y} \right\}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

$$\begin{aligned}
f_z^1(z, k_z) &= \frac{1}{L_z} \left\{ \frac{\sin[(k_z + K_z^1)(L_z - 2|z|)]}{k_z + K_z^1} + \frac{\sin[(k_z - K_z^1)(L_z - 2|z|)]}{k_z - K_z^1} \right. \\
&\quad \left. - 2 \cos[K_z^1(L_z + z)] \frac{\sin[k_z(L_z - 2|z|)]}{k_z} \right\}
\end{aligned} \tag{5.18}$$

ここで、新たに横方向の波数 k_t で積分した一次元の波数 k_x に関するウィグナー関数 $f_W(\mathbf{r}, k_x)$ を定義する。

$$f_W(\mathbf{r}, k_x) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k}_t f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \tag{5.19}$$

この関数 $f_W(\mathbf{r}, k_x)$ に関する運動方程式を導くために、式(5.6)の両辺を横方向の波数 k_t で積分する。まず、左辺と右辺第一項について計算すると

$$(\text{左辺}) = \frac{\partial f_W(\mathbf{r}, k_x)}{\partial t} \tag{5.20}$$

(右辺第一項)

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{(2\pi)^2} \left\{ -\frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \left[\int d\mathbf{k}_t k_x f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \right] - \frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial}{\partial y} \left[\int d\mathbf{k}_t k_y f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial}{\partial z} \left[\int d\mathbf{k}_t k_z f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \right] \right\} \\
&= \frac{2}{(2\pi)^2} \left\{ -\frac{\hbar k_x}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \left[\int d\mathbf{k}_t f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \right] - \frac{\hbar}{m^*} f_x(x, k_x) \int dk_z f_z^1(z, k_z) \frac{\partial}{\partial y} \left[\int dk_y k_y f_y^n(y, k_y) \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{\hbar}{m^*} f_x(x, k_x) \int dk_y f_y^n(y, k_y) \frac{\partial}{\partial z} \left[\int dk_z k_z f_z^1(z, k_z) \right] \right\} \quad (5.21)
\end{aligned}$$

となる。式(5.21)において

$$\int dk_y k_y f_y^n(y, k_y) = \int dk_z k_z f_z^1(z, k_z) = 0 \quad (5.22)$$

の関係(付録I)を用いると

$$(\text{右辺第一項}) = -\frac{\hbar k_x}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k}_t f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \right] = -\frac{\hbar k_x}{m^*} \frac{\partial f_W(\mathbf{r}, k_x)}{\partial x} \quad (5.23)$$

が得られる。次に、右辺第二項について計算すると

$$(\text{右辺第二項}) = -\frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \underbrace{\left[\int d\mathbf{k}_t V(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \right]}_I f(\mathbf{r}, \mathbf{k}') \quad (5.24)$$

となる。上式の積分 I に式(5.10)を代入すると

$$\begin{aligned}
I &= -j \int du_x \left[v \left(x + \frac{u_x}{2} \right) - v \left(x - \frac{u_x}{2} \right) \right] e^{j(k_x - k'_x)u_x} \\
&\quad \times \underbrace{\int dk_y \frac{2 \sin[(k_y - k'_y)(L_y - 2|y|)]}{k_y - k'_y}}_{= 2\pi} \underbrace{\int dk_z \frac{2 \sin[(k_z - k'_z)(L_z - 2|z|)]}{k_z - k'_z}}_{= 2\pi} \\
&= -j(2\pi)^2 \int du_x \left[v \left(x + \frac{u_x}{2} \right) - v \left(x - \frac{u_x}{2} \right) \right] e^{j(k_x - k'_x)u_x} \quad (5.25)
\end{aligned}$$

となる。従って、右辺第二項は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned}
(\text{右辺第二項}) &= -\frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{k}'}{2\pi} V(x, k_x - k'_x) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}') \\
&= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{dk'_x}{2\pi} V(x, k_x - k'_x) \underbrace{\frac{2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k}'_t f(\mathbf{r}, \mathbf{k}')}_{f_W(\mathbf{r}, k'_x)} \\
&= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{dk'_x}{2\pi} V(x, k_x - k'_x) f_W(\mathbf{r}, k'_x) \quad (5.26)
\end{aligned}$$

但し

$$V(x, k_x - k'_x) = -j \int du_x \left[v \left(x + \frac{u_x}{2} \right) - v \left(x - \frac{u_x}{2} \right) \right] e^{j(k_x - k'_x)u_x} \quad (5.27)$$

である。以上より、 $f_W(\mathbf{r}, k_x)$ に関する次の Liouville 方程式が得られる。

$$\frac{\partial f_W(\mathbf{r}, k_x)}{\partial t} = -\frac{\hbar k_x}{m^*} \cdot \frac{\partial f_W(\mathbf{r}, k_x)}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'_x}{2\pi} V(x, k - k') f_W(\mathbf{r}, k'_x) \quad (5.28)$$

次に、式 (5.16)、(5.17)、(5.18) を式 (5.19) に代入して $f_W(\mathbf{r}, k_x)$ の表現を求める。この時

$$\int dk_z f_z^1(z, k_z) = \frac{1}{L_z} \left\{ 2\pi - 2\pi \cos \left[K_z^1 (L_z^1 + 2z) \right] \right\} = \frac{4\pi}{L_z} \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \quad (5.29)$$

と計算できるので、 $f_W(\mathbf{r}, k_x)$ は

$$\begin{aligned} f_W(\mathbf{r}, k_x) &= \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_n \sum_{K_x} P(K_x, K_y^n, K_z^1) \frac{(4\pi)^2}{L_y L_z} \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] \\ &\quad \times \int du_x \varphi_x \left(x + \frac{u_x}{2}, K_x \right) \varphi_x^* \left(x - \frac{u_x}{2}, K_x \right) e^{jk_x u_x} \\ &= \int du_x \sum_n \sum_{K_x} \frac{8}{L_y L_z} P(K_x, K_y^n, K_z^1) \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] \\ &\quad \times \varphi_x \left(x + \frac{u_x}{2}, K_x \right) \varphi_x^* \left(x - \frac{u_x}{2}, K_x \right) e^{jk_x u_x} \end{aligned} \quad (5.30)$$

と表すことができる。さらに、 $f_W(\mathbf{r}, k_x)$ を y と z で積分した 1 次元の位置 x と波数 k_x に関する分布関数 $F_W(x, k_x)$ を次式のように定義する。

$$F_W(x, k_x) = \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy f_W(\mathbf{r}, k_x) \quad (5.31)$$

この $F_W(x, k_x)$ に関する Liouville 方程式を得るために、式 (5.27) の両辺を y と z で積分すると

$$\boxed{\frac{\partial F_W(x, k_x)}{\partial t} = -\frac{\hbar k_x}{m^*} \cdot \frac{\partial F_W(x, k_x)}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'_x}{2\pi} V(x, k_x - k'_x) F_W(x, k'_x)} \quad (5.32)$$

となり、1 次元の Liouville 方程式が得られる。上式は、3 次元の Liouville 方程式 (5.6) と同じ形をしているが、式 (5.31) で定義した分布関数 $F_W(x, k_x)$ の運動を記述している。このように、理想的な構造を有する電子導波路の場合には、式 (5.32) の一次元の Liouville 方程式を用いて、その量子輸送特性を解析することができる。

5.2.2 イオン化不純物による散乱効果

前節では、電子導波路のバリスティック輸送のみを議論したが、実際のデバイスの特性を論じるには、種々の散乱効果を取り入れる必要がある。特に、電子導波路が動作する極低温においては、イオン化不純物による散乱過程が重要になってくると考えられることから [69]、本節では、イオン化不純物散乱の影響を取り入れた電子導波路のウィグナー関数モデルについて議論する。第 3 章で行ったのと同様に、散乱の効果は Liouville 方程式に現象論的な衝突項を付け加えることによって取り入れる

ことにする。この時、 n 次モードのウイグナー関数 $F_n(x, k_x)$ に関する Liouville 方程式は、5.2.1 節の結果を用いると次式のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_n(x, k_x)}{\partial t} = & -\frac{\hbar k_x}{m^*} \frac{\partial F_n(x, k_x)}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'_x}{2\pi} V(x, k_x - k'_x) F_n(x, k'_x) \\ & - \frac{1}{\langle \tau_n(k_x) \rangle} \left[F_n(x, k_x) - F_n^0(x, k_x) \int dk'_x F_n(x, k'_x) \right] \end{aligned} \quad (5.33)$$

但し、 $F_n^0(x, k_x)$ は、規格化された熱平衡状態の分布関数である。 $\langle \tau_n(k_x) \rangle$ は、 n 次モードの電子に対する緩和時間であり、波数 k_x に関して平均されている。 $\tau_n(k_x)$ は次式で定義される。

$$\frac{1}{\tau_n(k_x)} = \sum_m \frac{L_x}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk'_x W(n, k_x; m, k'_x) \quad (5.34)$$

但し、 L_x は導波路の長さを、 $W(n, k_x; m, k'_x)$ はモード n, m 間の遷移確率を表している。また、導波路を流れる全電流は各モードの電流の和で、次式のように求めることができる。

$$I = \sum_n I_n = \sum_n e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{\hbar k_x}{m^*} F_n(x, k_x) \quad (5.35)$$

次に、緩和時間 $\tau_n(k_x)$ を求めるために、イオン化不純物による電子の遷移確率を議論する。図 5.5

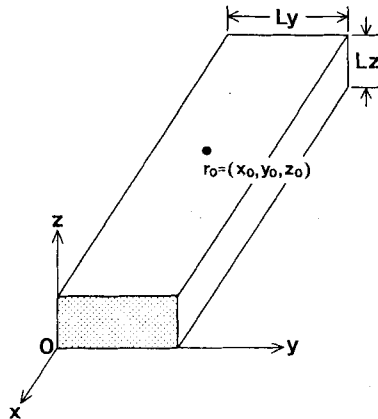


図 5.5: 電子導波路とイオン化不純物

に示すように、点 $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ にある一つのイオン化不純物との衝突による二モード間の遷移確率を考える。イオン化不純物による摂動ハミルトニアンは

$$H' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\lambda) \quad (5.36)$$

と書ける。ここで、 ϵ は媒質の誘電率で、 λ はスクリーニング長である。以下の議論においては、イオン化不純物散乱による遷移確率をボルン近似の範囲で定式化しているために、不純物の電荷の符号に

よる差は生じない。まず、ハミルトニアン (5.36) をフーリエ変換すると次式が得られる (付録 J)。

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} \exp(-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|/\lambda) \exp(j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) = \frac{e^2 \exp(j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0)}{\epsilon q^2 + (1/\lambda)^2} \quad (5.37)$$

上式を逆フーリエ変換すると

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|/\lambda} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} \frac{e^{-j\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}}{q^2 + 1/\lambda^2} \quad (5.38)$$

となり、さらに、遮蔽効果を無視すると ($\lambda \rightarrow \infty$)、 H' は次式のように書くことができる。

$$\begin{aligned} H' &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{q} \frac{\exp[-j\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)]}{q^2} \\ &= \frac{e^2}{8\pi^3\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dq_x \int_{-\infty}^{\infty} dq_y e^{-jq_x(x-x_0)-jq_y(y-y_0)} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{e^{-jq_z(z-z_0)}}{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2} \end{aligned} \quad (5.39)$$

ここで、 $e^{-Q|z-z_0|}$ のフーリエ変換を考える。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-Q|z-z_0|} e^{jqz} &= \int_{z_0}^{\infty} dz e^{-Q|z-z_0|} e^{jqz} + \int_{-\infty}^{z_0} dz e^{Q|z-z_0|} e^{jqz} \\ &= \frac{e^{Qz_0}}{-Q+jq} \left[e^{(-Q+jq)z} \right]_{z_0}^{\infty} + \frac{e^{-Qz_0}}{Q+jq} \left[e^{(Q+jq)z} \right]_{-\infty}^{z_0} \\ &= \frac{e^{Qz_0}}{-Q+jq} [-e^{(-Q+jq)z_0}] + \frac{e^{-Qz_0}}{Q+jq} e^{(Q+jq)z_0} \\ &= e^{jqz_0} \left(\frac{1}{Q-jq} + \frac{1}{Q+jq} \right) = \frac{2Q e^{jqz_0}}{Q^2 + q^2} \end{aligned} \quad (5.40)$$

上式を逆フーリエ変換すると

$$\frac{1}{2\pi} 2Q \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{-jq(z-z_0)}}{Q^2 + q^2} = e^{-Q|z-z_0|} \quad (5.41)$$

が得られる。この関係式を用いて、ハミルトニアン (5.39) を変形する。今、 $\mathbf{Q} = (q_x, q_y)$ 、 $\mathbf{R} = (x, y)$ 、 $\mathbf{R}_0 = (x_0, y_0)$ と定義すると、式 (5.39) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \text{式(5.39)} &= \frac{e^2}{8\pi^3\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{Q} e^{-j\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{e^{-jq_z(z-z_0)}}{Q^2 + q_z^2}}_{\text{式(5.41)を用いる}} \\ &= \frac{e^2}{8\pi^3\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{Q} e^{-j\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} \frac{\pi}{Q} e^{-Q|z-z_0|} \\ &= \frac{e^2}{8\pi^3\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{Q} \frac{1}{Q} e^{-j\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} e^{-Q|z-z_0|} \end{aligned} \quad (5.42)$$

従って、ハミルトニアン (5.39) は次式のように表すことができる。

$$H' = \frac{e^2}{8\pi^2\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{Q} \frac{\exp[-j\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)] \exp(-Q|z-z_0|)}{Q} \quad (5.43)$$

次に、イオン化不純物散乱によるモード n 、 m 間の遷移確率 $W(n, k_x; m, k'_x)$ を計算するために、電子導波路内の電子の波動関数を横方向の固有関数を用いて次のように表す。

$$\psi_{n, k_x}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(-jk_x x) \varphi_n(y) \phi_1(z) \quad (5.44)$$

但し

$$\varphi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_y} y\right) \quad (5.45)$$

$$\phi_1(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi}{L_z} z\right) \quad (5.46)$$

である。ハミルトニアン (5.43) と波動関数 (5.44) を用いると、行列要素 $M(n, k_x; m, k'_x)$ は

$$\begin{aligned} M(n, k_x; m, k'_x) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \psi_{m, k'_x}^*(d\mathbf{r}) H' \psi_{n, k_x}(d\mathbf{r}) \\ &= \frac{e^z}{8\pi^2 \varepsilon L_x} \int_{-\infty}^{\infty} dQ \frac{1}{Q} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{jq_x x_0} e^{j(k'_x - q_x - k_x)x} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dy \varphi_m(y) \varphi_n(y) e^{-jq_y(y-y_0)} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_1^2(z) e^{-Q|z-z_0|} dz \end{aligned} \quad (5.47)$$

となる。ここで

$$\varphi_{mn}(q_y, y_0) = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \varphi_m(y) \varphi_n(y) e^{-jq_y(y-y_0)} \quad (5.48)$$

$$\phi_{11}(q_x, q_y, z_0) = \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \phi_1^2(z) e^{-Q|z-z_0|} \quad (5.49)$$

とにおいて、さらに次の関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{j(k'_x - q_x - k_x)x} = 2\pi \delta(k'_x - q_x - k_x) \quad (5.50)$$

を用いると

$$\begin{aligned} M(n, k_x; m, k'_x) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \psi_{m, k'_x}^*(\mathbf{r}) H' \psi_{n, k_x}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{e^2 \exp[j(k'_x - k_x)x_0]}{4\pi \varepsilon L_x} \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}(k'_x - k_x, q_y, z_0)}{\sqrt{(k'_x - k_x)^2 + q_y^2}} \end{aligned} \quad (5.51)$$

が得られる。この時、ボルン近似を用いると遷移確率 $W(n, k_x; m, k'_x)$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} W(n, k_x; m, k'_x) &= \frac{2\pi}{\hbar} |M(n, k_x; m, k'_x)|^2 \delta(E_{m, k'_x} - E_{n, k_x}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e^2}{4\pi \varepsilon L_x} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}(k'_x - k_x, q_y, z_0)}{\sqrt{(k'_x - k_x)^2 + q_y^2}} \right|^2 \\ &\quad \times \delta(E_{m, k'_x} - E_{n, k_x}) \end{aligned} \quad (5.52)$$

ここで、 E_{n,k_x} および E_{m,k'_x} は、それぞれ始状態および終状態の電子エネルギーであり、それぞれ次式で与えられる。

$$E_{m,k'_x} = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{m\pi}{Ly} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{Lz} \right)^2, \quad E_{n,k_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{Ly} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{Lz} \right)^2 \quad (5.53)$$

この遷移確率 (5.52) を式 (5.34) に代入し、 $y-z$ 面における単位長当りの不純物密度分布 $N_D(y_0, z_0)$ を考慮すると、緩和時間は次式のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_n(k_x)} &= \sum_m \frac{L_x}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dy_0 dz_0 N_D(y_0, z_0) L_x \int_{-\infty}^{\infty} dk'_x W(n, k_x; m, k'_x) \\ &= \sum_m \frac{1}{\hbar} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy_0 dz_0 N_D(y_0, z_0) \\ &\quad \times \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dk'_x \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}(k'_x - k_x, q_y, z_0)}{\sqrt{(k'_x - k_x)^2 + q_y^2}} \right|^2}_{A} \delta(E_{m,k'_x} - E_{n,k_x}) \quad (5.54) \end{aligned}$$

ここで、 A の積分をエネルギー E'_x に変換する。

$$E'_x = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2m^*} \quad \text{より} \quad dk'_x = \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar \sqrt{2E'_x}} dE'_x$$

となるから

$$\begin{aligned} A &= \int_{-\infty}^{\infty} dE'_x \frac{\sqrt{m^*}/\hbar}{\sqrt{2E'_x}} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}(\pm\sqrt{2m^*E'_x}/\hbar - k_x, q_y, z_0)}{\sqrt{(\pm\sqrt{2m^*E'_x}/\hbar - k_x)^2 + q_y^2}} \right| \delta(E_{m,k'_x} - E_{n,k_x}) \\ &= \frac{\sqrt{m^*}/\hbar}{\sqrt{2(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}(-\sqrt{2m^*(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}/\hbar - k_x, q_y, z_0)}{\sqrt{(-\sqrt{2m^*(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}/\hbar - k_x)^2 + q_y^2}} \right|^2 \end{aligned}$$

と計算できる。但し、初期状態と逆の方向への遷移のみが電子波の伝搬特性に影響を及ぼすので、エネルギー保存を与える δ 関数の条件の中、終状態の波数が初期状態と反対の符号である $-k'_x$ のみを考慮した。これを式 (5.54) に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_n(k_x)} &= \sum_m \frac{e^4 \sqrt{m^*}}{16\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}} \int_{-\infty}^{\infty} dy_0 dz_0 N_D(y_0, z_0) \\ &\quad \times \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}(-\sqrt{2m^*(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}/\hbar - k_x, q_y, z_0)}{\sqrt{(-\sqrt{2m^*(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}/\hbar - k_x)^2 + q_y^2}} \right|^2 \quad (5.55) \end{aligned}$$

となる。さらに

$$\frac{1}{\sqrt{2(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}} = \frac{1}{\sqrt{2 \frac{\hbar^2}{2m^*} [k_x^2 + (\frac{n\pi}{Ly})^2 - (\frac{m\pi}{Ly})^2]}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{k_x^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (n^2 - m^2)}} \\
\frac{\sqrt{2m^*(E_{k_x} + E_y^n - E_y^m)}}{\hbar} &= \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left\{ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2 - \left(\frac{m\pi}{L_y}\right)^2 \right] \right\}} \\
&= \sqrt{k_x^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (n^2 - m^2)}
\end{aligned}$$

と変形すると、 n 次モードの電子に対する緩和時間は、最終的に次式のように表される。

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau_n(k_x)} &= \sum_m \frac{e^4 m^*}{16\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{k_x^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (n^2 - m^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} dy_0 dz_0 N_D(y_0, z_0) \\
&\times \left| \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \frac{\varphi_{mn}(q_y, y_0) \phi_{11}\left(-\sqrt{k_x^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (n^2 - m^2)} - k_x, q_y, z_0\right)}{\sqrt{\left(-\sqrt{k_x^2 + \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 (n^2 - m^2)} - k_x\right)^2 + q_y^2}} \right|^2 \quad (5.56)
\end{aligned}$$

上式を用いて種々のイオン化不純物分布に対する電子波の緩和時間を計算し、その値を Liouville 方程式 (5.33) の衝突項に用いることによって、電子導波路の量子輸送特性におけるイオン化不純物散乱の効果を取り入れることができる。

5.2.3 境界条件と離散化

電子導波路の両端に接続されている reservoir 内では、電子波が熱平衡分布状態をとると仮定して、伝搬 (x) 方向の波動関数を平面波で表すことにする。

$$\varphi_x(x, K_x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-jK_x x} \quad (5.57)$$

但し、 L は規格化定数である。上式を式 (5.30) に代入して、さらに、reservoir 内での状態の占有確率 $P(E_i)$ を Fermi-Dirac 分布関数で与えると

$$\begin{aligned}
f_W(0, y, z, k_x) &= f_W(L_x, y, z, k_x) \\
&= \int du_x \sum_{K_x} \frac{1}{L} \sum_n \frac{8}{L_y L_z} f_{FD}(K_x, K_y^n, K_z^1) \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \\
&\quad \times \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] e^{j(k_x - K_x)u_x} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int dK_x \sum_n \frac{8}{L_y L_z} f_{FD}(K_x, K_y^n, K_z^1) \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \\
&\quad \times \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] \underbrace{\int du_x e^{j(k_x - K_x)u_x}}_{2\pi \delta(k_x - K_x)}
\end{aligned}$$

$$= \sum_n \frac{8}{L_y L_z} f_{FD}(K_x, K_y^n, K_z^1) \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] \quad (5.58)$$

となる。上式を、さらに y と z で積分すると

$$\begin{aligned} F_W(0, k_x) &= F_W(L_x, k_x) \\ &= \sum_n \frac{8}{L_y L_z} f_{FD}(k_x, K_y^n, K_z^1) \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \\ &\quad \times \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.59)$$

となる。上式中の積分は次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \int_{-L_z/2}^{L_z/2} dz \sin^2 \left[K_z^1 \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] &= \frac{1}{2} \int dz \{ 1 - \cos [K_z^1(2z + L_z)] \} \\ &= \frac{1}{2} \left[z - \frac{1}{2K_z^1} \sin \{ K_z^1(2z + L_z) \} \right]_{-L_z/2}^{L_z/2} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ L_z - \frac{1}{2K_z^1} [\sin(2K_z^1 L_z) - \sin 0] \right\} = \frac{L_z}{2} \end{aligned} \quad (5.60)$$

y 方向に関しても同様に

$$\int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \sin^2 \left[K_y^n \left(y + \frac{L_y}{2} \right) \right] = \frac{L_y}{2} \quad (5.61)$$

と計算できる。従って、reservoir 内での Wigner 関数は、次式のように Fermi-Dirac 分布関数で表されることが分かる。

$$F_W(0, k_x) = F_W(L_x, k_x) = \sum_2 2f_{FD}(k_x, K_y^n, K_z^1) \quad (5.62)$$

$K_y^n = n\pi/L_y$ および $K_z^1 = \pi/L_z$ は、それぞれ、 y および z 方向の量子化された波数を表し、2 はスピンのから生じたものである。上式より、Liouville 方程式の境界条件を次のように与えることにする。

$$F_W(0, k_x) = 2f_{FD}(k_x, K_y^n, K_z^1) \quad , \quad k_x > 0 \quad (5.63)$$

$$F_W(L_x, k_x) = 2f_{FD}(k_x, K_y^n, K_z^1) \quad , \quad k_x < 0 \quad (5.64)$$

次に、Liouville 方程式の離散化について議論する。Liouville 方程式 (5.33) は、有限差分法を用いて数値的に解かれるが、その結果は数値解析の手法に大きく依存する。本来、離散化された Liouville 方程式は、Liouville 方程式だけでなく、それから導かれるモーメント方程式の解析的表現にも一致しなければならない。ここでは、そのような条件により近付くことができるように、離散化の際に重み関数を導入することにする [11]。また、衝突項は、Liouville 方程式とモーメント方程式の対応において本質的な役割を果たさないのので、ここでは衝突項を無視して議論する。二次までのモーメント方程式は、式 (2.124)、(2.126) および (2.128) より、次のように与えられる。

$$\frac{\partial n(x)}{\partial t} + \frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial x} = 0 \quad \langle \text{連続の式(0次)} \rangle \quad (5.65)$$

$$\hbar \frac{\partial \langle k_x \rangle}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\partial \langle k_x^2 \rangle}{\partial x} + \frac{dv(x)}{dx} n(x) = 0 \quad \langle \text{運動量保存(一次)} \rangle \quad (5.66)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \langle k_x^2 \rangle}{\partial t} + \frac{\hbar^3}{2m^{*2}} \frac{\partial \langle k_x^3 \rangle}{\partial x} + \frac{\hbar \langle k_x \rangle}{m^*} \frac{dv(x)}{dx} = 0 \quad \langle \text{エネルギー保存(二次)} \rangle \quad (5.67)$$

但し

$$n(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk_x F_n(x, k_x) \quad , \quad \langle k_x \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk_x k_x F_n(x, k_x) \quad (5.68)$$

$$\langle k_x^2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk_x k_x^2 F_n(x, k_x) \quad , \quad \langle k_x^3 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk_x k_x^3 F_n(x, k_x) \quad (5.69)$$

と定義している。上式は、運動量ではなく波数 k_x についてのモーメントで表されている。まず、従来の離散化の場合には、一次および二次の離散化モーメント方程式を満たさないことを示す。従来の離散化に従うと、Liouville 方程式は次式のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_n}{\partial t} = & -\frac{\hbar k_x}{m^*} \frac{1}{\Delta x} \left\{ \begin{array}{l} F_n(x + \Delta x, k_x) - F_n(x, k_x), \quad k_x > 0 \\ F_n(x, k_x) - F_n(x - \Delta x, k_x), \quad k_x < 0 \end{array} \right\} \\ & - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{\{k'_x\}} \sum_{n=0}^{N_\xi} \sin [(k_x - k'_x) 2n\Delta x] [v(x + n\Delta x) - v(x - n\Delta x)] F_n(x, k'_x) \end{aligned} \quad (5.70)$$

波数 k_x は

$$k_x^m = \left(m - \frac{1}{2} - \frac{N_k}{2} \right) \Delta_k \quad (m = 1, 2, \dots, N_k) \quad (5.71)$$

と離散化する。式 (5.70) の両辺を波数 k_x で和を取ると、連続の式 (5.65) を離散化した式が得られることは、第 3 で議論した。ここでは、高次のモーメント方程式について考える。式 (5.70) の両辺に k_x を掛けて波数で和を取ると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^m F_n \Delta_k = & -\frac{\hbar}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^{m2} F_n(x, k_x^m) \Delta_k - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{n=1}^{N_\xi} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{m=1}^{N_k} k_m \sin \left[(m-p) \frac{2n\pi}{N_k} \right] \\ & \times [v(x + n\Delta x) - v(x - n\Delta x)] F_n(x, k_x^p) \Delta_k \end{aligned} \quad (5.72)$$

となる。上式第二項のポテンシャルの部分において、 $n=1$ の場合には、 $[v(x + n\Delta x) - v(x - n\Delta x)]$ という項が出て来る。これは、式 (5.66) の $dv(x)/dx$ に対応する項と考えられるが、完全には一致していない。さらに、 $n=2, 3, \dots, N_\xi$ の項もあるので、明らかに式 (5.72) は式 (5.66) を離散化した式と同じ形にならないことが分かる。同様に、式 (5.70) の両辺に k_x^2 を掛けて波数で和を取った場合にも、式 (5.67) を離散化したものと同じ形は得られないことが示される。従って、式 (5.70) の従来の離散化では、連続の式のみが満たされていることが分かる。そこで、式 (5.70) のポテンシャル項に、次のような重み関数を掛けることにする [11]。

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial F_n}{\partial t} = & -\frac{\hbar k_x^m}{m^*} \frac{\partial F_n(x, k_x^m)}{\partial x} \\ & - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{p=1}^{N_k} \frac{\sin \left(2\pi \frac{m-p}{N_k} \right)}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} \times \left\{ \begin{array}{l} 1 \quad , \text{if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0 \quad , \text{if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{array} \right\} \end{aligned}}$$

$$\times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(2n\pi \frac{m-p}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^p) \Delta_k \quad (5.73)$$

上式から導かれる離散化されたモーメント方程式が、式(5.65)～(5.67)の形に近付くことを示す。まず、式(5.73)の両辺を波数で和を取ると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^m}{m^*} F_n \Delta_k \\ &\quad - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\sin\left(2\pi \frac{m-p}{N_k}\right)}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} \times \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0, \text{ if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{array} \right\} \\ &\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(2n\pi \frac{m-p}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^p) \Delta_k \end{aligned} \quad (5.74)$$

となる。さらに、 $q = m - p$ とすると次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^m}{m^*} F_n \Delta_k \\ &\quad - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{q=1-p}^{N_k-p} \frac{\sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right)}{\frac{2\pi q}{N_k}} \times \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ if } |q| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0, \text{ if } |q| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{array} \right\} \\ &\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^{m-q}) \Delta_k \end{aligned} \quad (5.75)$$

ここで、 $\sum_{q=1-p}^{N_k-p}$ の項に注目する。上式の中で q に関連する項は次のようになる。

$$\sum_{q=1-p}^{N_k-p} \frac{\sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right)}{\frac{2\pi q}{N_k}} \times \underbrace{\left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ if } |q| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0, \text{ if } |q| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{array} \right\}}_A \quad (5.76)$$

これは、 q の奇関数となっているのが分かる。 q の範囲は、 $q = \{1-p, \dots, 0, \dots, N_k-p\}$ であるが、 A の部分によって上式は $q = 0$ を挟んで正負に同じ範囲だけに値を持つようになる。従って、上式は常に零になる。その結果、式(5.75)は、次の離散化された連続の式になる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} F_n \Delta_k = -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^m}{m^*} F_n \Delta_k \quad (5.77)$$

次に、式(5.73)の両辺に k_x^m を掛けて波数で和を取る。

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^m F_n \Delta_k$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m2}}{m^*} F_n \Delta_k \\
&\quad - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{m=1}^{N_k} \underbrace{\frac{k_x^m}{2\pi \frac{m-p}{N_k}}}_{B} \sin\left(2\pi \frac{m-p}{N_k}\right) \times \begin{cases} 1 & , \text{if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0 & , \text{if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{cases} \\
&\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(2n\pi \frac{m-p}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^p) \Delta_k \quad (5.78)
\end{aligned}$$

ここで、 B の部分は

$$B = \frac{k_x^m}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} = \frac{\left(m - \frac{1}{2} - \frac{N_k}{2}\right) \Delta_k}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} = \frac{N_k \Delta_k}{2\pi} \left[1 + \frac{p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k}{m-p}\right] \quad (5.79)$$

と変形できるから、 $q = m - p$ とすると式(5.78)は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^m F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m2}}{m^*} F_n \Delta_k \\
&\quad - \frac{2}{\hbar N_k} \frac{N_k \Delta_k}{2\pi} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{q=1-p}^{N_k-p} \left[1 + \frac{p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k}{q}\right] \sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \\
&\quad \times \begin{cases} 1 & , \text{if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0 & , \text{if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{cases} \\
&\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^{m-q}) \Delta_k \quad (5.80)
\end{aligned}$$

ここで、 $\frac{p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k}{q}$ が関連する和は、先程と同様に零になることを用いると、式(5.80)は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^m F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m2}}{m^*} F_n \Delta_k \\
&\quad - \frac{2\Delta_k}{\pi \hbar} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{q>0}^{N_q} \sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \times \begin{cases} 1 & , \text{if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0 & , \text{if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{cases} \\
&\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^{m-q}) \Delta_k \quad (5.81)
\end{aligned}$$

但し、 $N_q = \min(|p-1|, |p-N_k|)$ を表す。上式において、 $\sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right)$ の項が q に関して偶関数になることを利用して、 $q > 0$ のみで和を取るようにした。ここで、式(5.81)において、 $k_x^m \simeq 0$ の場合を考える。この時

$$\sum_{q>0}^{N_q} \sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right) \simeq \sum_{q=1}^{N_k/2} \sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{q=1}^{N_k/2} \left\{ \cos \left[\frac{2\pi(n-1)q}{N_k} \right] - \cos \left[\frac{2\pi(n+1)q}{N_k} \right] \right\} \quad (5.82)$$

と近似できる。さらに、上式は、 $n=1$ 以外では零になるので

$$\sum_{q>0}^{N_k} \sin \left(\frac{2\pi q}{N_k} \right) \sin \left(\frac{2n\pi q}{N_k} \right) \simeq \begin{cases} \frac{N_k}{4} & , n=1 \\ 0 & , n>1 \end{cases} \quad (5.83)$$

とすることができる。上式を、式(5.81)に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^m F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^m}{m^*} F_n \Delta_k \\ &\quad - \frac{2N_k \Delta_k}{4\pi\hbar} [v(x+\Delta_x) - v(x-\Delta_x)] \sum_{p=1}^{N_k} F_n(x, k_x^{m-p}) \Delta_k \end{aligned} \quad (5.84)$$

となり、さらに、 $N_k \Delta_k = \pi/\Delta_x$ の関係を用いると次式が得られる。

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^m F_n \Delta_k = -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar^2 k_x^m}{m^*} F_n \Delta_k - \frac{v(x+\Delta_x) - v(x-\Delta_x)}{2\Delta_x} \sum_{p=1}^{N_k} F_n(x, k_x^{m-p}) \Delta_k \quad (5.85)$$

上式は、一次のモーメント方程式(5.66)を離散化したものと同じ形をしていることが分かる。

次に、式(5.73)の両辺に k_x^{m2} を掛けて波数で和を取る。

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^{m2} F_n \Delta_k \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m3}}{m^*} F_n \Delta_k \\ &\quad - \frac{2}{\hbar N_k} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{m=1}^{N_k} \underbrace{\frac{k_x^{m2}}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} \sin \left(2\pi \frac{m-p}{N_k} \right)}_C \times \begin{cases} 1 & , \text{if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0 & , \text{if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{cases} \\ &\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin \left(2n\pi \frac{m-p}{N_k} \right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^p) \Delta_k \end{aligned} \quad (5.86)$$

ここで

$$\begin{aligned} C &= \frac{k_x^{m2}}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} = \frac{\left(m - \frac{1}{2} - \frac{N_k}{2}\right)^2 \Delta_k^2}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} = \frac{N_k \Delta_k^2}{2\pi} \frac{\left[m-p + \left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}N_k\right)\right]^2}{m-p} \\ &= \frac{N_k \Delta_k^2}{2\pi} \left[m-p + 2\left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}N_k\right) + \frac{\left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}N_k\right)^2}{m-p} \right] \end{aligned} \quad (5.87)$$

と変形できるから、 $q = m-p$ とすると式(5.86)は次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^{m2} F_n \Delta_k \\
&= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m3}}{m^*} F_n \Delta_k \\
&\quad - \frac{2}{\hbar N_k} \frac{N_k \Delta_k^2}{2\pi} \sum_{p=1}^{N_k} \sum_{q=1-p}^{N_k-p} \left\{ q + \frac{\left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k\right)^2}{q} + 2 \left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k\right) \right\} \sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \\
&\quad \times \begin{cases} 1, & \text{if } |q| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0, & \text{if } |q| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{cases} \\
&\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^{m-q}) \Delta_k \quad (5.88)
\end{aligned}$$

ここで、 $q + \frac{\left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k\right)^2}{q}$ が関連する和は、先程と同様に零になることを用いると、式(5.88)は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^{m2} F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m3}}{m^*} F_n \Delta_k - \frac{2N_k \Delta_k}{\pi \hbar} \sum_{p=1}^{N_k} \underbrace{2 \left(p - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} N_k\right)}_{k_p} \Delta_k \sum_{q>0}^{N_q} \sin\left(\frac{2\pi q}{N_k}\right) \\
&\quad \times \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(\frac{2n\pi q}{N_k}\right) [v(x+n\Delta_x) - v(x-n\Delta_x)] F_n(x, k_x^{m-q}) \Delta_k \quad (5.89)
\end{aligned}$$

上式において、 $k_x^m \simeq 0$ の場合を考えて式(5.83)を用いると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^{m2} F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar k_x^{m3}}{m^*} F_n \Delta_k \\
&\quad - \frac{1}{\hbar \Delta_x} [v(x+\Delta_x) - v(x-\Delta_x)] \sum_{p=1}^{N_k} k_p F_n(x, k_x^p) \Delta_k \quad (5.90)
\end{aligned}$$

となる。さらに、上式の両辺に $\hbar^2/2m^*$ を掛けると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{N_k} k_x^{m2} F_n \Delta_k &= -\frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=1}^{N_k} \frac{\hbar^3 k_x^{m3}}{2m^{*2}} F_n \Delta_k \\
&\quad - \frac{v(x+\Delta_x) - v(x-\Delta_x)}{2\Delta_x} \frac{\hbar}{m^*} \sum_{p=1}^{N_k} k_p F_n(x, k_x^p) \Delta_k \quad (5.91)
\end{aligned}$$

上式は、二次のモーメント方程式(5.67)を離散化したものと同じ形をしている。このように、式(5.73)で導入した重み関数を用いると、 $k_x \simeq 0$ にウィグナー関数が局在している場合には、連続の式だけでなく一次および二次のモーメント方程式に関しても、充分良い近似になっていることが分かる。

次に、この重み関数を含む離散化された Liouville 方程式と、元の Liouville 方程式の解析的表現との対応を考える。簡単のために、ポテンシャル $v(x)$ が線形的に変化する場合を考える。

$$v(x) = ax \quad (5.92)$$

これを Liouville 方程式 (5.33) に代入すると

$$\frac{\partial F_n}{\partial t} = -\frac{\hbar k_x}{m^*} \frac{\partial F_n(x, k_x)}{\partial x} + \frac{a}{\hbar} \frac{\partial F_n(x, k_x)}{\partial k_x} \quad (5.93)$$

となる。一方、離散化した式のポテンシャル項は $v(x + n\Delta_x) - v(x - n\Delta_x) = 2n\Delta_x a$ となるので、上式を離散化した Liouville 方程式 (5.73) に代入すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_n}{\partial t} = & -\frac{\hbar k_x^m}{m^*} \frac{\partial F_n(x, k_x^m)}{\partial x} \\ & -\frac{2}{\hbar N_k} \sum_{p=1}^{N_k} \frac{\sin\left(\frac{2\pi m-p}{N_k}\right)}{2\pi \frac{m-p}{N_k}} \times \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ if } |m-p| \leq \min(|p-1|, |p-N_k|) \\ 0, \text{ if } |m-p| > \min(|p-1|, |p-N_k|) \end{array} \right\} \\ & \times 2a\Delta_x \sum_{n=1}^{N_u} \sin\left(2n\pi \frac{m-p}{N_k}\right) F_n(x, k_x^p) \Delta_k \end{aligned} \quad (5.94)$$

上式の右辺第二項に式 (5.93) のような $\partial F_n / \partial k_x$ に相当する形が現れるためには、 $m-p = \pm 1$ のみが含まれて、 $|m-p| > 1$ の項は消えなければならない。以下で、その条件を求めることにする。

まず、 $m-p = \pm 1$ の項について調べる。式 (5.94) の右辺第二項の $p = m \pm 1$ の成分 $(P.T.)_{m+1}$ と $(P.T.)_{m-1}$ は、それぞれ、次のようになる。

$$\begin{aligned} (P.T.)_{m+1} &= \frac{-2}{\hbar N_k} \left(-\frac{N_k}{2\pi}\right) \underbrace{\sin\left(-\frac{2\pi}{N_k}\right)}_{\simeq -2\pi/N_k} 2a\Delta_x \sum_{n=1}^{N_u} n \sin\left(-\frac{2n\pi}{N_k}\right) F_n(x, k_{m+1}) \\ &\simeq \frac{2}{\hbar N_k} \frac{N_k}{2\pi} \frac{2\pi}{N_k} 2a\Delta_x \sum_{n=1}^{N_u} n \sin\left(\frac{2n\pi}{N_k}\right) F_n(x, k_{m+1}) \\ &= \frac{4\pi a}{\hbar N_k^2 \Delta_k} \sum_{n=1}^{N_u} n \sin\left(\frac{2n\pi}{N_k}\right) F_n(x, k_{m+1}) \quad (m = 1, 2, \dots, N_k - 2) \end{aligned} \quad (5.95)$$

ここで、 $\Delta_x = \pi/N_k \Delta_k$ を用いた。上式の $\sum_{n=1}^{N_u}$ を積分で置き換えると

$$\sum_{n=1}^{N_u} n \sin\left(\frac{2n\pi}{N_k}\right) \simeq \int_0^{N_u} dn n \sin\left(\frac{2n\pi}{N_k}\right) = \left(\frac{N_k}{2\pi}\right)^2 \int_0^{2\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (5.96)$$

となるので、これを式 (5.95) に代入すると

$$(P.T.)_{m+1} \simeq \frac{a}{\pi \hbar \Delta_k} F_n(x, k_{m+1}) \int_0^{2\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (m = 1, 2, \dots, N_k - 2) \quad (5.97)$$

が得られる。同様にして

$$(P.T.)_{m-1} \simeq \frac{-a}{\pi \hbar \Delta_k} F_n(x, k_{m-1}) \int_0^{2\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (m = 3, 4, \dots, N_k) \quad (5.98)$$

が得られる。これら二式を加えると

$$(P.T.)_{m+1} + (P.T.)_{m-1} \simeq \frac{a}{\pi \hbar} \frac{F_n(x, k_{m+1}) - F_n(x, k_{m-1})}{\Delta_k} \int_0^{2\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (5.99)$$

$(m = 3, 4, \dots, N_k - 2)$

となる。次に、 $m - p = \pm 2$ の項について調べる。

$$\begin{aligned} (P.T.)_{m+2} &= \frac{-2}{\hbar N_k} \left(-\frac{N_k}{4\pi} \right) \sin \left(-\frac{4\pi}{N_k} \right) 2a \Delta_x \sum_{n=1}^{N_u} n \sin \left(-\frac{4n\pi}{N_k} \right) F_n(x, k_{m+2}) \\ &\simeq \frac{4\pi a}{\hbar N_k^2 \Delta_k} \sum_{n=1}^{N_u} n \sin \left(\frac{4n\pi}{N_k} \right) F_n(x, k_{m+2}) \\ &\simeq \frac{a}{4\pi \hbar \Delta_k} F_n(x, k_{m+2}) \int_0^{4\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (m = 1, 2, \dots, N_k - 4) \end{aligned} \quad (5.100)$$

と

$$(P.T.)_{m-2} \simeq -\frac{a}{4\pi \hbar \Delta_k} F_n(x, k_{m-2}) \int_0^{4\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (m = 5, 6, \dots, N_k) \quad (5.101)$$

が得られるので、これら二式を加えると

$$(P.T.)_{m+2} + (P.T.)_{m-2} \simeq \frac{a}{4\pi \hbar \Delta_k} \frac{F_n(x, k_{m+2}) - F_n(x, k_{m-2})}{\Delta_k} \int_0^{4\pi N_u/N_k} du u \sin u \quad (5.102)$$

$(m = 5, 6, \dots, N_k - 4)$

となる。 $|m - p| > 2$ の場合にも同様にして計算することができるが、 $|m - p| = 3$ の時には、式 (5.102) の係数の分母 4 が 9 に、 $|m - p| = 4$ の時には 16 という具合に大きくなっていくので、 $|m - p| > 2$ の成分からの寄与は小さくなっていくとして、 $|m - p| = 1, 2$ の場合のみを考慮することにする。この時、式 (5.94) の右辺第二項のポテンシャルに関する項は、式 (5.99) と (5.102) より次のようになる。

$$\begin{aligned} (P.T.) &\simeq \frac{a}{\pi \hbar} \frac{F_n(x, k_{m+1}) - F_n(x, k_{m-1})}{\Delta_k} \int_0^{2\pi N_u/N_k} du u \sin u \\ &\quad + \frac{a}{4\pi \hbar \Delta_k} \frac{F_n(x, k_{m+2}) - F_n(x, k_{m-2})}{\Delta_k} \int_0^{4\pi N_u/N_k} du u \sin u \end{aligned} \quad (5.103)$$

上式が、式 (5.93) の Liouville 方程式と同じ形になるためには、次の二つの条件が満たされなければならない。

$$\int_0^{2\pi N_u/N_k} du u \sin u = \frac{\pi}{2} \quad (5.104)$$

$$\int_0^{4\pi N_u/N_k} du u \sin u = 0 \quad (5.105)$$

つまり、この二式を式(5.103)に代入すると

$$(P.T.) \simeq \frac{a}{\hbar} \frac{F_n(x, k_{m+1}) - F_n(x, k_{m-1})}{2\Delta_k} \quad (5.106)$$

となり、式(5.93)の形が得られる。具体的に、式(5.104)と(5.105)を満たす N_u/N_k の値を求めると、次のようになる。

$$\left. \begin{array}{l} \text{式(5.104)} \quad \longrightarrow \quad N_u/N_k = 0.653 \quad , \quad 0.302 \\ \text{式(5.105)} \quad \longrightarrow \quad N_u/N_k = 0.610 \quad , \quad 0.356 \end{array} \right\} \quad (5.107)$$

従って、両方の条件を満たす N_u/N_k の値として次の二つが挙げられる。

$$\frac{N_u}{N_k} = \frac{2}{3} \quad , \quad \frac{1}{3} \quad (5.108)$$

ここで、それぞれの誤差は

$$\begin{aligned} \frac{|0.653 - \frac{2}{3}|}{\frac{2}{3}} + \frac{|0.610 - \frac{2}{3}|}{\frac{2}{3}} &= 0.106 \\ \frac{|0.302 - \frac{1}{3}|}{\frac{1}{3}} + \frac{|0.356 - \frac{1}{3}|}{\frac{1}{3}} &= 0.162 \end{aligned}$$

と計算されることから、 N_u/N_k の値として

$$\boxed{\frac{N_u}{N_k} = \frac{2}{3}} \quad (5.109)$$

が最も適していることが分かる。従って、式(5.73)の重み関数を用いる場合には、 u_x と k_x に関する分割数の比が $2/3$ になるようにする。

以上のように、Liouville 方程式の離散化の際に導入した式(5.73)の重み関数は、 $k_x \simeq 0$ にウィグナー関数が局在している場合に良い近似になっていることから、特に、極低温で動作する電子導波路の解析には有効である。

5.3 電子導波路の電気伝導

5.3.1 コンダクタンス量子化

まず、5.2節で行ったウィグナー関数モデルの妥当性を示すために、散乱の無い理想的な電子導波路の二端子コンダクタンスを計算する。導波路の厚みは30nmとし、フェルミエネルギー E_f は10meVを与える。この場合、深さ方向には、基本モードのみが伝搬するようになる。電子導波路が線形輸送領域で動作するように、印加電圧は $50\mu\text{V}$ とする。図5.6は、導波路幅の関数として計算したコンダクタンスの温度依存性を示す。但し、この図において、 $T=0\text{K}$ 以外の曲線は重ならないように、それぞれ40nm右へずらして描いていることに注意されたい。 $T=0\text{K}$ において、 $2e^2/h$ で量子化された鋭いステップが、温度上昇とともに不明瞭になるのが分かる。これは、熱エネルギーによって量子化の

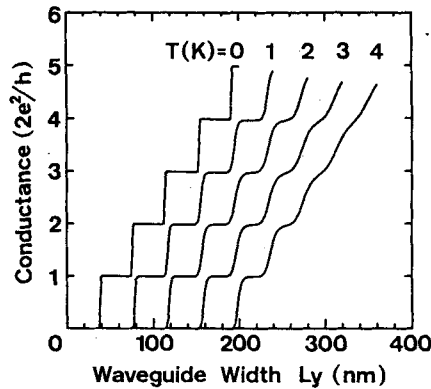


図 5.6: 理想的な電子導波路の二端子コンダクタンスの温度依存性

エネルギーがぼけてくるためである。例えば $T=3\text{K}$ の場合、3 番目のステップを越えると、幅方向の基本モードエネルギー $E_y^1 = \hbar^2 \pi^2 / (2m^* L_y^2)$ が熱エネルギー $k_B T = 0.26\text{meV}$ と同程度になるために、量子化のステップが大きく崩れてくる。このように、コンダクタンスの量子化が観測されるためには、温度が幅方向の量子化エネルギー間隔よりも十分小さくなる必要がある。

次に、イオン化不純物散乱が量子化コンダクタンスに及ぼす影響を調べる。図 5.7(a) に示すように、直線状の不純物が存在する場合の電子導波路のコンダクタンスを計算する。イオン化不純物は、太い実線で示すように導波路の下方向に 15nm 離れた所に直線状に分布していると仮定する。温度は 0K とする。図 5.7(b) は、不純物線密度 N_D を 10^4cm^{-1} と $5 \times 10^4\text{cm}^{-1}$ とした場合のコンダクタンスの計算結果を示す。点線は、散乱の全くない理想的な量子化のステップを表している。図より、不純物散乱によってコンダクタンスが減少し量子化のステップが崩れていることが分かる。また、不純物の密度が大きくなると、コンダクタンスの減少、ステップの劣化ともに顕著になっている。

図 5.7(b) の結果を見ると、導波路の幅が大きい場合にもコンダクタンスステップは、ほとんど形を変えないことに注意されたい。一方、実験では、導波路が広くなるにつれて量子化のステップの乱れが大きくなることが報告されている [63]。このような実験結果を説明するためには、図 5.8(a) に示すような不純物分布を考えなければならないことを次に示す。図 5.8(a) では、イオン化不純物は黒のパターンで示しているように、導波路層に平行な平面に二次元的に分布していると仮定している。導波路の真下にある不純物層以外のイオン化不純物は、導波路を形成するために印加される負のゲート電圧によって中和されていると考える。図 5.8(b) に、不純物面密度 $2.8 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ に対して計算した二端子コンダクタンスを示す。導波路層と不純物層の距離 z_0 は、 150nm と 100nm である。導波路の幅が大きくなるにつれて、コンダクタンスの量子化ステップが徐々に崩れていく様子が得られている。これは、導波路幅の増加とともに全不純物量が増えていくためである。図 5.8(b) の結果が実

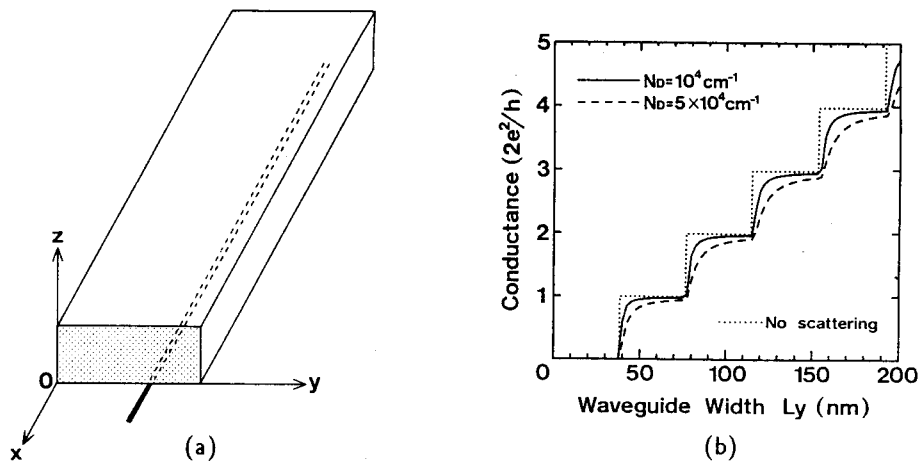


図 5.7: (a) イオン化不純物直線状分布モデルと (b) コンダクタンスの計算結果

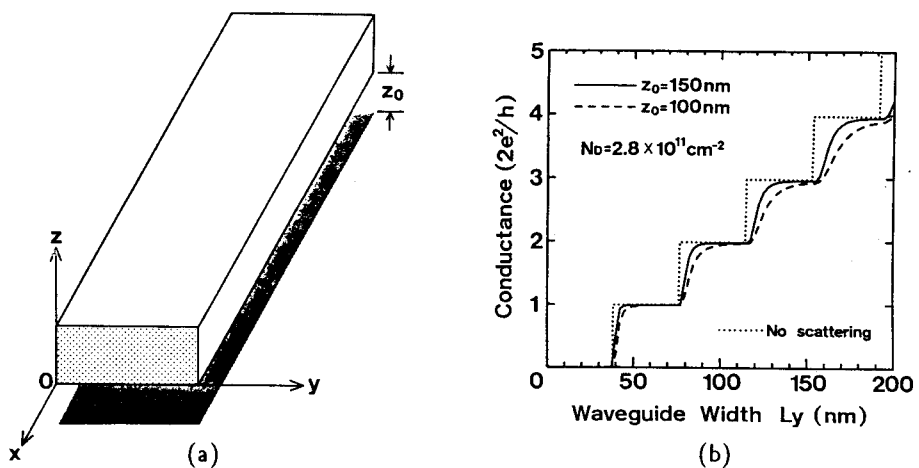


図 5.8: (a) イオン化不純物平面状分布モデルと (b) コンダクタンスの計算結果

験で観測された量子化ステップと良く一致していることから、実際のコンダクタンスの量子化ステップを説明するには、イオン化不純物の二次元分布を考慮したモデルが妥当なことが分かる。

次に、導波路の長さによるコンダクタンスの変化の様子を図 5.9 に示す。 z_0 は 100nm と固定して、導波路の長さ L_x を 56nm から 200nm に変化させている。長い導波路では電子波が伝搬する距離が長くなるために、不純物による散乱を多く受け量子化コンダクタンスの乱れがより顕著になることが分かる。導波路の長さを変えた実験においても同様な結果が得られており [63]、著者の結果と良い一致をしている。以上、Wigner 関数の Liouville 方程式に現象論的に緩和時間近似を取り入れるモデルによって、初めて実験結果を説明することができた。

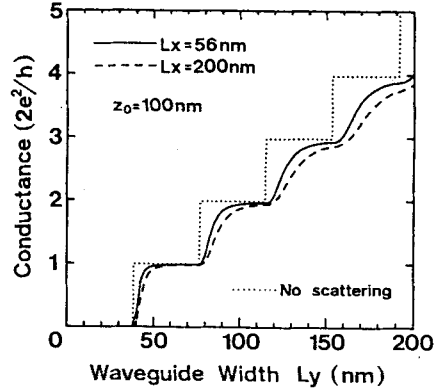


図 5.9: 導波路長による量子化コンダクタンスの変化

5.3.2 非線形量子輸送特性

前節で議論した電子導波路の量子化コンダクタンスは、印加電圧が非常に小さい線形輸送領域において観測される。本節では、大電圧が印加された場合の量子輸送特性について検討を行う。まず、絶対温度 0K でのコンダクタンスの非線形性について議論する。図 5.8 の $z_0 = 100\text{nm}$ の場合について、導波路幅 L_y を最初のステップ付近で、 $81, 80, 60, 44\text{nm}$ と変化させた場合の電流・電圧特性を図 5.10 に示す。点線は、完全なコンダクタンスの量子化が起こっている $I = (2e^2/h)V$ の関係を表わしている。いずれの導波路幅に対しても、電流・電圧特性は電圧が増加していくにつれて点線から大きくずれていくのが分かる。 $L_y = 44\text{nm}$ は、一つ目のステップの立ち上がりの部分に相当するのでコンダク

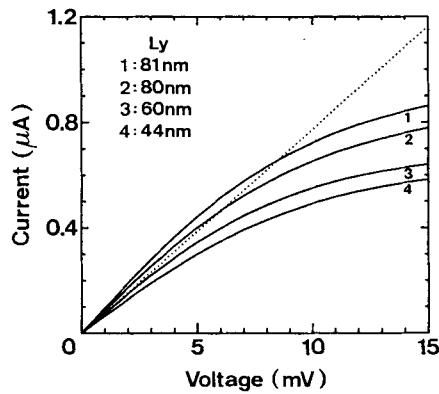


図 5.10: $T = 0\text{K}$ における電流・電圧特性

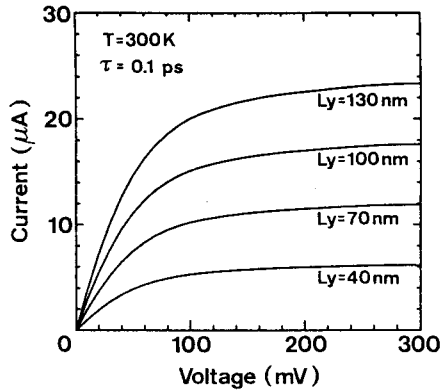


図5.11: 室温における電流・電圧特性の導波路幅依存性

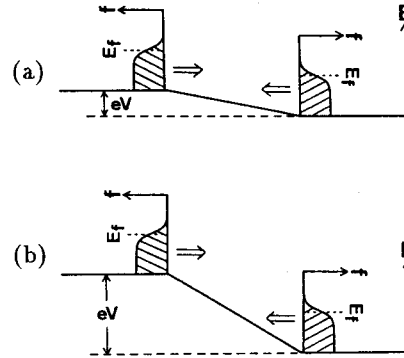


図5.12: 線形および非線形輸送領域での電子導波路内ポテンシャル分布. (a) $eV < E_f$ と (b) $eV \gg E_f$

タンスの値は、常に、 $2e^2/h$ よりも小さくなる。一方、 $L_y=80\text{nm}$ 以上の導波路では、二つ目のモードが伝搬するようになるために低電圧時のコンダクタンスは $2e^2/h$ よりも大きな値をとるが、電圧が増加するに従ってコンダクタンスが $2e^2/h$ より小さくなっていく。実験においても同様な結果が得られており [70]、Wigner 関数モデルが電子導波路の非線形量子輸送の解析にも充分適用できることが分かる。また、散乱が全く無い理想的な電子導波路に対しては、図5.10の $L_y = 60\text{nm}$ の曲線と同様な電流・電圧特性が得られることを付け加えておく。

次に、実用上重要と考えられる室温における電子導波路の電流・電圧特性について議論する。室温では、フォノン散乱等のイオン化不純物散乱以外の散乱過程を考慮した定式化が必要であるが、ここでは第一ステップとして、すべての導波路幅に対して緩和時間を 0.1ps とした場合の計算結果を示すことにする。図5.11は、 $T=300\text{K}$ における電子導波路の電流・電圧特性の導波路幅依存性を示す。図5.12には、低電圧および大電圧が印加された場合の電子導波路内のポテンシャル分布と、両電極における電子の分布関数を示している。図5.12(a)に示すように、低電圧時には両電極のフェルミエネルギーの差に比例して電流が流れるが、図5.12(b)のように、電子導波路にかかるポテンシャル差が電極のフェルミエネルギー (10meV) よりもずっと大きくなると、導波路を流れる電流は陰極側の電子分布によって決まってくる [71]。電子波の群速度が一次元の状態密度によって相殺されるために、導波路を流れる電流は、 100mV よりも高い電圧で電流が飽和するようになるのである。また、図5.11より、飽和電流は、導波路幅 L_y の増加とともに大きくなるのが分かる。これは、 L_y が大きくなると、 y 方向の量子化エネルギーが $E_y^n = \hbar^2(n\pi)^2/(2m^*L_y^2)$ という関係に従って小さくなるために、 x 方向に伝搬する電子の数が増えるためである。スプリット・ゲート構造では、導波路幅を外部のゲート電圧によって変化させることができるので、電子導波路においても FET と同様なトランジスタ動作を期待することができる。最後に、緩和時間を変化した時の計算より、緩和時間が長くなると飽和

電流の値が大きくなるが、図 5.11 と同様な電流・電圧特性が得られることが分かっていることを付け加えておく。

5.4 他のモデルとの比較

5.4.1 透過確率モデル

ここでは、量子力学的輸送モデルであるウィグナー関数モデルと電子波の透過確率を用いて表現されるランダウア公式との比較を行う。シミュレーションモデルとして、図 5.13 に示すようなポテンシャル障壁(井戸)をもつ導波路を考える。障壁(井戸)の高さは外部のゲート電圧によって変化させるとする。また、温度は 0K とし、散乱は無視する。図 5.14 は、幅 $L_B = 5.1\text{nm}$ のポテンシャル障壁の高さ eV_B によるコンダクタンス変化の計算結果を示す。導波路の幅は 50nm に固定しているため、基本モードのみが伝搬可能になっている。実線および破線は、それぞれウィグナー関数モデルとランダウア公式に対応する。一般に、電子導波路を流れる電流は、印加電圧 V の関数として

$$I = \frac{2e}{h} \int_0^\infty dE_x [f_{FD}(E_x) - f_{FD}(E_x + eV)] \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij}(E_x, V) \quad (5.110)$$

で表される。但し、 T_{ij} は左側電極の j 次モードから右側電極の i 次モードへの透過確率を示している。 N は、導波路中の全モード数である。今、微小電圧 ($eV \ll E_f$) が導波路に加わっている場合、0K で電子導波路のコンダクタンスはランダウア公式によって次式で与えられる [72]。

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij} \quad (5.111)$$

但し、上式の T_{ij} はフェルミエネルギーでの値を用いる。図 5.14 の場合には、 $N = 1$ となる。図 5.14

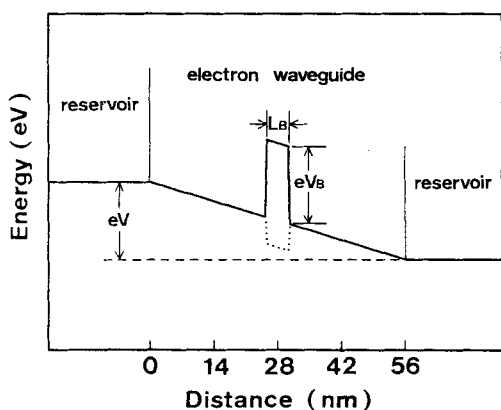


図 5.13: ポテンシャル障壁(井戸)を有する電子導波路のシミュレーションモデル

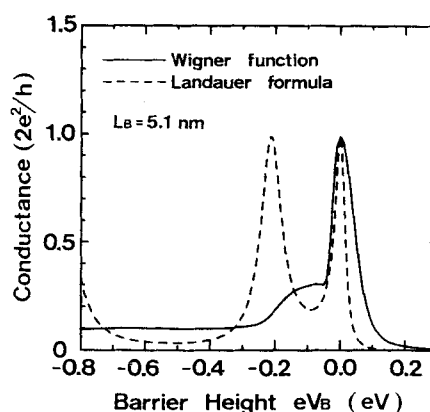


図 5.14: ポテンシャル障壁によるコンダクタンスの変化

の破線において、正のポテンシャル領域ではコンダクタンスが eV_B の上昇とともに減少するが、負のポテンシャル領域ではコンダクタンスの共鳴的な落込みが見られる。電子波が、共鳴によってポテンシャル井戸に捕らえられるためにコンダクタンスが減少するのである。

一方、ウィグナー関数モデルでは、第3章3.4節と同様に、障壁および井戸のポテンシャル反発力によって、図5.15に示すように分布関数が k 空間で広がるようになる。上述した透過確率法では、このようなポテンシャル反発力による分布関数の変化は考慮されていない。図5.14の2曲線の間は、ウィグナー関数モデルにおけるこのポテンシャルの非局所性によるものと考えられる。特に、負のポテンシャル領域におけるウィグナー関数モデルの曲線では、最初と2番目のコンダクタンスの落込みが分離されずに重なり合うようになっているのが分かる。

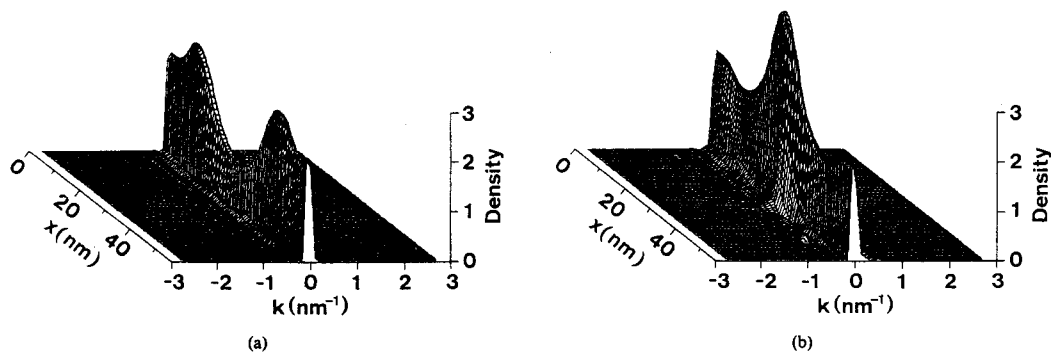


図5.15: (a) $V_B = 20\text{mV}$ のポテンシャル障壁および(b) $V_B = -20\text{mV}$ のポテンシャル井戸を有する電子導波路内のウィグナー分布関数

次に、非線形輸送領域での両モデルの比較を行う。図5.16は、 $T=77\text{K}$ で散乱を無視した時の電流・電圧特性を示す。導波路内のポテンシャル障壁は、零とした。導波路幅は 70nm としている。実線がウィグナー関数モデル、破線が式(5.110)の透過確率モデルで計算した結果である。低電圧では、両曲線は一致しているが、電圧が大きくなると差が現れてくる。透過確率法では、統計的な取り扱いは両端の電極においてのみ考慮されており、導波路内での分布関数の位置による変化は取り入れられていないのが、その原因であると考えている。図5.16では、ウィグナー関数モデルの方が大きい電流値を示しているが、この傾向は、第3章で議論した共鳴トンネルダイオードの電流・電圧特性における両モデルの比較の結果(図3.25)と一致している。

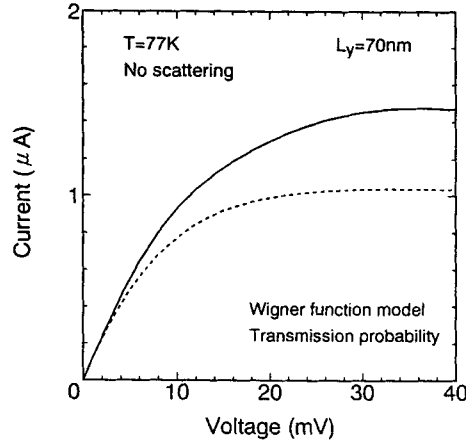


図 5.16: ウィグナー関数モデルと透過確率法の比較

5.4.2 古典的移動度モデル

イオン化不純物散乱が非常に強く起こっている場合の電子導波路のコンダクタンスについて、古典的な移動度モデル [73] との比較を行う。古典的モデルでは、式 (5.56) より求まる緩和時間から移動度 μ_n を見積り、次式でコンダクタンスを計算する。

$$I = \sum_n \frac{N_n e \mu_n V}{L_x} \quad (5.112)$$

但し、 N_n は一次元電子密度で次式で与えられる。

$$N_n = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi \hbar} \sqrt{E_f - E_y^n - E_z^1} \quad (5.113)$$

ここで、 $E_y^n = (n\hbar\pi)^2 / (2m^*L_y^2)$ 、 $E_z^1 = (\hbar\pi)^2 / (2m^*L_z^2)$ である。上式から計算したコンダクタンスを図 5.17(a) に示す。不純物分布は、図 5.7(a) の線状分布を用い、線密度は $N_D = 10^5 \text{cm}^{-1}$ 、 10^6cm^{-1} および $4 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ の三種類を与えている。同図 (b) には、(a) と同じ不純物分布に対して、Wigner 関数モデルで計算したコンダクタンスを示している。図 5.17(a) では、不純物が少ないと移動度が非常に大きくなるためコンダクタンスが発散しているのが分かる。これに対して同図 (b) では、量子化のためコンダクタンスの発散は起こらない。不純物密度が多くなると、両者ともにコンダクタンスが減少し、 $N_D = 4 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ の場合には両者の曲線が近づいていることが分かる。Wigner 関数モデルにおいても、不純物散乱が強く起こるために量子化のステップが消滅している。導波路幅が 150nm 以上で見られるコンダクタンスの落込みは、逆方向に伝搬する高次モードと結合する電子の数が増すためであると考えている。

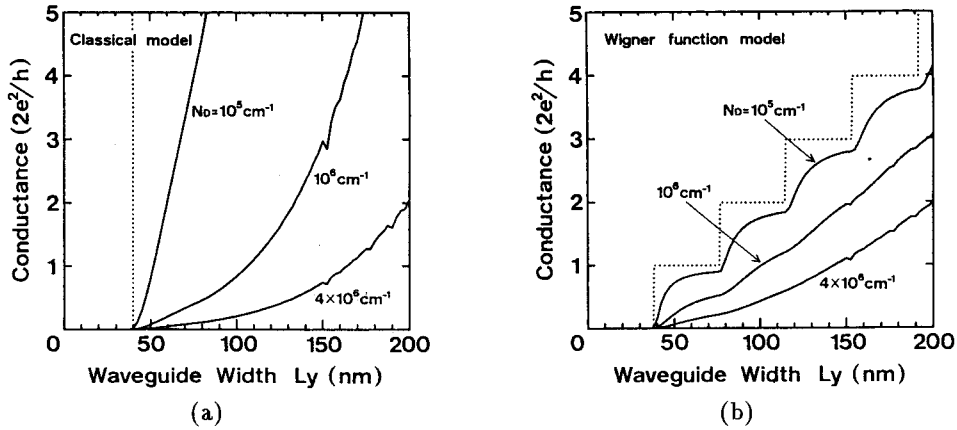


図5.17: 古典的モデルとウィグナー関数モデルの比較. (a) 古典的モデルによるコンダクタンスと (b) ウィグナー関数モデルによるコンダクタンス

5.5 電子導波路の過渡応答特性

電子導波路のダイナミックな特性を調べるために、電流の過渡応答を計算する。図5.18は、図5.13の構造において、障壁のポテンシャルを $t = 0$ で瞬間的にスイッチさせた場合の電流過渡応答を示している。ポテンシャル障壁は、(a) $V_B = 0$ と 100mV 、(b) $V_B = 0$ と -50mV の間でスイッチさせている。正のポテンシャルスイッチングの場合には、図5.18(a)に示されているように初期の電流オーバーシュートの後、電流は定常状態の値へ近付いていく。一方、負のポテンシャルスイッチングの場合には、図5.18(b)の実線に示されているように、特徴的な電流振動が約 2ps まで続く。さらに、破線

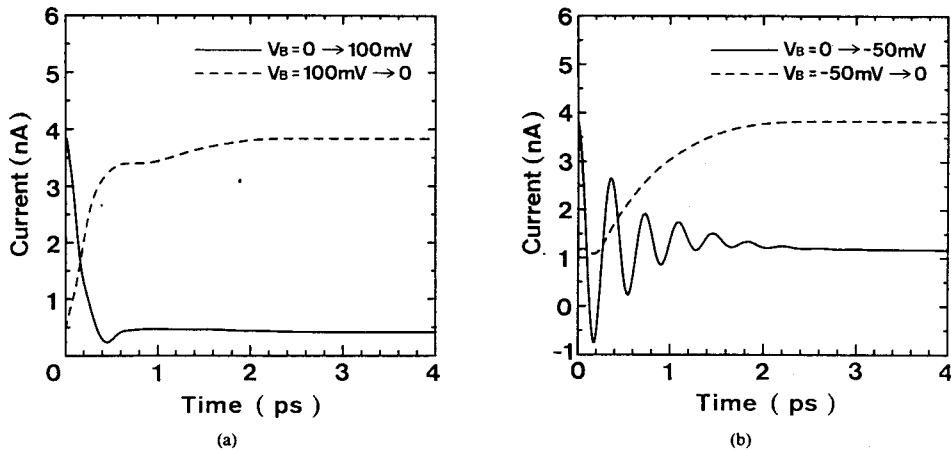


図5.18: ポテンシャル障壁の高さをスイッチさせた時の電流過渡応答. ポテンシャル障壁は、(a) $V_B = 0$ と $V_B = 100\text{mV}$ 、(b) $V_B = 0$ と $V_B = -50\text{mV}$ の間でスイッチさせている。

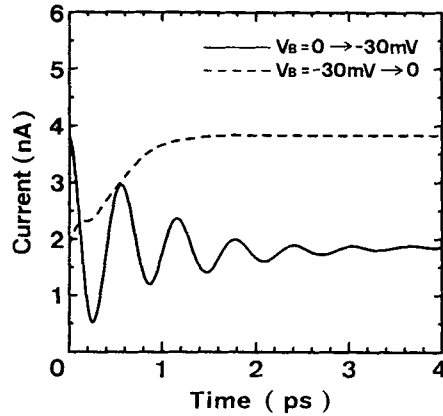


図 5.19: $V_B = 0$ と $V_B = -30\text{mV}$ の間でポテンシャル障壁をスイッチさせた時の電流過渡応答。

で示されている逆のスイッチングでは、その減衰振動とはほぼ同じ時間スケールのゆっくりとした電流応答が見られる。図 5.18(b) の電流振動やゆっくりとした電流応答は、ポテンシャル井戸における電子波の共鳴によるものと考えられる。この過渡電流応答の振動についてさらに詳しく調べるために、ポテンシャル井戸の深さを変えてみる。図 5.19 は、 $V_B=0$ と -30mV の間でポテンシャル障壁をスイッチさせた時の電流過渡応答を示す。この図では、図 5.18(b) の周期よりも長い振動の周期が見られる。これは、ポテンシャル井戸が浅くなるにつれて、量子井戸の量子化エネルギーが減少するためと考えられる。

次に、線形および非線形輸送領域における電子導波路のダイナミックな特性について議論する。導波路中にポテンシャル障壁および井戸が無い構造を考え、温度は 0K とする。図 5.20 に、散乱が全く無い理想的な電子導波路の電流・電圧特性を示す。このような理想的な電子導波路で、印加電圧を瞬間的にスイッチさせた時の電流過渡応答を図 5.21 に示す。印加電圧 V は、(a) $V=0$ と 1mV 、(b) $V=0$ と 12mV の間でスイッチさせている。導波路幅は 70nm と固定した。図 5.21(a) の線形領域内のスイッチングでは、電流は各スイッチ後の定常値へ単調に近付いていく様子が得られている。一方、図 5.21(b) の実線で示されている非線形領域へのスイッチングでは、初期の電流オーバーシュートが見られる。これは、導波路内の電子分布が、大電圧の急激な変化によって陽極側へ加速させられることによって生じる。このような初期のオーバーシュートの時間を決めているパラメータを調べるために、導波路の長さを 56nm から 80nm に長くして電流過渡応答を計算した結果を図 5.22 に示す。図 5.22 において、印加電圧は $V = 0$ と 12mV の間でスイッチさせている。両スイッチングともに、導波路を長くすると、電流の応答が遅くなっているのが分かる。これは、電子波が導波路内を走行するのに要する時間が長くなることによる。従って、電子導波路の高速動作には、導波路の長さを短くすることが望ましいが、その場合、電子波の電極間のトンネリングが無視できなくなることに注意する必要

がある。

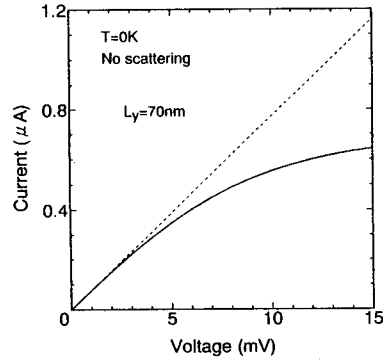


図 5.20: 散乱のない理想的な電子導波路の $T = 0\text{K}$ における電流・電圧特性。

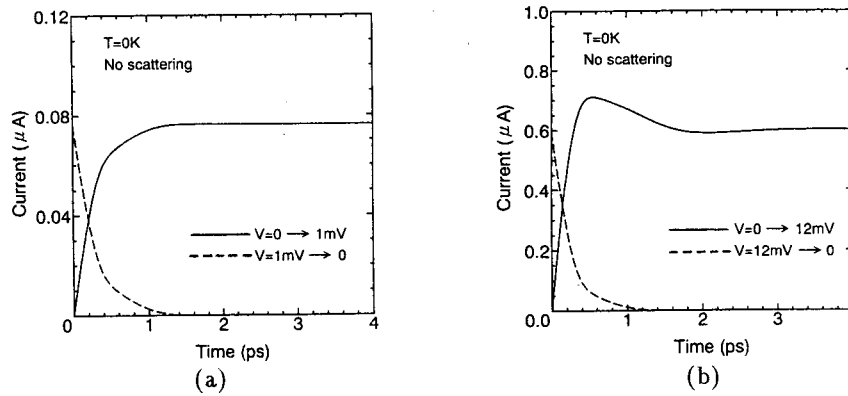


図 5.21: (a) 線形および (b) 非線形輸送領域における電流過渡応答。電圧 V は、(a) $V = 0$ と $V = 1\text{mV}$, (b) $V = 0$ と $V = 12\text{mV}$ の間でスイッチさせている。

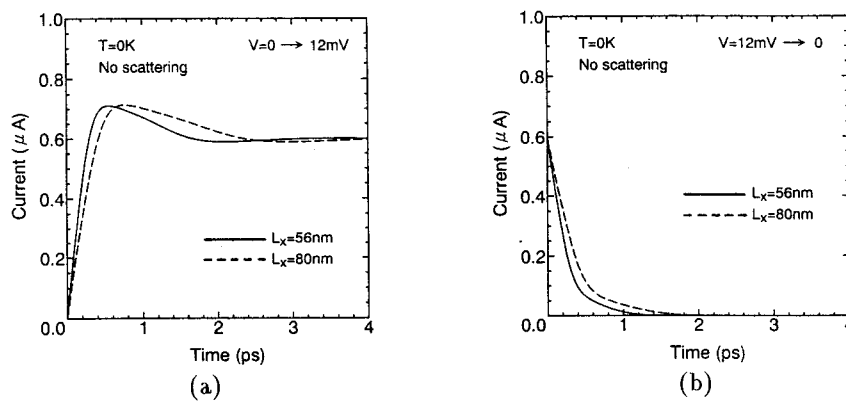


図 5.22: 導波路長による非線形輸送領域の電流過渡応答の変化。実線および破線は、それぞれ 56nm と 80nm の導波路長に対する結果を示している。電圧 V は、(a) $V = 0$ から $V = 12\text{mV}$, (b) $V = 12\text{mV}$ から $V = 0$ にスイッチしている。

5.6 今後の課題

5.6.1 磁界効果

電子導波路の厚み方向に定常磁界を加えた時の解析が、二次元のシュレディンガー方程式とランダウア公式に基づいて行われており、特徴的なコンダクタンスの落込みや、インジェクタとしての導波路を出た後の電子波の伝搬の様子など興味ある結果が報告されている [74]。また、電子波が電子導波路の壁沿いを伝搬するエッジ導波や量子ホール効果 [72]、さらに二つの電子波の干渉によるアハロノフ・ボーム効果 [75] 等が議論されている。そのような磁界中の電子導波路における量子輸送は、次のウィグナー関数に関する Liouville 方程式で記述することができる [76]。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{m^*} \mathbf{P} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{1}{i\hbar} \left[V \left(\mathbf{r} - \frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{p}} \right) - V \left(\mathbf{r} + \frac{\hbar}{2i} \nabla_{\mathbf{p}} \right) \right] f - e \left(\frac{\mathbf{P}}{m^*} \times \mathbf{B} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f \quad (5.114)$$

但し、上式の運動量 \mathbf{P} はベクトルポテンシャル \mathbf{A} を用いて、 $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k} + e\mathbf{A}$ で定義されている。上式の右辺第3項は磁界によるローレンツ力の項を表しており、古典的にも対応が付く形になっている。磁界の効果を取り入れるためには上式を二次元で解く必要があるが、具体的な計算を実行するには膨大な量の計算機メモリや計算時間が必要となるために、現在の計算機の能力では非常に困難である。計算量が少なくてすむ離散化やアルゴリズムの工夫、或いは並列計算機の利用等によって実際の計算が可能になるものと思われる。

5.6.2 空間電荷効果

電子導波路内では、横方向がポテンシャルによって閉じ込められているために、電子密度が導波路の中央付近で大きく、導波路端に近づくに従って減少するようになる。このようなキャリア密度の位置変化によって、導波路内のポテンシャル分布も閉じ込め方向において変化する。これは、導波モードの固有値がポテンシャル一定の時の値と異なることになり、イオン化不純物散乱による緩和時間の変化などに影響を及ぼすと考えられる。さらに、スプリット・ゲートを用いた構造では、1D constriction と 2D コンタクトの接続部で電子が蓄積されるようになり、伝搬方向に関してもポテンシャル分布は一定でなくなる。この効果は、線形輸送領域における量子化コンダクタンスに対しても重要であるが [77]、特に、非線形領域での輸送特性に重要な影響を与えると考えられる。このような空間電荷効果を取り入れたシミュレーションを行うには、ポアソン方程式とウィグナー関数の Liouville 方程式を二次元で自己無撞着に解かなければならない。このような二次元量子構造デバイスにおける空間電荷の効果を取り入れた輸送特性の解析には、Liouville 方程式を直接用いるのではなく、Liouville 方程式から導かれる量子モーメント方程式を用いたシミュレーション手法が適していると考えられる [78][79]。現在、この手法の電子導波路への適用を行っているが、その収束性等に問題があり未だ成功には至っていない。

Chapter 6

結論

近年の半導体結晶成長技術や微細加工技術の進歩により、既に設計通りの共鳴トンネルダイオードや量子井戸レーザ等の量子井戸構造デバイスの作製技術が立ち上がりつつあることから、量子井戸構造デバイスを設計するための設計技術を確立することが重要になってきている。本研究で主に取り上げたウィグナー関数を用いた解析モデルは、量子統計を基にした一般的な量子輸送モデルとして知られているが、本格的に量子サイズ構造半導体デバイスの輸送モデルとして検討され出したのは、著者の研究も含めて極く最近のことである。特に、ウィグナー関数モデルを、半導体量子構造デバイス特有の量子輸送モデルとして定式化させたのは著者が最初であり、電子の有効質量の位置変化による非局所的効果や電子-電子相互作用をモデルに取り入れることにより、現実のデバイスモデルに近付けることに貢献してきたと考えている。また、ウィグナー関数モデルを用いて、量子井戸構造光デバイスの量子輸送特性を議論したのは著者が最初であり、アバランシェ・フォトダイオードにおける正孔蓄積の問題や量子井戸レーザのキャリア輸送問題を本格的に議論するためには、量子輸送モデルを用いることが重要であることを指摘してきた。さらに、ウィグナー関数モデルを、量子閉じ込めの次元を一つ上げた電子導波路に適用するための定式化に初めて成功し、低温で観測される電子導波路の量子化コンダクタンスにおけるイオン化不純物散乱の影響や、室温におけるトランジスター動作の可能性について検討を行った。量子井戸構造を有する半導体デバイスだけに限られていた、ウィグナー関数モデルの適用範囲を拡大させる成果だと考えている。

しかしながら、ウィグナー関数モデルに代表される量子輸送モデルを量子サイズ構造半導体デバイスの設計技術として確立させるためには、今後、数多くの解決すべき問題が残っている。第一点は、本論文で用いた緩和時間近似による現象論的なキャリア散乱過程の取り扱いに代わって、有限散乱時間やICFE等の散乱過程を厳密に取り扱うことができる輸送モデルを開発することである。今後、デバイスの寸法が、さらに小さくなるに伴って、散乱現象がキャリアの輸送特性に及ぼす影響をできるだけ正確に見積ることが要求されてくると考えられる。第二点は、将来の高速光通信システムを実現するためのキーデバイスとして期待されている超格子アバランシェ・フォトダイオードや量子井戸レーザ等の量子構造光デバイスの特性をより本格的に議論するために、キャリアの輸送現象だけな

く、電子・正孔再結合過程を取り入れることができる輸送モデルを作り上げることである。第三点は、量子構造部の外部に設けられる電極やコンタクトまで含めたデバイス全体としての特性を解析するために、量子構造付近の有限の領域で用いられる量子輸送モデルと、残りの領域で用いられる古典的な輸送モデルとの接続を行うことである。以上の三点を解決するには、それぞれに難しさがあるが、量子輸送モデルを用いた量子構造半導体デバイスの解析・設計技術を確立するためには、いずれも不可欠な要素であると考えている。

謝 辞

本研究は、神戸大学工学部 三好旦六教授の御指導のもとに行われたもので、同教授の終始懇切なる御教示と御鞭撻の結果、達せられたものであります。ここに、深甚なる感謝の意を表します。

本論文をまとめるにあたり、神戸大学工学部 峯本工教授および西野種夫教授の懇切なる御教示、御指導を賜りました。ここに、喪心より感謝の意を表します。

著者の質問や要望に対し、常に御親切に対処して頂き、数多くの有益な助言を与えて下さった神戸大学工学部 小川真人講師に、深く感謝の意を表します。

また、本研究を遂行するにあたり、神戸大学工学部 伊地知武吉技官の御援助と御協力を受けましたので、心から謝意を表します。

さらに、著者の研究活動に対して御協力下さった清水悟氏、藤野尚久氏の他、神戸大学工学部 電気電子工学科 電子物理工学講座の上野治彦氏、好村浩二氏および同講座の諸氏に厚く御礼申し上げます。

最後に、本論文を作成するにあたり、心身ともに支えてくれた妻 直美に、心から感謝致します。

Bibliography

- [1] 三好 旦六: 1990 年電子情報通信学会秋季全国大会講演論文集 (1990)SC-1-2.
- [2] F. Rossi, R. Brunetti and C. Jacoboni, in *Hot Carriers in Semiconductor Nanostructures: Physics and Applications*, edited by J. Shah(Academic Press, 1992).
- [3] W. R. Frensley: J. Vac. Sci. Technol. B **3**(1985) 1261.
- [4] H. Mizuta and C. J. Goodings: J. Phys.: Condens. Matter **3**(1991) 3739.
- [5] R. Brunetti, C. Jacoboni and F. Rossi: Phys. Rev. **B39**(1989) 10781.
- [6] F. Rossi and C. Jacoboni: Solid-State Electron. **32**(1989) 1411.
- [7] P. Menziani, F. Rossi and C. Jacoboni: Solid-State Electron. **32**(1989) 1807.
- [8] W. R. Frensley: Phys. Rev. **B36**(1987) 1570.
- [9] W. R. Frensley: Solid-State Electron. **32**(1989) 1235.
- [10] N. C. Kluksdahl, A. M. Krivan, D. K. Ferry and C. Ringhofer: Phys. Rev. **B39**(1989) 7720.
- [11] R. K. Mains and G. I. Haddad: J. Appl. Phys. **64** (1988) 5041.
- [12] F. A. Buot and K. J. Jensen: Phys. Rev. **B42**(1990) 9429.
- [13] F. A. Buot and K. J. Jensen: IEEE Trans. Electron Devices **ED-38**(1991) 2337.
- [14] H. Tsuchiya, M. Ogawa and T. Miyoshi: IEEE Trans. Electron Devices **ED-38**(1991) 1246.
- [15] H. Tsuchiya, M. Ogawa and T. Miyoshi: Jpn. J. Appl. Phys. **31**(1992) 745.
- [16] T. Miyoshi, H. Tsuchiya and M. Ogawa: IEEE J. Quantum Electron. **QE-28**(1992) 25.
- [17] D. R. Miller and D. P. Neikirk: Appl. Phys. Lett. **58**(1991) 2803.
- [18] Y. Hsu and G. Y. Wu: J. Appl. Phys. **71**(1992) 304.

- [19] G. Y. Wu and K. P. Wu: J. Appl. Phys. **71**(1992) 1259.
- [20] H. Tsuchiya, M. Ogawa and T. Miyoshi: Jpn. J. Appl. Phys. **30**(1991) 3853.
- [21] 造田 安民: 日本物理学会誌 **47**(1992) 721.
- [22] H. Tsuchiya, M. Ogawa and T. Miyoshi: to be printed in IEEE Trans. Electron Devices **ED-39**(1992) Nov.
- [23] M. Altarelli, in *Heterojunctions and Semiconductor Superlattices*, edited by G. Allan, G. Bastard, N. Boccara, M. Lannoo and M. Voos, Part II(Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986).
- [24] G. J. Iafrate, in *Gallium Arsenide Technology*, edited by D. K. Ferry(Howard W. Sams and Co., Inc., Indianapolis, 1985).
- [25] E. Wigner: Phys. Rev. **40**(1932) 749.
- [26] Y. Ando and T. Itoh: J. Appl. Phys. **61**(1987) 1497.
- [27] M. Kurata and J. Yoshida: IEEE Trans. Electron Devices **ED-31**(1984) 467.
- [28] 倉田 衛: “バイポーラトランジスタの動作理論”, 近代科学社 (1980).
- [29] J. H. Smet, T. P. E. Broekaert and C. G. Fonstad: J. Appl. Phys. **71**(1992) 2475.
- [30] E. R. Brown, J. R. Söderström, C. D. Parker, L. J. Mahoney, K. M. Molvar and T. C. McGill: Appl. Phys. Lett. **58**(1991) 2291.
- [31] T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannenwald, C. D. Parker and D. D. Peck: Appl. Phys. Lett. **43**(1983) 588.
- [32] W. R. Frensley: Solid-State Electron. **32**(1989) 1235.
- [33] M. A. Reed, J. W. Lee and H-L Tsai: Appl. Phys. Lett. **49**(1986) 158.
- [34] T. P. E. Broekaert and C. G. Fonstad: J. Appl. Phys. **68**(1990) 4310.
- [35] H. Morkoc, J. Chen, U. K. Reddy and T. Henderson: Appl. Phys. Lett. **49**(1986) 70.
- [36] C. I. Huang, M. J. Paulus, C. A. Bozada, S. C. Dudley, K. R. Evans, C. E. Stutz, R. L. Jones and M. E. Cheney: Appl. Phys. Lett. **51**(1987) 121.
- [37] J. R. Söderström, D. H. Chow and T. C. McGill: IEEE Electron Device Lett. **11**(1990) 27.

- [38] N. Harada and S. Kuroda: *Jpn. J. Appl. Phys.* **25** (1986) L871.
- [39] M. Tsuchiya, T. Matsusue and H. Sakaki: *Phys. Rev. Lett.* **59**(1987) 2356.
- [40] S. Collins, D. Lowe and J. R. Barker: *J. Phys.* **C20** (1987) 6233.
- [41] B. Ricco and M. Ya. Azbel: *Phys. Rev.* **B29**(1984) 1970.
- [42] S. Luryi: *Appl. Phys. Lett.* **47**(1985) 490.
- [43] H. Guo, K. Diff, G. Neofotistos and J. D. Gunton: *Appl. Phys. Lett.* **53**(1988) 131.
- [44] P. J. Price: *Superlattices Microstruct.* **2**(1986) 593.
- [45] T. Inata, S. Muto, Y. Nakata, T. Fujii, H. Ohnishi and S. Hiyamizu: *Jpn. J. Appl. Phys.* **25**(1986) L983.
- [46] S. Muto, T. Inata, Y. Sugiyama, Y. Nakata, T. Fujii, H. Ohnishi and S. Hiyamizu: *Jpn. J. Appl. Phys.* **26**(1987) L220.
- [47] Y. Sugiyama, T. Inata, S. Muto, Y. Nakata and S. Hiyamizu: *Appl. Phys. Lett.* **52**(1988) 314.
- [48] W. R. Frensley: *Appl. Phys. Lett.* **51**(1987) 448.
- [49] W. R. Frensley: *Superlattices Microstruct.* **4**(1988) 497.
- [50] W. R. Frensley: *Rev. Mod. Phys.* **62**(1990) 745.
- [51] R. Tsu and L. Esaki: *Appl. Phys. Lett.* **22** (1973) 562.
- [52] N. Susa, H. Nakagome, O. Mikami, H. Ando and H. Kanbe: *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-16**(1980) 864.
- [53] O. K. Kim, S. R. Forrest, W. A. Bpnner and R. G. Smith: *Appl. Phys. Lett.* **39**(1981) 402.
- [54] J. C. Cambell, W. T. Tsang, G. J. Qua and B. C. Johnson: *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-24**(1988) 496.
- [55] F. Capasso, H. M. Cox, A. L. Hutchinson, N. A. Olsson and S. G. Hummel: *Appl. Phys. Lett.* **45**(1984) 1193.
- [56] M. Ogawa, S. Shimizu and T. Miyoshi: *IEICE of Japan* **J71-C**(1988) 1228.
- [57] F. Capasso, A. Y. Cho, K. Mohammed and P. W. Foy: *Appl. Phys. Lett.* **46**(1985) 664.

- [58] T. Weil and B. Vinter: *Surface Science* **174**(1986) 505.
- [59] Y. Arakawa, K. Vahala and A. Yariv: *Appl. Phys. Lett.* **45**(1984) 950.
- [60] Y. Arakawa and A. Yariv: *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-22**(1986) No.9.
- [61] H. Hirayama, Y. Miyake and M. Asada: *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-28**(1992) 68.
- [62] R. Nagarajan, T. Fukushima, S. W. Corzine and J. E. Bowers: *Appl. Phys. Lett.* **59**(1991) 1835.
- [63] G. Timp, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by M. A. Reed(Academic, New York, 1990).
- [64] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel and C. T. Foxon: *Phys. Rev. Lett.* **60**(1988) 848.
- [65] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie and G. A. C. Jones: *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**(1988) L209.
- [66] A. Szafer and A. D. Stone: *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 300.
- [67] G. Kirczenow: *Phys. Rev.* **B39**(1989) 10452.
- [68] L. I. Glazman, G. B. Lesovik, D. E. Khmel'nitskii and R. I. Shekhter: *JETP Lett.* **48**(1988) 238.
- [69] C. S. Chu and R. S. Sorbello: *Phys. Rev.* **B40**(1989) 5941.
- [70] L. P. Kouwenhoven, B. J. van Wees, C. J. P. M. Harmans, J. G. Williamson, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, C. T. Foxon and J. J. Harris: *Phys. Rev.* **B39**(1989) 8040.
- [71] C. S. Lent, S. Sivaprakasam and D. J. Kirkner: *Solid-State Electron.* **32**(1989) 1137.
- [72] M. Büttiker: *Phys. Rev.* **B38**(1988) 9375.
- [73] H. Sakaki: *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**(1980) L735.
- [74] A. Okiji, H. Kasai and A. Nakamura: *Prog. Theor. Phys. Supp. No. 106*(1991) 209.
- [75] M. Büttiker: *Phys. Rev. Lett.* **57**(1986) 1761.
- [76] R. Kubo: *J. Phys. Soc. Jpn.* **19**(1964) 2127.

- [77] L. Escapa and N. Garcia: Appl. Phys. Lett. **56** (1990) 901.
- [78] J. R. Zhou and D. K. Ferry: IEEE Trans. Electron Devices **ED-39**(1992) 473.
- [79] J. R. Zhou and D. K. Ferry: IEEE Trans. Electron Devices **ED-39**(1992) 1793.

Appendix A

有効質量ハミルトニアンのエルミート性

有効質量方程式 (2.41) の有効質量ハミルトニアン H は次式で表される。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) + v(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1})$$

このハミルトニアンに対する行列要素を計算すると

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \int d\mathbf{r} \psi_n^* H \psi_m = \int d\mathbf{r} \psi_n^* \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} \right) + v(\mathbf{r}) \psi_m \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \int d\mathbf{r} \psi_n^* \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} \right) + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \psi_n^* \psi_m \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left[\psi_n^* \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar^2}{2} \int d\mathbf{r} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \psi_n^* \psi_m \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

となる。ここで、 $\mathbf{r} \rightarrow \pm\infty$ において $\partial\psi/\partial\mathbf{r} \rightarrow 0$ と仮定すると、上式の行列要素は

$$H_{nm} = \frac{\hbar^2}{2} \int d\mathbf{r} \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \psi_n^* \psi_m \quad (\text{A.3})$$

と表される。また、行列要素 H_{nm} のエルミート共役をとると

$$\begin{aligned} H_{nm}^* &= \left(\int d\mathbf{r} \psi_m^* H \psi_n \right)^* = \int d\mathbf{r} \psi_m H \psi_n^* \\ &= \int d\mathbf{r} \psi_m \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} \right) + v(\mathbf{r}) \psi_n^* \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \int d\mathbf{r} \psi_m \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} \right) + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \psi_n^* \psi_m \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left[\psi_m \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar^2}{2} \int d\mathbf{r} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \psi_n^* \psi_m \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \int d\mathbf{r} \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{r}} + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \psi_n^* \psi_m \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

となる。以上の式 (A.3) と (A.4) より

$$H_{mn}^* = H_{nm} \quad (\text{A.5})$$

となり、ハミルトニアン (A.1) はエルミート性を満たしていることが分かる。

Appendix B

位置と運動量の行列要素の関係

二準位 n 、 m 間の遷移を考える。この時、各準位に対して、次の Schrödinger 方程式が成り立っているとする。

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad (\text{B.1})$$

$$H\varphi_m = E_m\varphi_m \quad (\text{B.2})$$

まず次の演算を行う。

$$\begin{aligned} \int dx (H\varphi_n)^* x \varphi_m - \int dx \varphi_n^* x (H\varphi_m) &= \hbar\omega_n \int dx \varphi_n^* x \varphi_m - \hbar\omega_m \int dx \varphi_n^* x \varphi_m \\ &= \hbar(\omega_n - \omega_m) \int dx \varphi_n^* x \varphi_m \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

これより次式が得られる。

$$\int dx \varphi_n^* x \varphi_m = \frac{1}{\hbar\omega_{nm}} \left\{ \int dx (H\varphi_n)^* x \varphi_m - \int dx \varphi_n^* x (H\varphi_m) \right\} \quad (\text{B.4})$$

さらに、ハミルトニアン H のエルミート性 $\int dx (H\varphi_n)^* x \varphi_m = \int dx \varphi_n^* (Hx - xH)\varphi_m$ を用いると

$$\int dx \varphi_n^* x \varphi_m = \frac{1}{\hbar\omega_{nm}} \int dx \varphi_n^* (Hx - xH)\varphi_m \quad (\text{B.5})$$

となる。ハミルトニアン H を

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \quad (\text{B.6})$$

とすると、式 (B.5) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \int dx \varphi_n^* x \varphi_m &= \frac{1}{\hbar\omega_{nm}} \int dx \left[\varphi_n^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) (x\varphi_m) - \varphi_n^* x \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \varphi_m \right] \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m_0\hbar\omega_{nm}} \int dx \left[\varphi_n^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\varphi_m) + V\varphi_n^* x \varphi_m - \varphi_n^* x \frac{\partial^2 \varphi_m}{\partial x^2} - V\varphi_n^* x \varphi_m \right] \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m_0\hbar\omega_{nm}} \int dx \varphi_n^* \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\varphi_m + x \frac{\partial \varphi_m}{\partial x} \right) - x \frac{\partial^2 \varphi_m}{\partial x^2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-\hbar^2}{2m_0\hbar\omega_{nm}} \int dx \varphi_n^* \left(\frac{\partial \varphi_m}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_m}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \varphi_m}{\partial x^2} - x \frac{\partial^2 \varphi_m}{\partial x^2} \right) \\
&= \frac{-\hbar^2}{m_0\hbar\omega_{nm}} \int dx \varphi_n^* \frac{\partial \varphi_m}{\partial x} = \frac{1}{-jm_0\omega_{nm}} \int dx \varphi_n^* \frac{\hbar}{-j} \frac{\partial \varphi_m}{\partial x} \\
&= \frac{1}{-jm_0\omega_{nm}} \int dx \varphi_n^* p_x \varphi_m
\end{aligned} \tag{B.7}$$

以上より、次式が得られることが分かる。

$$X_{nm} = \frac{1}{-jm_0\omega_{nm}} p_{nm} = \frac{\hbar}{-jm_0} \frac{1}{E_{nm}} p_{nm} \tag{B.8}$$

但し

$$X_{nm} = \int dx \varphi_n^* x \varphi_m \quad , \quad p_{nm} = \int dx \varphi_n^* p_x \varphi_m \tag{B.9}$$

と置いた。

Appendix C

古典的モーメント方程式

次式の古典的ボルツマン輸送方程式から、二次までのモーメント方程式を導出する。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \quad (\text{C.1})$$

但し、上式において、散乱項は無視している。上式の両辺を運動量空間で積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial t} + \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad (\text{C.2})$$

となる。上式の左辺の各項を計算すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} (\text{左辺第一項}) &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f \right] = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial n}{\partial t} \\ (\text{左辺第二項}) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -e\mathbf{E} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = [-e\mathbf{E} \cdot \mathbf{f}]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty} = 0 \\ (\text{左辺第三項}) &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = -(2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3 m^*} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{p} f \right] \\ &= -(2\pi\hbar)^3 \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) \end{aligned}$$

以上より、0次のモーメント方程式が次式のように得られる。

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) = 0} \quad (\text{C.3})$$

また、ボルツマン輸送方程式の両辺に \mathbf{p} を掛けて、運動量空間で積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{p} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial t} + \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) \mathbf{p} + \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{p} = 0 \quad (\text{C.4})$$

となる。同様に、左辺の各項を計算すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} (\text{左辺第一項}) &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{p} f = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{p} f \right] = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial \langle \mathbf{p} \rangle}{\partial t} \\ (\text{左辺第二項}) &= -e \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) \mathbf{p} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -e \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \left(E_x \frac{\partial f}{\partial p_x} + E_y \frac{\partial f}{\partial p_y} + E_z \frac{\partial f}{\partial p_z} \right) (p_x i_x + p_y i_y + p_z i_z) \\
&= -e E_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_x \frac{\partial f}{\partial p_x} i_x - e E_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_y \frac{\partial f}{\partial p_y} i_y \\
&\quad - e E_z \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_z \frac{\partial f}{\partial p_z} i_z - e E_y \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp_x p_x}_{=0} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z \frac{\partial f}{\partial p_y} i_x - \dots \\
&= -e E_x \left([p_x f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f \right) i_x - e E_y \left([p_y f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f \right) i_y \\
&\quad - e E_z \left([p_z f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f \right) i_z \\
&= (2\pi\hbar)^3 e (n E_x i_x + n E_y i_y + n E_z i_z) = (2\pi\hbar)^3 e n \mathbf{E} = -(2\pi\hbar)^3 n \nabla v(\mathbf{r}) \\
(\text{左辺第三項}) \quad &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) \mathbf{p} = -(2\pi\hbar)^3 \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \underbrace{\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (\mathbf{p} f) \mathbf{p} \right]}_{\nabla \cdot \langle \mathbf{p} \mathbf{p} \rangle \text{ と置く}} \\
&= -(2\pi\hbar)^3 \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right)
\end{aligned}$$

以上より、1次のモーメント方程式が次式のように得られる。

$$\boxed{\frac{\partial \langle \mathbf{p} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p} \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) + n \nabla v(\mathbf{r}) = 0} \quad (\text{C.5})$$

さらに、ボルツマン輸送方程式の両辺に p^2 を掛けて、運動量空間で積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} p^2 \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial t} + \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) p^2 + \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) p^2 = 0 \quad (\text{C.6})$$

となる。同様に、左辺の各項を計算すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}
(\text{左辺第一項}) \quad &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} p^2 f = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} p^2 f \right] = (2\pi\hbar)^3 \frac{\partial \langle p^2 \rangle}{\partial t} \\
(\text{左辺第二項}) \quad &= -e \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right) p^2 \\
&= -e \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z \left(E_x \frac{\partial f}{\partial p_x} + E_y \frac{\partial f}{\partial p_y} + E_z \frac{\partial f}{\partial p_z} \right) (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \\
&= -e E_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_x^2 \frac{\partial f}{\partial p_x} - e E_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_y^2 \frac{\partial f}{\partial p_y} \\
&\quad - e E_z \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_z^2 \frac{\partial f}{\partial p_z} - e E_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \frac{\partial f}{\partial p_x} \times \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z p_y^2 - \dots \\
&= -e E_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z \underbrace{[p_x^2 f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty}}_{=0} + 2e E_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_x f \\
&\quad - e E_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_z \underbrace{[p_y^2 f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty}}_{=0} + 2e E_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_y f
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -eE_z \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y \underbrace{[p_z^2 f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty}}_{=0} + 2eE_z \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y dp_z p_z f \\
& -eE_x \underbrace{[f]_{\mathbf{p}=-\infty}^{\mathbf{p}=\infty}}_{=0} \times \int_{-\infty}^{\infty} dp_y dp_z p_y^2 - \dots \\
& = 2eE_x \langle p_x \rangle + 2eE_y \langle p_y \rangle + 2eE_z \langle p_z \rangle \\
& = 2e\mathbf{E} \cdot \langle \mathbf{p} \rangle = -2 \langle \mathbf{p} \rangle \cdot \nabla v(\mathbf{r}) \\
\text{(左辺第三項)} & = - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(\frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) p^2 = -(2\pi\hbar)^3 \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \underbrace{\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (\mathbf{p}f) p^2 \right]}_{\nabla \cdot \langle p^2 \mathbf{p} \rangle \text{ と置く}} \\
& = -(2\pi\hbar)^3 \nabla \cdot \left(\frac{\langle p^2 \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right)
\end{aligned}$$

以上より

$$\frac{\partial \langle p^2 \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\langle p^2 \mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) + 2[\nabla v(\mathbf{r})] \cdot \langle \mathbf{p} \rangle = 0 \quad (\text{C.7})$$

が得られる。さらに、上式の両辺を $2m^*$ で割ると、2 次のモーメント方程式が次式のように得られる。

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{2m^*} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\langle p^2 \mathbf{p} \rangle}{2m^{*2}} \right) + \frac{[\nabla v(\mathbf{r})] \cdot \langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} = 0} \quad (\text{C.8})$$

このように、古典的ボルツマン輸送方程式から導出される二次までのモーメント方程式 (C.3)、(C.5) および (C.8) は、表現上は量子モーメント方程式と全く一致していることが分かる。

次に、これらのモーメント方程式から、粒子数保存、運動量保存およびエネルギー保存を表す方程式を導き出すことにする。まず、1 次のモーメント $\langle \mathbf{p} \rangle$ を平均運動量 $n\mathbf{p}_0$ を用いて次のように表す。

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = n\mathbf{p}_0 = nm^* \mathbf{v} \quad (\text{C.9})$$

また、運動量のずれ \mathbf{P} を

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0 \quad (\text{C.10})$$

で定義する。この時

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{P} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) & = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \mathbf{p} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) - \mathbf{p}_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \\
& = (2\pi\hbar)^3 \langle \mathbf{p} \rangle - n\mathbf{p}_0 = (2\pi\hbar)^3 (n\mathbf{p}_0 - n\mathbf{p}_0) = \mathbf{0}
\end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

となる。まず、式 (C.9) を 0 次のモーメント方程式 (C.3) に代入すると、次の粒子数保存の方程式が得られることが分かる。

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0} \quad (\text{C.12})$$

次に、1 次のモーメント方程式 (C.5) を式 (C.10) の平均運動量 \mathbf{p}_0 を用いて変形する。まず、 $\langle \mathbf{p} \rangle = n\mathbf{p}_0$ より

$$\text{(左辺第一項)} = \frac{\partial \langle \mathbf{p} \rangle}{\partial t} = n \frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial t} + \mathbf{p}_0 \frac{\partial n}{\partial t} \quad (\text{C.13})$$

$$\text{(左辺第二項)} = \nabla \cdot \left(\frac{\langle \mathbf{p}\mathbf{p} \rangle}{m^*} \right) = \frac{1}{m^*} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} f}_{\mathbf{A} \text{ と置く}} \quad (\text{C.14})$$

となる。ここで、 \mathbf{A} の i 成分を考える。

$$\begin{aligned} A_i &= \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (\mathbf{p} \cdot \nabla) p_i f = \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} p_i p_j f = \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (p_{0i} + P_i) (p_{0j} + P_j) f \\ &= (2\pi\hbar)^3 \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ p_{0i} p_{0j} n + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{P} P_i P_j \right\} \\ &= (2\pi\hbar)^3 \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} p_{0i} p_{0j} n + (2\pi\hbar)^3 \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{P} P_i P_j \\ &= (2\pi\hbar)^3 \left\{ \sum_j \frac{\partial (n p_{0j})}{\partial r_j} p_{0i} + \sum_j \frac{\partial (p_{0i})}{\partial r_j} n p_{0j} + m^* \frac{\partial}{\partial r_i} n k_B \hat{T} \right\} \end{aligned}$$

但し、 \hat{T} は、式 (2.135) で定義される温度テンソルである。上式より

$$\text{(左辺第二項)} = \frac{1}{m^*} [\nabla \cdot (n\mathbf{p}_0)] \mathbf{p}_0 + \frac{1}{m^*} n (\mathbf{p}_0 \cdot \nabla) \mathbf{p}_0 + \nabla (n k_B \hat{T}) \quad (\text{C.15})$$

となる。式 (C.13) と (C.15) を一次のモーメント方程式 (C.5) に代入すると

$$n \frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial t} + \mathbf{p}_0 \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{m^*} [\nabla \cdot (n\mathbf{p}_0)] \mathbf{p}_0 + \frac{1}{m^*} n (\mathbf{p}_0 \cdot \nabla) \mathbf{p}_0 + \nabla (n k_B \hat{T}) + n \nabla v(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{C.16})$$

となる。さらに、上式において、粒子数保存の関係 (C.12) を用いると

$$n \frac{\partial \mathbf{p}_0}{\partial t} + n \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{p}_0 + \nabla (n k_B \hat{T}) + n \nabla v(\mathbf{r}) = 0$$

と表すことができる。上式の両辺を $m^* n$ で割ると、次の運動量保存の方程式が得られる。

$$\boxed{\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} + \frac{1}{m^* n} \nabla (n k_B \hat{T}) = 0} \quad (\text{C.17})$$

次に、2 次のモーメント方程式 (C.8) を式 (C.10) の平均運動量 \mathbf{p}_0 を用いて変形する。

$$\text{(左辺第一項)} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\langle p^2 \rangle}{2m^*} \right) = \frac{\partial}{\partial t} (n w) = \frac{\partial n}{\partial t} w + n \frac{\partial w}{\partial t} \quad (\text{C.18})$$

$$\begin{aligned} \text{(左辺第二項)} &= \nabla \cdot \left(\frac{\langle p^2 \mathbf{p} \rangle}{2m^{*2}} \right) = \frac{1}{2m^{*2}} \nabla \cdot \langle p^2 \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{2m^{*2}} \nabla \cdot \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} p^2 \mathbf{p} f \right] \\ &= \frac{1}{2m^{*2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} (P^2 + 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{p}_0 + p_0^2) (P_j + p_{0j}) f \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2m^{*2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \left(P^2 P_j + P^2 p_{0j} + 2 \sum_i P_i p_{0i} P_j \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_i P_i p_{0i} p_{0j} + p_0^2 P_j + p_0^2 p_{0j} \right) f \\
&= \frac{1}{2m^{*2}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P^2 P_j f + p_{0j} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P^2 f + 2 \sum_i p_{0i} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P_i P_j f \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_i p_{0i} p_{0j} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P_i f + p_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P_j f + p_{0j} p_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f \right\} \\
&= \frac{1}{2m^{*2}} \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P^2 P_j f + p_{0j} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P^2 f \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_i p_{0i} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} P_i P_j f + p_{0j} p_0^2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} f \right\} \\
&= \frac{1}{2m^{*2}} \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ 2m^{*2} Q_j + nk_B m^* \text{Tr}(\hat{T}) p_{0j} + 2 \sum_i p_{0i} nk_B m^* T_{ij} + p_0^2 n p_{0j} \right\} \\
&= \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ Q_j + \frac{p_{0j}}{2m^*} nk_B \text{Tr}(\hat{T}) + \frac{1}{m^*} \sum_i p_{0i} nk_B T_{ij} + \frac{np_0^2}{2m^{*2}} p_{0j} \right\} \\
&= \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ n \left[\frac{p_0^2}{2m^*} + \frac{1}{2} k_B \text{Tr}(\hat{T}) \right] \frac{p_{0j}}{m^*} \right\} + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left\{ nk_B \sum_i T_{ij} \frac{p_{0i}}{m^*} + Q_j \right\} \\
&= \frac{1}{m^*} \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} (n w p_{0j}) + \sum_j \frac{\partial}{\partial r_j} \left[\frac{1}{m^*} nk_B (\hat{T} \mathbf{p}_0)_j + Q_j \right] \\
&= \frac{1}{m^*} \nabla \cdot (n w \mathbf{p}_0) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*} nk_B \hat{T} \mathbf{p}_0 + \mathbf{Q} \right) \\
&= \frac{1}{m^*} w \nabla \cdot (n \mathbf{p}_0) + \frac{1}{m^*} \nabla w \cdot (n \mathbf{p}_0) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*} nk_B \hat{T} \mathbf{p}_0 + \mathbf{Q} \right) \tag{C.19}
\end{aligned}$$

$$(\text{左辺第三項}) = \frac{[\nabla v(\mathbf{r})] \cdot \langle \mathbf{p} \rangle}{m^*} = \frac{1}{m^*} \langle \mathbf{p} \rangle \cdot \nabla v(\mathbf{r}) = \frac{1}{m^*} n \mathbf{p}_0 \cdot \nabla v(\mathbf{r}) \tag{C.20}$$

但し、 w および \mathbf{Q} は、それぞれ、式(2.131)および(2.136)で定義されるエネルギーと熱流である。式(C.18)~(C.20)を二次のモーメント方程式(C.8)に代入すると

$$\frac{\partial n}{\partial t} w + n \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{1}{m^*} w \nabla \cdot (n \mathbf{p}_0) + \frac{1}{m^*} \nabla w \cdot (n \mathbf{p}_0) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*} nk_B \hat{T} \mathbf{p}_0 + \mathbf{Q} \right) + \frac{1}{m^*} n \mathbf{p}_0 \cdot \nabla v(\mathbf{r}) = 0 \tag{C.21}$$

となる。さらに、粒子数保存の関係(C.12)を上式に用いると

$$n \frac{\partial w}{\partial t} + \nabla w \cdot (n \mathbf{v}) + \nabla \cdot (n v k_B \hat{T} + \mathbf{Q}) + n \mathbf{v} \cdot \nabla v = 0$$

と表すことができる。上式の両辺を n で割ると、次のエネルギー保存の方程式が得られる。

$$\boxed{\frac{\partial w}{\partial t} + q \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{v} \cdot \nabla w + \frac{1}{n} \nabla \cdot (n v k_B \hat{T}) + \frac{1}{n} \nabla \cdot \mathbf{Q} = 0} \tag{C.22}$$

Appendix D

式 (3.8) の関係

$\frac{1}{m^+(\chi, \xi)}$ の ξ に関する微分を、式 (3.4) の関係を使って変形すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \frac{\partial x'}{\partial \xi} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) - \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

となる。また、 $\frac{1}{m^-(\chi, \xi)}$ の χ に関する微分を、式 (3.4) の関係を使って変形すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) &= \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \frac{\partial x}{\partial \chi} - \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \frac{\partial x'}{\partial \chi} \\ &= \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) - \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

となる。これら二式より、次の関係が成り立つことが分かる。

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) \quad (\text{D.3})$$

同様に、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} - \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \frac{\partial x}{\partial \xi} - \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \frac{\partial x'}{\partial \xi} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) + \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

と

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) &= \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^*(\chi + \frac{\xi}{2})} + \frac{1}{m^*(\chi - \frac{\xi}{2})} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) \frac{\partial x}{\partial \chi} + \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \frac{\partial x'}{\partial \chi} \\ &= \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \right) + \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{m^*(x')} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

より、次式が成り立つ。

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{m^-(\chi, \xi)} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{m^+(\chi, \xi)} \right) \quad (\text{D.6})$$

Appendix E

Fermi-Dirac 分布関数の積分

Fermi-Dirac 分布関数を横方向の波数で積分すると次のようになる。

$$\begin{aligned}
 f_{l,r}(k) &= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{k}_t d\mathbf{k}_t}{1 + \exp[(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{l,r}^*} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}})/k_B T]} \\
 &= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \frac{2\pi k_t dk_t}{1 + \exp[(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{l,r}^*} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}})/k_B T]} \tag{E.1}
 \end{aligned}$$

ここで

$$x = \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{l,r}^*} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}} \right)$$

と置くと

$$\frac{\hbar^2 k_t}{m_{l,r}^*} dk_t = k_B T dx \quad \text{より} \quad k_t dk_t = \frac{m_{l,r}^* k_B T}{\hbar^2} dx$$

となる。この時、積分範囲は次のように変化する。

$$0 \leq k_t \leq \infty \quad \text{より} \quad x_0 = \frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}} \right) \leq x \leq \infty$$

これらを用いて式 (E.1) の積分を計算すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 f_{l,r}(k) &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{2\pi m_{l,r}^* k_B T}{\hbar^2} \int_{x_0}^{\infty} \frac{dx}{1 + e^x} = \frac{m_{l,r}^* k_B T}{\pi \hbar^2} \int_{x_0}^{\infty} dx \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}} \\
 &= \frac{m_{l,r}^* k_B T}{\pi \hbar^2} [-\ln(1 + e^{-x})]_{x_0}^{\infty} \\
 &= \frac{m_{l,r}^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{l,r}^*} - E_{f_{l,r}} \right) \right] \right\} \tag{E.2}
 \end{aligned}$$

Appendix F

相対座標 ξ の分割数 N_ξ

ξ に関する和の上限 N_ξ について議論するために、式 (3.105) を考える。

$$M_4(n, m - m') = \frac{1}{N_k} \sum_{i=0}^{N_\xi} \frac{\cos[(m - m')\Delta_k \cdot 2i\Delta_x]}{m^+(n, i)} \quad (\text{F.1})$$

ここで、 $N_k = \pi/\Delta_k\Delta_x$ を使って \cos 項の中を書き換えると

$$M_4(n, m - m') = \frac{1}{N_k} \sum_{i=0}^{N_\xi} \frac{\cos\left[\frac{(m - m')}{N_k} \cdot 2i\pi\right]}{m^+(n, i)} \quad (\text{F.2})$$

となる。今、有効質量一定の場合 ($m^* = m^*$) を考えることにする。この時、 $\frac{1}{m^+(n, i)} = \frac{2}{m^*}$ となるから

$$M_4(n, m - m') = \frac{1}{N_k} \frac{2}{m^*} \sum_{i=0}^{N_\xi} \cos\left[\frac{(m - m')}{N_k} \cdot 2i\pi\right] \quad (\text{F.3})$$

となる。有効質量が一定の場合、他の $M_1(n, m - m')$ 、 $M_2(n, m - m')$ および $M_3(n, m - m')$ は零になる。従って、離散化された Liouville 方程式 (3.95) が従来の有効質量が一定の場合の式と一致するためには

$$M_4(n, m - m') = \begin{cases} 0 & (m \neq m') \\ \frac{1}{m^*} & (m = m') \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

でなければならないことが分かる。式 (F.3) で $m \neq m'$ の場合、 $\cos\left[\frac{(m - m')}{N_k} \cdot 2i\pi\right]$ の項より

$$N_\xi = \frac{N_k}{2} \times n \quad (n : \text{整数}) \quad (\text{F.5})$$

が満たされる時には、 $M_4(n, m - m') = 0$ となることが分かる。さらに、式 (F.3) で $m = m'$ の場合には

$$M_4(n, 0) = \frac{2}{N_k m^*} \sum_{i=0}^{N_\xi} 1 = \frac{2N_\xi}{N_k m^*} \quad (\text{F.6})$$

となる。上式が $\frac{1}{m^*}$ に等しくなれば良いことから次式の条件が得られる。

$$N_{\xi} = \frac{N_k}{2} \quad (\text{F.7})$$

これら二つの条件 (F.5) と (F.7) を同時に満たすためには

$$\boxed{N_{\xi} = \frac{N_k}{2}} \quad (\text{F.8})$$

とすれば良いことが分かる。

Appendix G

ウィグナー関数モデルの小信号解析

直流電圧に微小交流電圧信号を重畳した時の Liouville 演算子 (3.154) と二次の項まで展開したウィグナー関数 (3.155) を Liouville 方程式 (3.153) に代入すると、左辺および右辺は、それぞれ、次のようになる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{2}\lambda j\omega (f_\omega e^{j\omega t} - f_\omega^* e^{-j\omega t}) + \lambda^2 j\omega (f_{2\omega} e^{j2\omega t} - f_{2\omega}^* e^{-j2\omega t}) \quad (\text{G.1})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}f &= \left[\mathcal{L}_0 + \frac{1}{2}\lambda (\mathcal{L}_\omega e^{j\omega t} + \mathcal{L}_\omega^* e^{-j\omega t}) \right] \\ &\times \left[f_0 + \frac{1}{2}\lambda (f_\omega e^{j\omega t} + f_\omega^* e^{-j\omega t}) + \lambda^2 f_{rect} + \frac{1}{2}\lambda^2 (f_{2\omega} e^{j2\omega t} + f_{2\omega}^* e^{-j2\omega t}) \right] \\ &= \mathcal{L}_0 f_0 + \frac{1}{2}\lambda (\mathcal{L}_0 f_\omega e^{j\omega t} + \mathcal{L}_0 f_\omega^* e^{-j\omega t} + \mathcal{L}_\omega f_0 e^{j\omega t} + \mathcal{L}_\omega^* f_0 e^{-j\omega t}) \\ &\quad + \lambda^2 \left[\frac{1}{4} (\mathcal{L}_\omega f_\omega e^{j2\omega t} + \mathcal{L}_\omega^* f_\omega^* e^{-j2\omega t} + \mathcal{L}_\omega f_\omega^* + \mathcal{L}_\omega^* f_\omega) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{L}_0 f_{rect} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_0 f_{2\omega} e^{j2\omega t} + \mathcal{L}_0 f_{2\omega}^* e^{-j2\omega t}) \right] \end{aligned} \quad (\text{G.2})$$

上の二式において、 λ の次数と角周波数 ω の等しい項を比較すると

$$0 = \mathcal{L}_0 f_0 \quad , \quad \frac{1}{2}j\omega f_\omega = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_0 f_\omega + \mathcal{L}_\omega f_0) \quad (\text{G.3})$$

$$j\omega f_{2\omega} = \frac{1}{4}\mathcal{L}_\omega f_\omega + \frac{1}{2}\mathcal{L}_0 f_{2\omega} \quad , \quad 0 = \frac{1}{4}(\mathcal{L}_\omega f_\omega^* + \mathcal{L}_\omega^* f_\omega) + \mathcal{L}_0 f_{rect} \quad (\text{G.4})$$

となる。従って、各次数のウィグナー関数は、それぞれ、次式で求めることができる。

$$\mathcal{L}_0 f_0 = 0 \quad , \quad f_\omega = -\frac{1}{\mathcal{L}_0 - j\omega} \mathcal{L}_\omega f_0 \quad (\text{G.5})$$

$$f_{2\omega} = \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{L}_0 - 2j\omega} \mathcal{L}_\omega \frac{1}{\mathcal{L}_0 - j\omega} \mathcal{L}_\omega f_0 \quad , \quad f_{rect} = \frac{1}{2\mathcal{L}_0} \text{Re} \left(\mathcal{L}_\omega^* \frac{1}{\mathcal{L}_0 - j\omega} \mathcal{L}_\omega f_0 \right) \quad (\text{G.6})$$

Appendix H

モードマッチング法による透過確率の計算

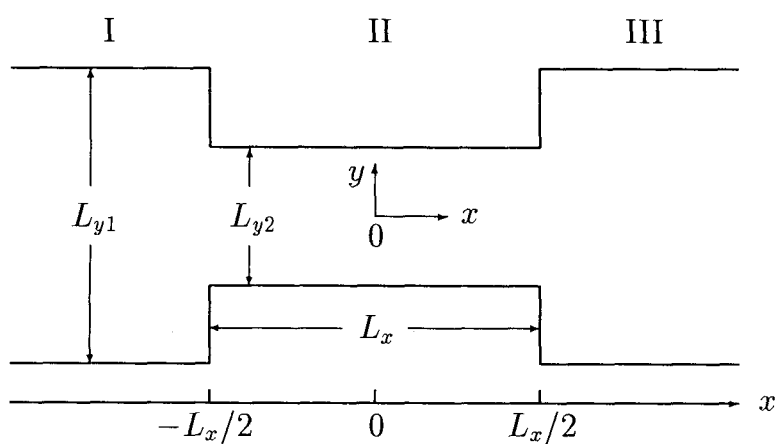


図 H.1: Wide-Narrow-Wide 電子導波路構造

一次元 (1D) constriction と二次元 (2D) コンタクトが、図 H.1 のように不連続に接続されている場合を考える。座標の原点を 1D constriction の中心にとり、2D コンタクトと 1D constriction の y 方向の幅を、それぞれ、 L_{y1} 、 L_{y2} とする。また、導波路の長さを L_x とする。この時、各領域 I、II および III における波動関数は、次のように表すことができる。

$$\psi_{\text{I}}(x, y) = \phi_w(y)e^{-jk_w x} + \sum_{m=1}^{\infty} r_{mw} \phi_m(y)e^{jk_m x} \quad (\text{H.1})$$

$$\psi_{\text{II}}(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(y) [\alpha_{nw} e^{-jk_n x} + \beta_{nw} e^{jk_n x}] \quad (\text{H.2})$$

$$\psi_{\text{III}}(x, y) = \sum_{l=1}^{\infty} t_{lw} \phi_l(y)e^{-jk_l x} \quad (\text{H.3})$$

但し、 $\phi_m(y)$ と $\varphi_n(y)$ は、 y 方向の固有関数であり、次式で与えられる。

$$\phi_m(y) = \sqrt{\frac{2}{L_{y1}}} \sin \left[\frac{m\pi}{L_{y1}} \left(y + \frac{L_{y1}}{2} \right) \right] \quad (\text{H.4})$$

$$\varphi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{L_{y2}}} \sin \left[\frac{n\pi}{L_{y2}} \left(y + \frac{L_{y2}}{2} \right) \right] \quad (\text{H.5})$$

ここで、2D コンタクトと 1D constriction の境界、 $x = \pm \frac{L_x}{2}$ において、次の境界条件を与える。

$$\psi_{\text{I}} \left(-\frac{L_x}{2}, y \right) = \psi_{\text{II}} \left(-\frac{L_x}{2}, y \right), \quad \psi_{\text{II}} \left(\frac{L_x}{2}, y \right) = \psi_{\text{III}} \left(\frac{L_x}{2}, y \right) \quad (\text{H.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{I}} \Big|_{x=-L_x/2} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{II}} \Big|_{x=-L_x/2}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{II}} \Big|_{x=L_x/2} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{III}} \Big|_{x=L_x/2} \quad (\text{H.7})$$

この時、次の四つの式が成り立つ。

$$\phi_w(y) e^{jk_w L_x/2} + \sum_m r_{mw} \phi_m(y) e^{-jk_m L_x/2} = \sum_n \varphi_n(y) \left[\alpha_{nw} e^{jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{-jk_n L_x/2} \right] \quad (\text{H.8})$$

$$\sum_n \varphi_n(y) \left[\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2} \right] = \sum_l t_{lw} \phi_l(y) e^{-jk_l L_x/2} \quad (\text{H.9})$$

$$k_w \phi_w(y) e^{jk_w L_x/2} - \sum_m r_{mw} k_m \phi_m(y) e^{-jk_m L_x/2} = \sum_n k_n \varphi_n(y) \left[\alpha_{nw} e^{jk_n L_x/2} - \beta_{nw} e^{-jk_n L_x/2} \right] \quad (\text{H.10})$$

$$\sum_n k_n \varphi_n(y) \left[\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} - \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2} \right] = \sum_l t_{lw} k_l \phi_l(y) e^{-jk_l L_x/2} \quad (\text{H.11})$$

まず、式 (H.8) に $\phi_q(y)$ を、式 (H.10) に $\varphi_s(y)$ を掛けて、 y で積分すると、次の二式が得られる。

$$\delta_{qw} e^{jk_w L_x/2} + r_{qw} e^{-jk_q L_x/2} = \sum_n a_{nq} \left[\alpha_{nw} e^{jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{-jk_n L_x/2} \right] \quad (\text{H.12})$$

$$k_w a_{sw} e^{jk_w L_x/2} - \sum_m r_{mw} k_m a_{sm} e^{-jk_m L_x/2} = k_s \left[\alpha_{sw} e^{jk_s L_x/2} - \beta_{sw} e^{-jk_s L_x/2} \right] \quad (\text{H.13})$$

ここで

$$a_{nq} = \int_{-L_{y2}/2}^{L_{y2}/2} dy \phi_q(y) \varphi_n(y) \quad (\text{H.14})$$

と置いた。式 (H.12) と (H.13) より r_{mw} を消去する。式 (H.12) より

$$r_{mw} e^{-jk_m L_x/2} = \sum_n a_{nm} \left[\alpha_{nw} e^{jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{-jk_n L_x/2} \right] - \delta_{mw} e^{jk_w L_x/2} \quad (\text{H.15})$$

となるので、これを式 (H.13) に代入すると

$$\begin{aligned} k_w a_{sw} e^{jk_w L_x/2} - \sum_m k_m a_{sm} \left[\sum_n a_{nm} \left(\alpha_{nw} e^{jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{-jk_n L_x/2} \right) - \delta_{mw} e^{jk_w L_x/2} \right] \\ = k_s \left(\alpha_{sw} e^{jk_s L_x/2} - \beta_{sw} e^{-jk_s L_x/2} \right) \end{aligned}$$

$$k_w a_{sw} e^{jk_w L_x/2} + k_w a_{sw} e^{jk_w L_x/2} = \sum_n \sum_m a_{nm} k_m a_{sm} (\alpha_{nw} e^{jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{-jk_n L_x/2}) \\ + k_s (\alpha_{sw} e^{jk_s L_x/2} - \beta_{sw} e^{-jk_s L_x/2})$$

となり、上式より

$$\sum_n [(A_{ns} + \delta_{sn} k_n) e^{jk_n L_x/2} \alpha_{nw} + (A_{ns} - \delta_{sn} k_n) e^{-jk_n L_x/2} \beta_{nw}] = 2k_w a_{sw} e^{jk_w L_x/2} \quad (\text{H.16})$$

が得られる。但し

$$A_{ns} = \sum_m a_{nm} k_m a_{sm} \quad (\text{H.17})$$

と置いた。

次に、式 (H.9) に $\phi_q(y)$ を、式 (H.11) に $\varphi_s(y)$ を掛けて、 y で積分すると、次の二式が得られる。

$$\sum_n a_{nq} (\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2}) = t_{qw} e^{-jk_q L_x/2} \quad (\text{H.18})$$

$$k_s (\alpha_{sw} e^{-jk_s L_x/2} - \beta_{sw} e^{jk_s L_x/2}) = \sum_l t_{lw} k_l a_{sl} e^{-jk_l L_x/2} \quad (\text{H.19})$$

上の二式より r_{mw} を消去する。式 (H.18) より

$$t_{lw} e^{-jk_l L_x/2} = \sum_n a_{nl} (\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2}) \quad (\text{H.20})$$

これを、式 (H.19) に代入すると

$$k_s (\alpha_{sw} e^{-jk_s L_x/2} - \beta_{sw} e^{jk_s L_x/2}) = \sum_l k_l a_{sl} \sum_n a_{nl} (\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2}) \\ = \sum_n \sum_l a_{nl} k_l a_{sl} (\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2})$$

となり、上式より

$$\sum_n [(A_{ns} - \delta_{sn} k_n) e^{-jk_n L_x/2} \alpha_{nw} + (A_{ns} + \delta_{sn} k_n) e^{jk_n L_x/2} \beta_{nw}] = 0 \quad (\text{H.21})$$

が得られる。以上をまとめると、次のようになる。

$$\sum_n [(A_{ns} + \delta_{sn} k_n) e^{jk_n L_x/2} \alpha_{nw} + (A_{ns} - \delta_{sn} k_n) e^{-jk_n L_x/2} \beta_{nw}] = 2k_w a_{sw} e^{jk_w L_x/2} \quad (\text{H.22})$$

$$\sum_n [(A_{ns} - \delta_{sn} k_n) e^{-jk_n L_x/2} \alpha_{nw} + (A_{ns} + \delta_{sn} k_n) e^{jk_n L_x/2} \beta_{nw}] = 0 \quad (\text{H.23})$$

但し

$$A_{ns} = \sum_m a_{nm} k_m a_{sm} \quad (\text{H.24})$$

$$a_{nq} = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \phi_q(y) \varphi_n(y) \quad (\text{H.25})$$

と置いた。上式 (H.22) と (H.23) から α_{nw} と β_{nw} を求め、さらに式 (H.20) を変形した次式を用いて、振幅透過率 t_{lw} を計算することができる。

$$t_{lw} = e^{jk_l L_x/2} \sum_n a_{nl} \left(\alpha_{nw} e^{-jk_n L_x/2} + \beta_{nw} e^{jk_n L_x/2} \right) \quad (\text{H.26})$$

電子導波路のコンダクタンス G は、ランダウア公式より

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_l \sum_w |t_{lw}|^2 \frac{k_l}{k_w} \quad (\text{H.27})$$

で与えられる [70]。

式 (H.22) と (H.23) から α_{nw} と β_{nw} を求める方法

式 (H.22) と (H.23) を、それぞれ、次のように表す。

$$\sum_n (E_{ns} \alpha_{nw} + F_{ns} \beta_{nw}) = Z_{sw} \quad (\text{H.28})$$

$$\sum_n (G_{ns} \alpha_{nw} + H_{ns} \beta_{nw}) = 0 \quad (\text{H.29})$$

上式を行列表示すると、次のようになる。

$$\begin{pmatrix} E_{11} & E_{21} & \cdots & \cdots \\ E_{12} & E_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1w} \\ \alpha_{2w} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_{11} & F_{21} & \cdots & \cdots \\ F_{12} & F_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{1w} \\ \beta_{2w} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_{1w} \\ z_{2w} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{H.30})$$

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{21} & \cdots & \cdots \\ G_{12} & G_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1w} \\ \alpha_{2w} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H_{11} & H_{21} & \cdots & \cdots \\ H_{12} & H_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{1w} \\ \beta_{2w} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{H.31})$$

上式 (H.30) と (H.31) を一つの行列にまとめると

$$\begin{pmatrix} E_{11} & F_{11} & E_{21} & F_{21} & \cdots & \cdots \\ G_{11} & H_{11} & G_{21} & H_{21} & \cdots & \cdots \\ E_{12} & F_{12} & E_{22} & F_{22} & \cdots & \cdots \\ G_{12} & H_{12} & G_{22} & H_{22} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1w} \\ \beta_{1w} \\ \alpha_{2w} \\ \beta_{2w} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_{1w} \\ 0 \\ z_{2w} \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{H.32})$$

となるので、式 (H.32) の行列方程式を解けば、 α_{nw} と β_{nw} を求めることができる。

Appendix I

単一量子井戸内の Wigner 関数

無限大のポテンシャル障壁で幅 L_y の量子井戸内に閉じ込められた電子波に対するウィグナー関数を求める。まず、この時の電子波の波動関数は次式で与えられる。

$$\psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2L_y}} e^{-jK_y^n \frac{L_y}{2}} \left[e^{jK_y^n (y + \frac{L_y}{2})} - e^{-jK_y^n (y + \frac{L_y}{2})} \right] \quad (\text{I.1})$$

但し、 n はモード番号で、 $K_y^n = \frac{n\pi}{L_y}$ は量子化された波数を表す。上式の波動関数を用いて密度行列を計算する。 n 次モードの電子波に対する密度行列 $\rho_n(y_1, y_2)$ は、 $-\frac{L_y}{2} \leq y_1, y_2 \leq \frac{L_y}{2}$ の領域で

$$\begin{aligned} \rho_n(y_1, y_2) &= \psi_n(y_1) \psi_n^*(y_2) \\ &= \frac{1}{2L_y} \left[e^{jK_y^n (y_1 + \frac{L_y}{2})} - e^{-jK_y^n (y_1 + \frac{L_y}{2})} \right] \left[e^{-jK_y^n (y_2 + \frac{L_y}{2})} - e^{jK_y^n (y_2 + \frac{L_y}{2})} \right] \\ &= \frac{1}{2L_y} \left[e^{jK_y^n (y_1 - y_2)} + e^{-jK_y^n (y_1 - y_2)} - e^{-jK_y^n L_y} e^{-jK_y^n (y_1 + y_2)} - e^{jK_y^n L_y} e^{jK_y^n (y_1 + y_2)} \right] \quad (\text{I.2}) \end{aligned}$$

となる。ここで、式 (5.4) の変数変換を行うと

$$y_1 = y + \frac{u_y}{2}, \quad y_2 = y - \frac{u_y}{2} \quad (\text{I.3})$$

より

$$\rho_n \left(y + \frac{u_y}{2}, y - \frac{u_y}{2} \right) = \frac{1}{2L_y} \left(e^{jK_y^n u_y} + e^{-jK_y^n u_y} - e^{jK_y^n L_y} e^{j2K_y^n y} - e^{-jK_y^n L_y} e^{-j2K_y^n y} \right) \quad (\text{I.4})$$

と表される。上式を相対座標 u_y でフーリエ変換すると、ウィグナー関数 $f_y^n(y, k_y)$ は次式のようになる。

$$\begin{aligned} f_y^n(y, k_y) &= \int_{-\infty}^{\infty} du_y \rho_n \left(y + \frac{u_y}{2}, y - \frac{u_y}{2} \right) e^{jk_y u_y} \\ &= \frac{1}{2L_y} \left\{ \int_{-L_y+2|y|}^{L_y-2|y|} du_y \left[e^{j(K_y^n + k_y)u_y} + e^{-j(K_y^n - k_y)u_y} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[e^{jK_y^n (2y + L_y)} + e^{-jK_y^n (2y + L_y)} \right] \int_{-L_y+2|y|}^{L_y-2|y|} du_y e^{jk_y u_y} \right\} \quad (\text{I.5}) \end{aligned}$$

上式の右辺第一項と第二項の積分は、それぞれ、次のように計算できる。

$$\begin{aligned}
(\text{第一積分}) &= \int_{-L_y+2|y|}^{L_y-2|y|} du_y \left[e^{j(K_y^n+k_y)u_y} + e^{-j(K_y^n-k_y)u_y} \right] \\
&= \frac{1}{j(K_y^n+k_y)} \left[e^{j(K_y^n+k_y)(L_y-2|y|)} - e^{j(K_y^n+k_y)(-L_y+2|y|)} \right] \\
&\quad - \frac{1}{j(K_y^n-k_y)} \left[e^{-j(K_y^n-k_y)(L_y-2|y|)} - e^{-j(K_y^n-k_y)(-L_y+2|y|)} \right] \\
&= \frac{2 \sin[(K_y^n+k_y)(L_y-2|y|)]}{K_y^n+k_y} + \frac{2 \sin[(K_y^n-k_y)(L_y-2|y|)]}{K_y^n-k_y} \tag{I.6}
\end{aligned}$$

$$(\text{第二積分}) = \int_{-L_y+2|y|}^{L_y-2|y|} du_y e^{jk_y u_y} = \frac{e^{jk_y(L_y-2|y|)} - e^{jk_y(-L_y+2|y|)}}{jk_y} = \frac{2 \sin[k_y(L_y-2|y|)]}{k_y} \tag{I.7}$$

以上より、量子井戸内に閉じ込められた n 次モードの電子波に対するウィグナー関数は、次式のように表されることが分かる。

$$f_y^n(y, k_y) = \frac{1}{L_y} \left\{ \frac{\sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} + \frac{\sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n} - 2 \cos[K_y^n(L_y + 2y)] \frac{\sin[k_y(L_y - 2|y|)]}{k_y} \right\} \tag{I.8}$$

z 方向についても同様な計算を行うと

$$f_z^1(z, k_z) = \frac{1}{L_z} \left\{ \frac{\sin[(k_z + K_z^1)(L_z - 2|z|)]}{k_z + K_z^1} + \frac{\sin[(k_z - K_z^1)(L_z - 2|z|)]}{k_z - K_z^1} - 2 \cos[K_z^1(L_z + 2z)] \frac{\sin[k_z(L_z - 2|z|)]}{k_z} \right\} \tag{I.9}$$

が得られる。

次に、上式から、式 (5.22) の関係が導かれることを示す。式 (I.8) に k_y を掛けて、運動量空間で積分すると

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y f_y^n(y, k_y) &= \frac{1}{L_y} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y \frac{\sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} \right. \\
&\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y \frac{\sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n} - 2 \cos[K_y^n(L_y + 2y)] + \int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y \frac{\sin[k_y(L_y - 2|y|)]}{k_y} \right\} \tag{I.10}
\end{aligned}$$

となる。右辺の三つの積分を計算すると、それぞれ、次のようになる。

$$\begin{aligned}
(\text{第一積分}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y \frac{\sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \left\{ \frac{(k_y + K_y^n) \sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} - \frac{K_y^n \sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} \right\} \\
&= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dk_y \sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}_{0} - K_y^n \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{\sin[(k_y + K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y + K_y^n} \\
&= -\pi K_y^n \tag{I.11}
\end{aligned}$$

上式の最後の等式では、次の関係を使った。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\sin t}{t} = \pi \quad (\text{I.12})$$

また

$$\begin{aligned} (\text{第二積分}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y \frac{\sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \left\{ \frac{(k_y - K_y^n) \sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n} + \frac{K_y^n \sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n} \right\} \\ &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dk_y \sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}_0 + K_y^n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{\sin[(k_y - K_y^n)(L_y - 2|y|)]}{k_y - K_y^n}}_{\pi} \\ &= \pi K_y^n \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

$$(\text{第三積分}) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y \frac{\sin[k_y(L_y - 2|y|)]}{k_y} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \sin[k_y(L_y - 2|y|)] = 0 \quad (\text{I.14})$$

となる。式 (I.11)、(I.13) および (I.14) を式 (I.10) に代入すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk_y k_y f_y^n(y, k_y) = \frac{1}{L_y} (-\pi K_y^n + \pi K_y^n) = 0 \quad (\text{I.15})$$

が得られることが分かる。 z 方向についても同様な計算を行うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk_z k_z f_z^1(z, k_z) = 0 \quad (\text{I.16})$$

が証明できる。

Appendix J

イオン化不純物散乱による摂動ハミルトニアン のフーリエ変換形

点 $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ にあるイオン化不純物による摂動ハミルトニアンは、次式で与えられる。

$$H' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\lambda} \quad (\text{J.1})$$

上式をフーリエ変換すると

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} H' e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\lambda} e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon} e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{|\xi|} e^{-|\xi|/\lambda} e^{j\mathbf{q}\cdot\xi} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon} e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \int_0^{\infty} dr \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\xi} e^{-r/\lambda} e^{jq\xi \cos\theta} \xi^2 \sin\theta \\ &= \frac{e^2}{2\epsilon} e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \int_0^{2\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} d\xi \xi e^{-\xi/\lambda} e^{jq\xi \cos\theta} \end{aligned} \quad (\text{J.2})$$

となる。但し、 $\mathbf{r} - \mathbf{r}_0 = \xi$ と置いている。ここで、 $-\cos\theta = u$ と置くと、 $\sin\theta d\theta = du$ より

$$\begin{aligned} \text{式(J.2)} &= e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{e^2}{2\epsilon} \int_0^{\infty} d\xi \xi e^{-\xi/\lambda} \int_{-1}^1 du e^{-jq\xi u} = e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{e^2}{2\epsilon} \int_0^{\infty} d\xi \xi e^{-\xi/\lambda} \frac{1}{-jq\xi} \left[e^{-jq\xi u} \right]_{-1}^1 \\ &= e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{je^2}{2\epsilon q} \int_0^{\infty} d\xi e^{-\xi/\lambda} (e^{-jq\xi} - e^{jq\xi}) = e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{je^2}{2\epsilon q} \int_0^{\infty} d\xi \left[e^{(-jq-1/\lambda)\xi} - e^{(jq-1/\lambda)\xi} \right] \\ &= e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{je^2}{2\epsilon q} \left\{ \frac{1}{-jq-1/\lambda} \left[e^{(-jq-1/\lambda)\xi} \right]_0^{\infty} - \frac{1}{jq-1/\lambda} \left[e^{(jq-1/\lambda)\xi} \right]_0^{\infty} \right\} \\ &= e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{je^2}{2\epsilon q} \left(\frac{1}{jq+1/\lambda} + \frac{1}{jq-1/\lambda} \right) = e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{q^2 + 1/\lambda^2} \end{aligned} \quad (\text{J.3})$$

と変形できる。従って、式(J.2)と(J.3)より、次の関係が得られることが分かる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} e^{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\lambda} e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_0}}{q^2 + 1/\lambda^2} \quad (\text{J.4})$$