



Title	半導体ナノシートにおける電子輸送理論に関する研究
Author(s)	岡田, 丈
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/101667">https://doi.org/10.18910/101667</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

博士学位論文

半導体ナノシートにおける  
電子輸送理論に関する研究

岡田 丈

2025年1月

大阪大学大学院工学研究科



# 目次

第 1 章	序論	1
1.1	研究背景	1
1.2	ナノシートの電子輸送解析	3
1.3	研究目的および論文構成	6
参考文献		7
第 2 章	電子状態と輸送理論	13
2.1	はじめに	13
2.2	結晶	13
2.2.1	格子および逆格子	14
2.2.2	プロッホ関数	16
2.2.3	状態密度	17
2.2.4	熱平衡状態	18
2.3	強結合近似モデル	19
2.3.1	ハミルトニアン	20
2.3.2	強結合パラメータ	23
2.3.3	水素終端モデル	24
2.3.4	バンド構造	25
2.4	包絡関数近似モデル	25
2.4.1	行列要素 $\langle n'k' U nk \rangle$	26
2.4.2	包絡関数	27
2.4.3	有効質量方程式	29
2.5	電子の動力学	31
2.5.1	加速定理	31
2.5.2	Krieger-Iafrate 方程式	33
2.5.3	群速度	34
2.5.4	波束および運動方程式	34
2.6	散乱	35
2.6.1	フェルミの黄金則	36

2.6.2	半古典電子輸送	37
2.6.3	散乱確率	38
2.7	電子輸送モデル	39
2.7.1	ボルツマン輸送方程式	40
2.7.2	モンテカルロシミュレーション	41
2.7.3	量子輸送シミュレーション	42
2.8	まとめ	44
	参考文献	44
	第3章 半導体1次元構造の1次元等価モデル	49
3.1	はじめに	49
3.2	バンド内輸送	50
3.2.1	1次元等価モデルの表現行列	50
3.2.2	モデルパラメータの決定方法	52
3.2.3	バンド交差・反交差	53
3.3	バンド間輸送	55
3.3.1	複素バンド構造に対するフィッティング	56
3.3.2	空間反転対称性の導入	57
3.3.3	拡張された単位胞による位置情報の追加	59
3.4	1次元等価モデルに基づく非平衡グリーン関数法	60
3.4.1	開いた系の取り扱い	60
3.4.2	電極の自己エネルギー	62
3.4.3	プロッホ波の進行方向の判定方法	65
3.4.4	透過関数	66
3.5	シミュレーション結果	66
3.5.1	バンド構造	67
3.5.2	バンド内輸送シミュレーション	69
3.5.3	直接遷移型半導体におけるバンド間輸送シミュレーション	71
3.5.4	間接遷移型半導体におけるバンド間輸送シミュレーション	75
3.6	まとめ	78
	参考文献	79
	第4章 半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱	83
4.1	はじめに	83
4.2	無秩序な1次元系の散乱理論	84
4.2.1	メゾスコピック領域	84
4.2.2	アンダーソン局在	84
4.2.3	無次元抵抗 $\rho$ の分布関数	86

---

4.2.4	量子輸送計算の結果から平均自由行程を抽出する方法	87
4.3	シミュレーション結果	88
4.3.1	ラフネスパターンの生成	88
4.3.2	計算モデル	89
4.3.3	量子輸送計算から得た $\log \rho$ の分布と理論分布との比較	91
4.3.4	$\hat{s}$ のチャネル長依存性	91
4.3.5	平均自由行程の膜厚依存性	94
4.4	まとめ	95
	参考文献	96
第 5 章	半導体ナノシートにおける電子移動度の結晶方位依存性	101
5.1	はじめに	101
5.2	任意結晶方位を考慮した有効質量方程式	102
5.2.1	逆有効質量テンソル	102
5.2.2	基底の変換行列	103
5.2.3	1 次元電子ガスの有効質量方程式	106
5.2.4	具体例	108
5.3	逆有効質量テンソルに非対角成分がある場合の電子加速	109
5.3.1	1 次元電子ガスにおける Krieger-Iafrate 方程式	109
5.3.2	平均的な分散関係	111
5.3.3	$ a_n(t) ^2$ 時間発展のシミュレーション結果	112
5.4	自由走行時サブバンド間遷移を考慮したモンテカルロシミュレーション	118
5.4.1	フォノン散乱	118
5.4.2	自由走行を修正したモンテカルロシミュレーションのアルゴリズム	121
5.4.3	輸送特性のシミュレーション結果	124
5.5	緩和時間近似に基づく電子移動度のシミュレーション	128
5.5.1	久保-Greenwood 公式	128
5.5.2	運動量緩和時間	130
5.5.3	ラフネス散乱	132
5.5.4	自己無撞着シュレディンガー・ポアソン法	134
5.5.5	シミュレーション結果	136
5.6	まとめ	144
	参考文献	145
第 6 章	結論	149
	参考文献	151
付録 A	バンド間トンネルシミュレーションの精度	153

---

A.1	等価モデルの構築方法	153
A.2	輸送エネルギー窓とバンド間トンネルシミュレーション精度の関係	154
参考文献		156
付録 B 後方散乱の平均自由行程		157
B.1	後方散乱の平均自由行程 $\lambda$ と輸送の平均自由行程 $\ell$	157
参考文献		159
付録 C 量子井戸におけるラフネス散乱		161
C.1	行列要素	161
C.2	運動量緩和時間	162
C.3	量子緩和時間	163
C.4	自己無撞着ボルン近似	163
C.5	状態密度の幅を考慮した運動量緩和時間	166
参考文献		168

# 第1章

## 序論

### 1.1 研究背景

現代社会を支える基盤技術の一つが、トランジスタである。通信機器、家電製品、自動車、医療機器など、身の回りのあらゆる分野にトランジスタ技術は応用されている。これまでの絶え間ないトランジスタ技術の発展は、エレクトロニクスの進化を牽引してきた。

1947年、W. Shockley, J. Bardeen, W.H. Brattainらが米国ベル研究所で発明したトランジスタは、真空管に代わる画期的な固体素子として誕生した。この発明は後に、1枚の基板上に多数のトランジスタを集積した大規模集積回路(VLSI: Very Large Scale Integration)の発明へとつながった[1]。VLSIは中央処理装置(CPU: Central Processing Unit)などに不可欠な技術として、現代の情報社会を強力に支えている。

VLSIはトランジスタの中でもMOSFET(Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor)によって主に構成されている。最新のVLSIでは、一つのチップあたり数百億個ものMOSFETが集積されており、各トランジスタの寸法はナノメートルスケールにまで微細化されている。これほどまでにMOSFETが微細化してきた理由は、単にVLSIの集積度を高めるためだけではない。MOSFETを微細化すると、高速化と低消費電力化が同時に達成されるからである[2]。この比例縮小則という考え方を旗印に、微細加工技術が進化するたびMOSFETはさらに微細化され、その性能は飛躍的に向上してきた。

しかし、MOSFETの寸法を縮小しても、熱エネルギー、バンドギャップなどの物理量は不变である。これらの要因などから、微細化にともないチャネル内部の電位分布がしだいに歪み、ゲート電極による電位制御性の低下やリーキ電流の増加などの問題が発生した[3]。このような短チャネル効果と呼ばれる問題を克服するために登場したのが、従来の平面型MOSFETに代わるFinFETである。2011年に実用化されたFinFETは、トライゲート構造と呼ばれるチャネルを三方向から囲む立体的なゲート構造を採用している。この構造を用いることで、チャネル内電位の制御性が向上し、短チャネル効果を効果的に抑制できる[4]。

しかし、スケーリングがさらに進み、5nm世代のチップが量産されるようになった2020年代に入ると、FinFETでもチャネル内電位を正常に制御し切れなくなってきた。さらなる微細化を進めるためには新たな構造が求められるようになり、こうして開発が進められているのが、

GAAFET (Gate-All-Around FET) の一つであるナノシートトランジスタである [5]。ナノシートトランジスタは、半導体材料からなる極めて微細なシート状のチャネルに対して、その周囲をゲート電極で取り囲んだ構造をもつ。そのため、短いゲート長でも良好な電位制御性を維持できることから、次世代先端ロジック半導体デバイスへの応用が期待されている。

2020年代後半にかけて、ナノシートトランジスタの一種であるナノシートFETが実用化されると予想されている [5]。一方、ナノシートFETが実用化された後も、次の世代ではフォーカシートFET [6] や CFET [7] (Complementary FET) などの新しいトランジスタ構造の導入がすでに検討されている。図1.1は、これらの次世代半導体デバイスの構造を模式的に表す。ナノシートFETでは、nFETとpFETを個別のデバイスとして作製した後、両者を配線で接続することによりCMOS回路を作製する [8]。それに対してフォーカシートFETは、nFETとpFETを絶縁体の壁を挟んで同一デバイス上に作製した構造をもつ。これは、MOSFETのさらなる微細化ではなく、CMOSという基本回路自体のさらなる小型化を目指した技術である。さらに、CFETは、nFETとpFETを立体的に積層し一体化させた構造をもつ。nFETとpFETを2次元的に配置するのではなく3次元的に積み重ねることで、接続に必要な配線などの付加的な構造を最小限に抑え、CMOS回路単位でさらなる高性能化を達成できると考えられている [9]。

以上のような次世代半導体デバイスの設計には、チャネル材料、デバイス幾何構造、デバイス結晶方位など多くの設計自由度がある。これらの要素を多角的に考慮し、3次元的に作り込まれた微細デバイスを作製することは容易ではない。そのため、実用化に向けた最適なデバイス設計指針を早期に確立するためには、デバイスシミュレーションによる性能解析と予測が不可欠である。これまで、トランジスタの設計や解析において、TCAD (Technology Computer-Aided Design) シミュレータが広く活用されてきた。しかし、トランジスタの微細化が進むにつれ、従来のドリフト拡散輸送モデルに基づくTCADシミュレータでは正確に取り扱えない課題が顕在化している。

極めて微細な次世代デバイスでは、量子力学的効果や原子論的効果がデバイス特性に影響を及ぼす。しかし、従来のドリフト拡散輸送モデルでは、これらの現象を十分にモデル化することが難しい [10]。例えば、数nm程度の厚さをもつ薄いナノシートでは、閉じ込め方向の運動が量子化され、サブバンド構造が形成される。それにともないバンド端のエネルギーが増加するため、ゲート電圧に対する反転キャリア密度が減少し、しきい値電圧が変化する [3]。また、サブバンド構造の形成

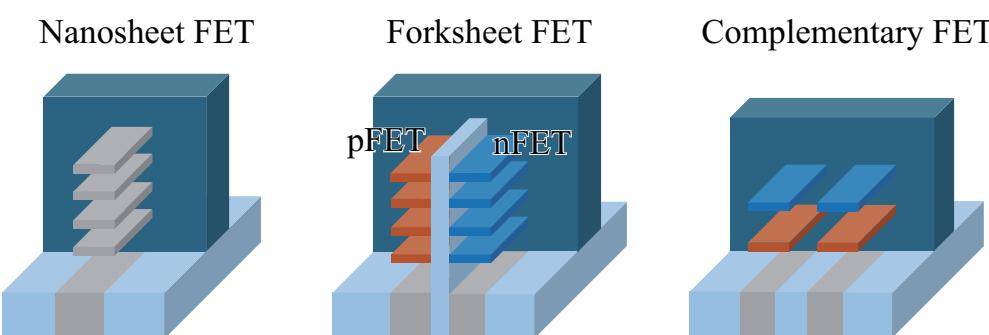


図1.1: ナノシートFET、フォーカシートFET、CFETの模式図。

は、エネルギー準位だけでなく波動関数をも変調し、キャリアの散乱過程に影響を与え、低電界および高電界輸送特性の両方に顕著な影響を及ぼす [11]。さらに、極めて微細な構造では、バルクのバンド端付近の状態に加え、高エネルギーの状態もサブバンド形成に影響を及ぼす [12]。これらのナノスケールで発現する物理現象を、従来の古典的なドリフト拡散輸送モデルの枠組みで十分にモデル化することは困難である。したがって、ナノシートトランジスタの性能解析と設計を行うには、量子論・原子論に基づく電子輸送理論および計算技術の開発が重要な課題である。

## 1.2 ナノシートの電子輸送解析

ナノシート内の電子は、幅方向と厚さ方向の2つの空間方向において量子閉じ込め効果を受け、電子の運動方向は1次元に制限される。ナノシートの電子輸送解析では、この次元性低下を考慮する必要がある。すなわち、電子状態を1次元電子ガス (1DEG: One-Dimensional Electron Gas) として適切に扱う必要がある。なぜなら、電子状態の1次元への量子化は、バンド構造および波動関数の両方をバルクの場合から変調し、輸送特性を左右する散乱過程や遮蔽効果などの様相を変化させるためである。例えば、2次元から1次元への次元性低下により、長距離相互作用に起因する散乱過程の散乱確率が低下し、移動度が向上することが量子極限下で理論的に示唆されている [13, 14]。また、2次元から1次元への次元性低下は、分極関数の解析的性質を変化させる [15]。これらの現象は、3次元あるいは2次元の電子状態には表れない、本質的に1次元の電子状態特有の物理現象である。したがって、ナノシートの理論的な電子輸送解析では、電子状態を1次元電子ガスとして適切に扱う必要がある。

ナノシートの理論的な電子輸送解析の実現には様々な課題があるが、本研究では主に、以下で述べる3つの課題に関する研究を行った。

### ナノシートの量子輸送シミュレーションにおける計算量に関する課題

近年、1次元電子ガスの電子状態を第一原理・原子論的に記述した非平衡グリーン関数 (NEGF: Non-Equilibrium Green Function) 法に基づく量子輸送デバイスシミュレーションの報告が増えている [16–19]。しかし、これらのデバイスシミュレータを次世代デバイスの開発に利用するためには、いまだ多くの課題が残されている。とくに、多くの計算資源と計算時間を必要とする点が課題として挙げられる。NEGF デバイスシミュレーションでは、次の式で与えられる遅延グリーン関数  $G(E)$  が中心的な役割を果たす。

$$G(E) = [E - H - \Sigma(E)]^{-1} \quad (1.1)$$

ここで、 $E$  は電子のエネルギー、 $H$  はチャネル領域のハミルトニアン、 $\Sigma(E)$  は遅延自己エネルギーを表す。NEGF デバイスシミュレーションでは、適当な電子状態モデルを導入し、ハミルトニアン  $H$  を行列表示することで、逆行列演算から  $G(E)$  を計算する [20]。用いる電子状態モデルおよびデバイス幾何構造に応じて、ハミルトニアン行列  $H$  のサイズは異なる。一般には、行列  $H$  のサイズが大きくなるため逆行列演算の計算負荷が増大し、これが NEGF デバイスシミュレーション全体のボトルネックとなる。そのため、高効率な NEGF デバイスシミュレーションを実現する

には、高速計算手法の導入が必須である。

逆行列演算を高速に実行する再帰的アルゴリズムとして、再帰グリーン関数法 [21, 22] や  $R$  行列法 [23, 24] などが提案されている。一方、ハミルトニアン行列  $H$  のサイズそのものを物理的・数学的な考察に基づいて削減し、逆行列演算を高速化する方法もある。このような行列次元削減法に基づく高速計算手法には、モード空間展開法 [25, 26]、モデル低次元化法 [27, 28]、接触ブロック還元法 [29, 30]、等価モデル [31, 32] などがある。近年では、機械学習を利用した高速計算手法も開発されている [33–35]。

多数ある高速計算手法の中でも、行列次元削減法を用いてハミルトニアン行列サイズを削減できた場合には、大幅にシミュレーションを高速化できる。逆行列演算の計算量は行列サイズの3乗によよそ比例するためである。

従来の行列次元削減法では、サイズの大きなハミルトニアン行列から、サイズの小さなハミルトニアン行列を構築する。すなわち、削減する元のハミルトニアン行列を最初に用意する必要がある。しかし、輸送特性をシミュレーションしたいデバイスのハミルトニアン行列が必ずしも明らかであるとは限らない。例えば、デバイスのバンド構造を実験<sup>\*1</sup>などにより決定できたとしても、ハミルトニアン行列を決定することは困難である。したがって、より柔軟に等価モデルを構築し、高効率な量子輸送シミュレーションを実現するには、元のハミルトニアン行列を用いることなく、バンド構造から等価モデルを構築する手法の開発が望まれる。

#### ナノシートにおけるラフネス散乱の特性抽出に関する課題

ナノシートの定量的なデバイスシミュレーションを実現するには、量子論・原子論に基づく散乱過程のモデル化も重要な課題である。とくに、半導体/酸化膜界面位置の乱れに起因する界面ラフネス散乱が電子輸送へ与える影響を定量的に理解することが重要である。なぜなら、ラフネス散乱はナノシートの厚みが薄くなるにつれて散乱強度が急激に増加し、デバイス特性に支配的な影響を与えるためである [36]。ナノシートの厚みを薄くするほど、反転電子が分布する体積に対してゲート電極の面積が増加するため、電位制御性は向上する。このことから、電位制御性の向上には薄膜化が有力な方針となるが、それにともない移動度などの輸送特性が劣化するため、どこまで薄膜化すべきかを定量的に明らかにすることが重要である。

これまで、有効質量近似のもとでラフネス散乱を摂動として扱い、摂動行列要素を計算する手法が多数検討してきた [14, 37–44]。摂動行列要素を界面位置の変動に対して線形化して扱う Prange-Nee モデル [45] や一般化 Prange-Nee モデル [42] は、計算の簡便さからモンテカルロデバイスシミュレーションなどと組み合わせて広く用いられている [10, 46]。しかし、ラフネス散乱は界面位置変動に関して非線形な現象であるため、線形化したモデルではその効果を正しく考慮できないと指摘されている [43, 44]。この課題を解決するため、従来の線形モデルを改良した非線形モデルが提案されている [43, 44]。

これらのモデルは半古典論・摂動論に基づくものであり、量子論に基づき摂動論によらない手法による計算結果との比較が望まれる。しかし、従来の量子論に基づくラフネス散乱の数値解析手法

<sup>\*1</sup> 例えば、角度分解光電子分光 (ARPES: Angle-resolved Photoemission Spectroscopy)。

には課題がある。従来法では、適当なバンド構造と散乱過程を仮定した量子輸送シミュレーションから抵抗  $R$  のチャネル長  $L$  依存性を求める。 $R-L$  グラフが線形に増加する場合、その傾きから移動度などの輸送特性を抽出できる。しかし、ラフネス散乱のみを選択的に考慮した場合、チャネル長  $L$  が局在長  $\xi$  を超えると抵抗  $R$  は指数関数的に増加する。そのため、 $L < \xi$  の範囲で  $R-L$  グラフの傾きを求める必要がある。しかし、微細なナノシートでは  $\xi$  が極めて短くなるため、従来法でラフネス散乱に起因する輸送特性を精度良く抽出することは難しい。したがって、チャネル長  $L$  の長短によらず、ナノシートにおけるラフネス散乱に起因する輸送特性を抽出する手法の開発が必要である。

### ナノシート内の電子の自由走行に関する課題

前述したように、極微細なナノシート構造の電子輸送解析に向けて、量子論・原子論に基づく量子輸送シミュレーション環境の構築が重要である。一方、量子輸送シミュレーションの結果は、適切にデバイス寸法を大きくする極限のもとで、半古典的な輸送シミュレーションの結果に一致すると期待される。そのため、すべてのスケールのデバイスを量子輸送シミュレーションで解析することは非効率的であり、スケールに応じた輸送モデルを用いることが重要である。着目している系あるいは領域のサイズが、電子が可干渉性を維持しながら移動する距離よりも十分長ければ、量子論的な輸送モデルではなく半古典的な輸送モデルを適用できる [47, 48]。したがって、適切な条件のもとでは、輸送方向の量子力学的效果を無視できる。しかし、このような場合においても、ナノシートの断面方向の寸法が小さい場合、電子状態は1次元電子ガスとして適切に扱う必要がある [47, 48]。

ナノシート構造のような量子閉じ込め構造をもつ微細なデバイスでは、移動度はデバイスの結晶方位に依存して変化する [10, 49]。ナノシートの結晶方位を適切に選択することで、移動度を高め、デバイス性能を向上させることができると期待されている [50–53]。結晶方位に関する様々な選択肢を比較・検討するためには、任意の結晶方位のデバイスを扱えるモデルに基づくシミュレーションが必要である。しかし、従来の半古典的な電子輸送モデルには結晶方位の取り扱いに不十分な点があり、量子論に基づく修正が必要である。そこで、従来の半古典的な電子輸送シミュレーションの手順を概説し、その問題点を指摘する。

従来の手法では、輸送方向とそれに垂直なナノシート断面方向にシュレディンガー方程式を分離する。任意の結晶方位を考慮したシュレディンガー方程式の分離方法は、2次元電子ガスについて F. Stern と W.E. Howard によって提案され [54]、1次元電子ガスについては M. Bescond らによって示されている [55]。この分離により、各電子が加速定理に基づく自由走行とフェルミの黄金則に基づく散乱を繰り返し、電子系全体の振る舞いを決定するという半古典的な輸送シミュレーションが可能となる [47, 48]。そのさい、絶縁破壊が生じるような非常に高い電界が印加された場合 [56–58] などの例外的な状況をのぞき、自由走行時に電子のサブバンド指数は変化しないと仮定される。

しかし、2次元電子ガスにおいて逆有効質量テンソルに非対角成分がある場合、自由走行時にサブバンド指数が確率的に変化し、サブバンド間遷移が生じると指摘されている [59]。そのため、1

次元電子ガスの場合でも同様に，逆有効質量テンソルに非対角成分がある場合，自由走行時のサブバンド間遷移を考慮する必要があると考えられる。しかし，1次元電子ガスにおいて，自由走行時のサブバンド間遷移が移動度などの輸送特性に与える影響を定量的に解析した報告はこれまでない。したがって，結晶方位や断面形状などの設計自由度を最大限に活用し，最適なナノシート構造の設計指針を提案するためには，1次元電子ガスにおける自由走行時サブバンド間遷移の効果を定量的に明らかにする必要がある。

### 1.3 研究目的および論文構成

本研究の目的は，次世代半導体デバイスの早期開発に向けて，半導体ナノシートにおける電子輸送理論および計算技術を開発することである。前述した3つの課題と対応して，具体的には以下の(1)～(3)に関する研究を行う。

- (1) ナノシートの高効率な量子輸送デバイスシミュレーションを実現するため，ハミルトニアン行列サイズを削減する等価モデルの新規開発。
- (2) ナノシートにおいてラフネス散乱で決まる平均自由行程を，摂動論によらない量子輸送シミュレーション結果から抽出する数値計算手法の新規開発。
- (3) 自由走行時サブバンド間遷移確率の量子論に基づく計算と，これを反映したモンテカルロ法に基づく1次元電子ガスの輸送理論の新規開発。

本論文は本章を含め全6章から構成されている。第2章では，本研究の基礎である電子状態と輸送理論について概説する。まず，強結合近似モデルおよび有効質量近似モデルを用いて電子状態を記述する方法を述べる。つぎに，加速定理，群速度といった電子の動力学に関する概念を説明する。つづいて，フェルミの黄金則に基づく散乱過程の記述方法を概説する。さらに，本研究で用いた半古典的な輸送モデルおよび量子論的な輸送モデルについて説明する。

第3章では，(1)に関する研究について述べる。ここで提案する新規手法は，従来手法とは異なり，バンド構造のみからサイズの小さなハミルトニアン行列を構築できるという特徴をもつ。

第4章では，(2)に関する研究について述べる。本研究で開発した手法は，従来手法とは異なり，非弾性散乱を追加で考慮することなく，いかなるチャネル長の系に対する量子輸送シミュレーション結果からでも，ラフネス散乱で決まる平均自由行程を高速に抽出可能であるという特徴をもつ。

第5章では，(3)に関する研究について述べる。本研究で新規に開発した1次元電子ガスの輸送理論では，自由走行時サブバンド間遷移を考慮することで，従来法が抱える巨視的な系への漸近性に関する問題点を改善しているという特徴をもつ。

第6章では，本研究を通して得られた成果・知見を総括し，本論文の結論を述べる。

## 参考文献

- [1] C.T. Sah, "Evolution of the MOS transistor-from conception to VLSI," Proc. IEEE, **76**, 1280 (1988).
- [2] R.H. Dennard, F.H. Gaenslen, H.-N. Yu, V.L. Rideout, E. Bassous, and A.R. LeBlanc, "Design of ion-implanted MOSFET's with very small physical dimensions," IEEE J. Solid-State Circuits, **9**, 256 (1974).
- [3] Y. Taur and T.H. Ning, Fundamentals of Modern VLSI Devices, Cambridge University Press (2021).
- [4] M. Reddy and D. Panda, "A Comprehensive Review on FinFET in Terms of its Device Structure and Performance Matrices," Silicon, **14**, 1 (2022).
- [5] <https://www.imec-int.com/en/articles/smaller-better-faster-imec-presents-chip-scaling-roadmap> (2024).
- [6] P. Weckx, J. Ryckaert, E.D. Litta, D. Yakimets, P. Matagne, P. Schuddinck, D. Jang, B. Chehab, R. Baert, M. Gupta, Y. Oniki, L.-A. Ragnarsson, N. Horiguchi, A. Spessot, and D. Verkest, "Novel forksheet device architecture as ultimate logic scaling device towards 2nm," 2019 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 36.5.1 (2019).
- [7] S. Subramanian, M. Hosseini, T. Chiarella, S. Sarkar, P. Schuddinck, B.T. Chan, D. Radisic, G. Mannaert, A. Hikavyy, E. Rosseel, F. Sebaai, A. Peter, T. Hopf, P. Morin, S. Wang, K. Devriendt, D. Batuk, G.T. Martinez, A. Veloso, E.D. Litta, S. Baudot, Y.K. Siew, X. Zhou, B. Briggs, E. Capogreco, J. Hung, R. Koret, A. Spessot, J. Ryckaert, S. Demuynck, N. Horiguchi, and J. Boemmel, "First Monolithic Integration of 3D Complementary FET (CFET) on 300mm Wafers," 2020 IEEE Symposium on VLSI Technology, 1 (2020).
- [8] S. Mukesh and J. Zhang, "A Review of the Gate-All-Around Nanosheet FET Process Opportunities," Electronics, **11**, 21 (2022).
- [9] S.-G. Jung, D. Jang, S.-J. Min, E. Park, and H.-Y. Yu, "Performance Analysis on Complementary FET (CFET) Relative to Standard CMOS With Nanosheet FET," IEEE J. Electron Devices Soc., **10**, 78 (2022).
- [10] D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, Nanoscale MOS Transistors: Semi-Classical Transport and Applications, Cambridge University Press (2011).
- [11] R. Kotlyar, B. Obradovic, P. Matagne, M. Stettler, and M.D. Giles, "Assessment of room-temperature phonon-limited mobility in gated silicon nanowires," Appl. Phys. Lett., **84**, 5270 (2004).
- [12] 森 誠語, 森岡 直也, 須田 淳, 木本 恒暢, "長方形断面 Si ナノワイヤの伝導帯構造の断面形状およびサイズ依存性," 電子情報通信学会技術研究報告 シリコン材料・デバイス, 77, (2011) .

- [13] H. Sakaki, "Scattering Suppression and High-Mobility Effect of Size-Quantized Electrons in Ultrafine Semiconductor Wire Structures," *Jpn. J. Appl. Phys.*, **19**, L735 (1980).
- [14] J. Motohisa and H. Sakaki, "Interface roughness scattering and electron mobility in quantum wires," *Appl. Phys. Lett.*, **60**, 1315 (1992).
- [15] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, and J. Bird, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press (2009).
- [16] M. Shin, W.J. Jeong, and J. Lee, "Density functional theory based simulations of silicon nanowire field effect transistors," *J. Appl. Phys.*, **119**, 154505 (2016).
- [17] F. Ducry, M.H. Bani-Hashemian, and M. Luisier, "Hybrid Mode-Space–Real-Space Approximation for First-Principles Quantum Transport Simulation of Inhomogeneous Devices," *Phys. Rev. Appl.*, **13**, 044067 (2020).
- [18] M.G. Pala, P. Giannozzi, and D. Esseni, "Unit cell restricted Bloch functions basis for first-principle transport models: Theory and application," *Phys. Rev. B*, **102**, 045410 (2020).
- [19] M. Ye, X. Jiang, S.-S. Li, and L.-W. Wang, "Large-scale first-principles quantum transport simulations using plane wave basis set on high performance computing platforms," *Comput. Phys. Commun.*, **260**, 107737 (2021).
- [20] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press (2005).
- [21] R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, and D. Jovanovic, "Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices," *J. Appl. Phys.*, **81**, 7845 (1997).
- [22] A. Svizhenko, M.P. Anantram, T.R. Govindan, B. Biegel, and R. Venugopal, "Two-dimensional quantum mechanical modeling of nanotransistors," *J. Appl. Phys.*, **91**, 2343 (2002).
- [23] G. Mil'nikov, N. Mori, Y. Kamakura, and T. Ezaki, "R-matrix theory of quantum transport and recursive propagation method for device simulations," *J. Appl. Phys.*, **104**, 044506 (2008).
- [24] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, "R-matrix method for quantum transport simulations in discrete systems," *Phys. Rev. B*, **79**, 235337 (2009).
- [25] R. Venugopal, Z. Ren, S. Datta, M. Lundstrom, and D. Jovanovic, "Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches," *J. Appl. Phys.*, **92**, 3730 (2002).
- [26] H. Takeda and N. Mori, "Mode-Coupling Effects in Non-Equilibrium Green's Function Device Simulation," *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44**, 2664 (2005).
- [27] J.Z. Huang, W.C. Chew, J. Peng, C.-Y. Yam, L.J. Jiang, and G.-H. Chen, "Model Order Reduction for Multiband Quantum Transport Simulations and its Application to p-Type Junctionless Transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, **60**, 2111 (2013).

[28] J.Z. Huang, L. Zhang, W.C. Chew, C.-Y. Yam, L.J. Jiang, G.-H. Chen, and M. Chan, “Model Order Reduction for Quantum Transport Simulation of Band-To-Band Tunneling Devices,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **61**, 561 (2014).

[29] D. Mamaluy, M. Sabathil, and P. Vogl, “Efficient method for the calculation of ballistic quantum transport,” *J. Appl. Phys.*, **93**, 4628 (2003).

[30] D. Mamaluy, D. Vasileska, M. Sabathil, T. Zibold, and P. Vogl, “Contact block reduction method for ballistic transport and carrier densities of open nanostructures,” *Phys. Rev. B*, **71**, 245321 (2005).

[31] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Equivalent transport models in atomistic quantum wires,” *Phys. Rev. B*, **85**, 035317 (2012).

[32] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Scattering basis representation in ballistic transport simulations of nanowire transistors,” *Math. Comput. Modell.*, **58**, 312 (2013).

[33] S. Souma and M. Ogawa, “Acceleration of nonequilibrium Green’s function simulation for nanoscale FETs by applying convolutional neural network model,” *IEICE Electron. Express*, **17**, 20190739 (2020).

[34] M. Bürkle, U. Perera, F. Gimbert, H. Nakamura, M. Kawata, and Y. Asai, “Deep-Learning Approach to First-Principles Transport Simulations,” *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 177701 (2021).

[35] Z. Wang, Y. Shizhuo, H. Wang, J. He, Q. Huang, and S. Chang, “Machine learning method for tight-binding Hamiltonian parameterization from ab-initio band structure,” *npj Comput. Mater.*, **7**, 11 (2021).

[36] K. Uchida, H. Watanabe, A. Kinoshita, J. Koga, T. Numata, and S. Takagi, “Experimental study on carrier transport mechanism in ultrathin-body SOI n- and p-MOSFETs with SOI thickness less than 5 nm,” *2002 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, **47** (2002).

[37] Y. Matsumoto and Y. Uemura, “Scattering Mechanism and Low Temperature Mobility of MOS Inversion Layers,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **13**, 367 (1974).

[38] T. Ando, “Screening effect and quantum transport in a silicon inversion layer in strong magnetic-fields,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **43**, 1616 (1977).

[39] S.M. Goodnick, D.K. Ferry, C.W. Wilmsen, Z. Liliental, D. Fathy, and O.L. Krivanek, “Surface roughness at the Si(100)-SiO<sub>2</sub> interface,” *Phys. Rev. B*, **32**, 8171 (1985).

[40] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue, “Interface roughness scattering in GaAs/AlAs quantum-wells,” *Appl. Phys. Lett.*, **51**, 1934 (1987).

[41] D. Esseni, “On the modeling of surface roughness limited mobility in SOI MOSFETs and its correlation to the transistor effective field,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **51**, 394 (2004).

[42] S. Jin, M.V. Fischetti, and T.-W. Tang, “Modeling of surface-roughness scattering in

ultrathin-body SOI MOSFETs,” IEEE Trans. Electron Devices, **54**, 2191 (2007).

[43] D. Lizzit, D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, “A new formulation for surface roughness limited mobility in bulk and ultra-thin-body metal-oxide-semiconductor transistors,” J. Appl. Phys., **116**, 223702 (2014).

[44] K. Sumita, K. Toprasertpong, M. Takenaka, and S. Takagi, “Interpretation of mobility universality against effective electric field of Si nMOSFETs based on nonlinear model of surface roughness scattering,” Appl. Phys. Express, **16**, 064001 (2023).

[45] R. Prange and T. Nee, “Quantum spectroscopy of low-field oscillations in surface impedance,” Phys. Rev., **168**, 779 (1968).

[46] H. Tsuchiya and Y. Kamakura, Carrier Transport in Nanoscale MOS Transistors, Wiley (2016).

[47] C. Jacoboni, Theory of Electron Transport in Semiconductors, Springer (2010).

[48] M.V. Fischetti and W.G. Vandenberghe, Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures, Springer (2016).

[49] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern, “Electronic properties of two-dimensional systems,” Rev. Mod. Phys., **54**, 437 (1982).

[50] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, and H. Tango, “On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET’s: Part II—effects of surface orientation,” IEEE Trans. Electron Devices, **41**, 2363 (1994).

[51] G. Tsutsui and T. Hiramoto, “Mobility and threshold-voltage comparison between (110)- and (100)-oriented ultrathin-body silicon MOSFETs,” IEEE Trans. Electron Devices, **53**, 2582 (2006).

[52] J. Chen, T. Saraya, K. Miyaji, K. Shimizu, and T. Hiramoto, “Electron Mobility in Silicon Gate-All-Around [100]- and [110]-Directed Nanowire Metal–Oxide–Semiconductor Field-Effect Transistor on (100)-Oriented Silicon-on-Insulator Substrate Extracted by Improved Split Capacitance–Voltage Method,” Jpn. J. Appl. Phys., **48**, 011205 (2009).

[53] S. Mochizuki, N. Loubet, P. Mirdha, C. Durfee, H. Zhou, G. Tsutsui, J. Frougier, R. Vega, L. Qin, N. Felix, D. Guo, and H. Bu, “Evaluation of (110) versus (001) Channel Orientation for Improved nFET/pFET Device Performance Trade-Off in Gate-All-Around Nanosheet Technology,” 2023 International Electron Devices Meeting (IEDM), 1 (2023).

[54] F. Stern and W.E. Howard, “Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit,” Phys. Rev., **163**, 816 (1967).

[55] M. Bescond, N. Cavassilas, and M. Lannoo, “Effective-mass approach for n-type semiconductor nanowire MOSFETs arbitrarily oriented,” Nanotechnology, **18**, 255201 (2007).

[56] C. Zener and R.H. Fowler, “A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics,” Proc. R. Soc. London, Ser. A, **145**, 523 (1934).

[57] L.V. Keldysh, “The effect of a strong electric field on the optical properties of insulating

crystals,” J. Exp. Theor. Phys., **7**, 788 (1958).

[58] E.O. Kane, “Theory of Tunneling,” J. Appl. Phys., **32**, 83 (1961).

[59] D. Esseni and P. Palestri, “Theory of the motion at the band crossing points in bulk semiconductor crystals and in inversion layers,” J. Appl. Phys., **105**, 053702 (2009).



## 第 2 章

# 電子状態と輸送理論

### 2.1 はじめに

ナノスケール MOSFET のチャネルは、薄膜状に形成された結晶材料から構成される。チャネル内の電子は、内蔵電位あるいは外場により、少なくとも 1 つの空間方向に量子閉じ込め効果を受ける。これにより、電子状態はバルク結晶の場合から変調され、散乱確率や遮蔽効果、電子の動力学が変化する。閉じ込められた電子状態を議論するには、まずバルク結晶における電子の基本的な性質を確認する必要がある。その自然な拡張として、量子閉じ込め効果をともなう低次元系における電子状態および輸送理論が展開される。したがって、本章では主にバルク結晶内の電子状態を記述する方法および輸送理論について概説する。低次元系への拡張については、該当する章で詳述する。

### 2.2 結晶

結晶とは、規則的に配置された多数の原子からなる固体である。結晶を結晶たらしめる重要な規則性として、並進対称性が挙げられる。これは、結晶のある方向に並進させたとき、結晶は並進前と同一のままであり並進の前後を区別できないという性質である。そのため、理想的には結晶は全方向へ無限に広がっているべきである。実際には、巨視的な大きさをもつ結晶は非常に多くの原子から構成され、その内部の性質は理想的な結晶で期待されるものに等しい。一方、表面付近では、理想的な結晶から性質が変化する。結晶には、並進以外の対称操作として、回転、鏡映、反転、回反、らせん操作、映進操作がある。これらの対称操作は群論によって数学的に整理されている。群論に基づき、固有状態の分類、縮退度の評価、状態遷移の選択則の決定が可能である [1]。本章では結晶について、固体物理学において基礎的かつ重要な内容を概説する。

2.2.1 節では、格子および逆格子を中心に、結晶構造を記述する方法について記す。2.2.2 節では、理想的な結晶における一電子ハミルトニアンの固有関数がブロッホ関数となることとその性質について概説する。2.2.3 節では、周期境界条件に起因して固体物理学でよく用いられる計算技法を説明する。最後に、2.2.4 節では、一粒子状態から多粒子状態を簡単に構成し、熱平衡状態を記述する方法について概説する。

### 2.2.1 格子および逆格子

結晶内から任意の空間点を1つ選び、これを $\mathbf{R}^*$ とする。結晶内には、 $\mathbf{R}^*$ と周辺の原子配置が全く同一の空間点 $\mathbf{R}_n$ が無数に存在する。 $\mathbf{R}_n$ と $\mathbf{R}^*$ とは、 $\mathbf{R}_n = \mathbf{R}^* + \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{a}_i$ なる関係で結ばれている。ここで、 $d (= 1, 2, 3)$ は格子の次元を表す。本節では $d = 3$ とする。 $d \neq 3$ の場合は2.3.3節に記す。 $\mathbf{a}_i$ は基本並進ベクトルと呼ばれ、 $n_i$ は整数である。一般性を失うことなく $\mathbf{R}^*$ を原点にとることができるので、以後 $\mathbf{R}^* = \mathbf{0}$ とする。すなわち、

$$\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{a}_i \quad (2.1)$$

とする。 $\mathbf{R}_n$ は格子ベクトルと呼ばれ、格子ベクトル $\mathbf{R}_n$ が指す実空間上の点は格子点と呼ばれる。 $\mathbf{R}^* = \mathbf{0}$ としたので原点は格子点である。一般に、基本並進ベクトルの組は一意に決まらない。

単位胞とは、 $\mathbf{R}_n$ による並進により、隙間や重なりなしに全空間を埋める空間として定義される。そのため、単位胞の体積 $\Omega_{\text{cell}}$ は基本並進ベクトルが作る平行六面体の体積と等しい。

$$\Omega_{\text{cell}} = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad (2.2)$$

基本並進ベクトルの組を1つ決めたとしても、単位胞は一意に決まらない点に注意が必要である。定義より、単位胞には格子点が1つだけ含まれる。

1つの格子点には、1つの原子あるいは複数の原子からなる原子団が付随する。この1つの格子点に付随する構造を基本構造と呼ぶ<sup>\*1</sup>。結晶の全体構造は、基本構造を格子ベクトルによって繰り返すことで得られる。基本構造をなす各原子への位置ベクトル全体からなる集合を $\mathcal{B}$ と表す。

$$\mathcal{B} = \{\boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2, \dots, \boldsymbol{\tau}_{N_a}\} \quad (2.3)$$

ここで、 $N_a$ は基本構造をなす原子の数を表し、 $\boldsymbol{\tau}_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, N_a$ ) は各原子の位置ベクトルを表す。

本研究では主に、SiおよびIII-V族化合物半導体を扱った。これらの半導体のバルク結晶は、面心立方(fcc: Face-centered Cubic)格子から構成される。具体的に fcc 格子について考察する。デカルト座標に沿ってそれぞれの辺が $a_0 \hat{x}$ ,  $a_0 \hat{y}$ , および $a_0 \hat{z}$ から作られる立方体を考える。 $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{z}$ はデカルト座標の単位ベクトルであり、 $a_0$ は格子定数である。この立方体の角と面の中央とに格子点がある場合、これを fcc 格子と呼ぶ。fcc 格子の基本並進ベクトルは、例えば、

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a_0}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a_0}{2}(\hat{z} + \hat{x}), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a_0}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \quad (2.4)$$

と表せる。式(2.2)より、fcc 格子の単位胞の体積は $\Omega_{\text{cell}} = a_0^3/4$ である。Siでは、基本構造 $\mathcal{B}$ の位数は $N_a = 2$ である。具体的には、例えば、 $\mathcal{B} = \{\mathbf{0}, a_0(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})/4\}$ である。また、格子定数は $a_0 = 0.54309$  nm, 原子間距離は $a_0\sqrt{3}/4 = 0.2352$  nm, 数密度は $N_a/\Omega_{\text{cell}} = 4.994 \times 10^{22}$  cm<sup>-3</sup>である。

<sup>\*1</sup> 基本構造は基底(basis)とも呼ばれる。

格子には必ず対応する逆格子が存在する。すなわち、集合  $\{R_n\}$  には対応する集合  $\{G_m\}$  が存在していて、 $G_m$  は、

$$G_m = \sum_{i=1}^3 m_i \mathbf{b}_i \quad (2.5)$$

である。ここで、 $m_i$  は整数であり、

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega_{\text{cell}}} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega_{\text{cell}}} (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega_{\text{cell}}} (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \quad (2.6)$$

である。 $G_m$  は逆格子ベクトルと呼ばれ、逆格子ベクトル  $G_m$  が指す波数空間上の点は逆格子点と呼ばれる。 $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$  であることに注意すると、 $R_n$  および  $G_m$  に対して、

$$\exp(iG_m \cdot R_n) = 1 \quad (2.7)$$

が成り立つ。基本並進ベクトルが式 (2.4) で与えられている場合、

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0} (\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}} - \hat{\mathbf{x}}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0} (\hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}}), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a_0} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}}) \quad (2.8)$$

となる。

逆格子における単位胞を、格子の場合と同様に定義する。すなわち、 $G_m$  による並進によって、隙間や重なりなしに全波数空間を埋める空間を逆格子の単位胞とする。その体積  $\Omega_{\text{BZ}}$  は、

$$\Omega_{\text{BZ}} = \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_{\text{cell}}} \quad (2.9)$$

となる。格子の場合と同様、逆格子における単位胞は一意に決まらない点に注意が必要である。一般的には、逆格子における単位胞としてウィグナー・ザイツセルがよく採用される。これは、原点と逆格子点を直線で結び、その線を垂直に二等分する平面によって囲まれた空間である。とくに、逆格子におけるウィグナー・ザイツセルは第一ブリルアンゾーンと呼ばれる。定義より、逆格子における単位胞には逆格子点が 1 つだけ含まれる。

逆格子の有用性は、 $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  なる平面波が  $\mathbf{k}$  が逆格子ベクトルである場合にのみ、実空間上で格子ベクトル  $R_n$  の周期性をもつことにある。すなわち、

$$\exp(iG_m \cdot (\mathbf{r} + R_n)) = \exp(iG_m \cdot \mathbf{r}) \quad (2.10)$$

が、すべての  $G_m$  および  $R_n$  に対して成り立つ。したがって、実空間上で格子ベクトル  $R_n$  の周期性をもつ関数  $f(\mathbf{r})$ 、すなわち、任意の  $R_n$  に対して  $f(\mathbf{r} + R_n) = f(\mathbf{r})$  となる関数は、つぎのようにフーリエ級数展開できる。

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad f_{\mathbf{G}} = \frac{1}{\Omega_{\text{cell}}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (2.11)$$

つまり、逆格子ベクトル  $G$  は、実空間上で格子の周期性をもつ関数をフーリエ級数展開するさいに必要なすべての平面波の波数ベクトルである。

### 2.2.2 プロッホ関数

結晶のような複雑な系の場合、ハミルトニアン演算子には、個々の粒子（原子核および電子）の運動エネルギーに加えて、原子核間、電子間、さらに原子核と電子間の相互作用による相互作用項が含まれる。原子の数密度は1立方センチメートルあたり約 $10^{23}$ 個程度であり、すべての相互作用項を直接的に取り入れて扱うことは困難である。そのため、電子が原子核および他の電子から受けける相互作用を、実効的な一粒子ポテンシャルを用いて近似的に記述する。この手法は、一粒子近似あるいは独立粒子近似と呼ばれる。幸いなことに、関心のある多くの状況ではこの近似を採用できると考えられている[2]。

実効的な一粒子ポテンシャル $U(\mathbf{r}, t)$ は、原子核が作るポテンシャル $U^{(\text{lat})}(\mathbf{r})$ とそれ以外のポテンシャル $U^{(\text{ext})}(\mathbf{r}, t)$ との和で与えられる。本節では、 $U^{(\text{ext})}(\mathbf{r}, t) = 0$ として、

$$U(\mathbf{r}, t) = U^{(\text{lat})}(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

と表せる場合を考える。 $U^{(\text{lat})}(\mathbf{r})$ は格子と同じ周期性をもつ（すなわち、 $U^{(\text{lat})}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U^{(\text{lat})}(\mathbf{r})$ ）ため、格子ポテンシャルと呼ばれる。一般に、 $U^{(\text{lat})}(\mathbf{r})$ の具体的な形を決定することは難しい。しかし、以下で示すように、結晶内の電子の基本的な性質を調べるために $U^{(\text{lat})}(\mathbf{r})$ の具体的な表現をつねに知る必要はない。

一粒子近似に従うと、一粒子波動関数の時間に依存しないシュレーディンガー方程式は、

$$\hat{H}_0 \psi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U^{(\text{lat})}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

となる。ここで、 $E$ と $\psi(\mathbf{r})$ はそれぞれハミルトニアン演算子 $\hat{H}_0$ の固有値および固有関数を表す。いま、表面によらない、十分に大きな結晶のバルク的な性質を考えたい。このような場合、式(2.13)の境界条件として、周期境界条件を課すことが有効である<sup>\*2</sup>。具体的には、単位胞を $\mathbf{a}_1$ 方向、 $\mathbf{a}_2$ 方向、 $\mathbf{a}_3$ 方向にそれぞれ $N_1$ 個、 $N_2$ 個、 $N_3$ 個組み合わせた領域で、 $\psi(\mathbf{r})$ は周期的であるとする。すなわち、

$$\psi(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1) = \psi(\mathbf{r} + N_2 \mathbf{a}_2) = \psi(\mathbf{r} + N_3 \mathbf{a}_3) = \psi(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

とする。このとき、系の体積は $\Omega = N_1 N_2 N_3 \Omega_{\text{cell}} = N_{\text{cell}} \Omega_{\text{cell}}$ となる。単位胞には格子点が1つ含まれるため、 $N_{\text{cell}}$ は系に含まれる格子点の数と等しい。

プロッホの定理によると、ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有関数はバンド指数 $n (= 1, 2, \dots)$ と波数ベクトル $\mathbf{k}$ によってラベルされ、格子の周期性をもつ関数 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ （すなわち、 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ）を用いてつきの形に書ける。

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

<sup>\*2</sup> 周期境界条件は、理想的な結晶が全方向へ無限に広がっていることを、数学的に扱いやすい形で表現したものであり、最終的な計算結果の表式からその影響は取り除かれる。

ただし，式 (2.14) の周期境界条件より， $k$  は，

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 m_i \frac{\mathbf{b}_i}{N_i}, \quad m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.16)$$

なる離散的な値をとる．また， $k$  と  $k + \mathbf{G}$  の状態は物理的に等価であるため，第一ブリルアンゾーン内の  $k$  を考えればよい．これらの性質より，物理的に独立な  $k$  点の数は有限個となるが，その個数などの詳細は 2.2.3 節に記す．

$\psi_{nk}(\mathbf{r})$  はプロッホ関数と呼ばれる．プロッホ関数は系の体積  $\Omega$  で規格化されているとする．

$$\int_{\Omega} |\psi_{nk}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int_{\Omega} |u_{nk}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (2.17)$$

すなわち， $u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r})$  であることから  $\int_{\Omega_{\text{cell}}} |u_{nk}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1/N_{\text{cell}}$  となり，プロッホ関数の周期関数部分は，単位胞内で積分すると  $1/N_{\text{cell}}$  となるように規格化されている．プロッホ関数は完全系であり，直交性，

$$\int_{\Omega} \psi_{n'k'}^*(\mathbf{r}) \psi_{nk}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{n',n} \delta_{k',k} \quad (2.18)$$

を満たす．直交性は，式 (2.18) の左辺に式 (2.15) を代入して計算することで直接示せる．

プロッホの定理によると，各  $k$  に対して固有値問題が定まり，その固有関数  $\psi_{nk}$  には固有値  $E_{nk}$  が対応する．この波数と固有エネルギーの関係  $E_{nk}$  は，分散関係あるいはバンド構造と呼ばれる．バンド構造の具体的な計算方法として，強結合近似モデルを用いた方法を 2.3 節に記す．

式 (2.13) の固有状態は，結晶のすべての対称性を反映している．そのため，第一ブリルアンゾーン内のすべての  $k$  点について固有状態を計算する必要はない．つまり，結晶のすべての対称操作に関して等価ではない限られた  $k$  点でのみ固有状態を計算すればよい．具体的には fcc 格子には 48 の対称操作があり，図 2.1(b) に示す既約ブリルアンゾーン内の  $k$  点で固有状態を計算すれば十分である [1]．

### 2.2.3 状態密度

式 (2.16) は， $k$  点が  $\mathbf{b}_i$  方向に沿って， $b_i/N_i$  間隔で均等に配列していることを表している．そのため，1 つの  $k$  点が占める波数空間上での体積  $(\Delta k)^3$  は，

$$(\Delta k)^3 = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \cdot \left( \frac{\mathbf{b}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} \right) = \frac{\Omega_{\text{BZ}}}{N_{\text{cell}}} \quad (2.19)$$

となる．つまり，波数空間上である領域内部に含まれる  $k$  点の数は，その領域の体積を  $(\Delta k)^3$  で割ると求まる．そのため，第一ブリルアンゾーンに含まれる  $k$  点の数は，

$$\frac{\Omega_{\text{BZ}}}{(\Delta k)^3} = N_{\text{cell}} \quad (2.20)$$

となる．すなわち，第一ブリルアンゾーンに含まれる  $k$  点の数は，系の体積  $\Omega$  の中に含まれる単位胞  $\Omega_{\text{cell}}$  の数あるいは格子点の数と等しい．したがって，第一ブリルアンゾーン内に含まれる  $k$  点の数は，系の体積  $\Omega$  に比例して増加する．

あるエネルギー  $E$  よりも低いエネルギーをもつ固有状態の総数について考える。より正確には、 $E > E_{nk}$  を満たす  $(n, k)$  の組の総数を数える。上述したように状態数は体積  $\Omega$  に比例して増加するため、体積あたりの総数がわかれば十分である。これは、

$$N(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{nk} \Theta(E - E_{nk}) \quad (2.21)$$

と計算できる。ここで、 $\Theta(x)$  はヘヴィサイドの階段関数であり、 $x > 0$  のとき 1,  $x \leq 0$  のとき 0 を返す。そのため、 $N(E)$  は文字通り固有エネルギーが  $E$  よりも低い固有状態の体積あたりの数を表す。両辺を微分すると、

$$\frac{dN(E)}{dE} = \frac{1}{\Omega} \sum_{nk} \delta(E - E_{nk}) \quad (2.22)$$

となる。ここで、 $d\Theta(x)/dx = \delta(x)$  なる関係を用いた。言い換えれば、エネルギーが  $E$  と  $E + dE$  との間にある体積あたりの固有状態の数は、

$$D(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{nk} \delta(E - E_{nk}) \quad (2.23)$$

と定義すると、 $D(E)dE$  と表される。ここで、 $D(E)$  は状態密度と呼ばれる。

$k$  に関する総和について考える。すなわち、 $k$  を引数とする任意の関数  $f(k)$  について、

$$\sum_k f(k) \quad (2.24)$$

を計算する一般的な方法を考える。総和は物理的に独立な  $k$  点全体に関してとる。1つの  $k$  点が占める波数空間上の体積  $(\Delta k)^3$  は、系の体積  $\Omega$  の増加とともに小さくなっていく。したがって、体積  $\Omega$  が十分に大きい場合、式 (2.24) はつぎのように積分に書き換えられる。

$$\sum_k f(k) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \sum_k f(k) (\Delta k)^3 \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int f(k) dk \quad (2.25)$$

ここで、矢印の左側の変形では、式 (2.9), 式 (2.19),  $\Omega = N_{\text{cell}}\Omega_{\text{cell}}$  などを用いた。

## 2.2.4 熱平衡状態

式 (2.13) の固有状態として、バンド指数  $n$  と波数  $k$  で指定される状態をプロット状態あるいは電子状態という。異なるスピン状態を区別する場合には、スピン状態を指定するラベル  $\sigma$  を追加し、状態を  $(n, k, \sigma)$  と指定する。ここで、略記のため添字  $i \rightarrow (n_i, k_i, \sigma_i)$  を導入し、状態を  $i$  で指定する。 $i$  で指定される状態の状態ベクトルを  $|\psi_i\rangle$ 、エネルギーを  $\epsilon_i$  と表すことにする。この一粒子状態  $|\psi_i\rangle$  に基づいてつぎのように多粒子状態が構成される。

多粒子状態を記述するためのヒルベルト空間の基底ベクトルとして、一粒子状態  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$  がそれぞれ  $n_1, n_2, \dots$  個の粒子に占有されているという状態を採用する。この数  $n_i$  は、一粒子状態  $|\psi_i\rangle$  の占有数と呼ばれる。ただし、パウリのスピン統計定理より、フェルミ粒子である電子は占有数  $n_i = 0$  または 1 のみをとることができる。

占有数の組を  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots)$  と略記すると、多粒子状態を記述するためのヒルベルト空間の基底ベクトルは  $|\mathbf{n}\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle$  と表せる。多粒子状態  $|\mathbf{n}\rangle$  の粒子数は  $N_{\mathbf{n}} = \sum_i n_i$ 、エネルギーは  $E_{\mathbf{n}} = \sum_i \epsilon_i n_i$  となる。任意の多粒子状態の状態ベクトル  $|\Psi\rangle$  は、

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{n}} C_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \quad (2.26)$$

と展開できる。

電子系が温度  $T$ 、化学ポテンシャル  $\mu$  で指定される熱平衡状態であるとする。このとき、熱平衡状態に対応する様々なミクロ状態の一つとして、グランドカノニカル集団を考えることができ [3]。グランドカノニカル集団は、多粒子状態  $|\mathbf{n}\rangle$  を  $e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu N_{\mathbf{n}})}/\Xi$  の割合で古典的に混合した状態である。すなわち、密度演算子が、

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\Xi} \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu N_{\mathbf{n}})} |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}| \quad (2.27)$$

と与えられる状態である。ここで、 $\beta$  は逆温度を表す。 $\Xi$  は大分配関数であり、 $\Xi = \sum_{\mathbf{n}} e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu N_{\mathbf{n}})}$  と与えられる。このグランドカノニカル集団において、占有数  $n_i$  の期待値  $\langle n_i \rangle$  はつぎのように計算される。

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{\mathbf{n}} n_i e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu N_{\mathbf{n}})} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} = f_0(\epsilon_i) \quad (2.28)$$

この式の右辺の関数、

$$f_0(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} \quad (2.29)$$

はフェルミ分布関数と呼ばれる。これを用いると、電子密度  $N$  は、

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{\Omega} \sum_i \langle n_i \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_i f_0(\epsilon_i) = \frac{1}{\Omega} \sum_{n, \mathbf{k}, \sigma} f_0(E_{n\mathbf{k}}) = \frac{n_{\text{sp}}}{\Omega} \sum_{n\mathbf{k}} f_0(E_{n\mathbf{k}}) \\ &= \frac{n_{\text{sp}}}{\Omega} \sum_{n\mathbf{k}} \int dE \delta(E - E_{n\mathbf{k}}) f_0(E) = \int dE \frac{n_{\text{sp}}}{\Omega} \sum_{n\mathbf{k}} \delta(E - E_{n\mathbf{k}}) f_0(E) \\ &= \int n_{\text{sp}} D(E) f_0(E) dE \end{aligned} \quad (2.30)$$

と表せる。ここで、 $n_{\text{sp}} = 2$  はスピンの縮退度、 $D(E)$  は式 (2.23) の状態密度である。

最後に、1つのバンドに占有されうる最大電子数について考察する。プロッホ状態は  $(n, \mathbf{k})$  でラベルされる。 $n$  を固定したとき、2.2.3 節のとおり  $\mathbf{k}$  は  $N_{\text{cell}}$  個の異なる値をとることができる。これを体積あたりに換算すると、 $N_{\text{cell}}/\Omega = N_{\text{cell}}/\Omega_{\text{cell}} N_{\text{cell}} = 1/\Omega_{\text{cell}}$  となる。すなわち、スピンを合わせて考慮すると、1つのバンドが占有できる電子数は最大で、単位胞 1 つあたり 2 電子となる。

## 2.3 強結合近似モデル

前節では結晶内のハミルトニアンを一粒子問題として定式化し、ポテンシャルが格子の周期性をもつ場合に固有関数がプロッホ関数となること、さらにその一般的な性質について確認した。一粒

子問題に簡略化したとはいえるが、一般に固有状態を第一原理的に求めることは困難である。なぜなら、一粒子ポテンシャルには多数の電子や原子核のクーロン相互作用、あるいは交換相関相互作用などの多体効果を実効的に含める必要があるためである。これを実行する方法は固体物理学の初期から現在にわたって研究されており、とくに、W. Kohn と L.J. Sham の研究に端を発する密度汎関数法は、結晶の固有状態を第一原理的に決定する手法として有力視されている [4, 5]。しかし、完全な結果そのものではなく、物理的な直感を与える簡便な手法が、しばしば求められる。J.C. Slater と G.F. Koster によって定式化された強結合近似モデル [6] は、考察したい結晶やデバイスの原子的な表現が可能であり、さらに第一原理モデルよりも少ない基底で第一ブリルアンゾーン全域の現実的なバンド構造を扱えるため、デバイスシミュレーションの分野などでよく用いられている [7, 8]。

2.3.1 節では、強結合近似モデルに基づくハミルトニアン行列の構成方法を、とくに、位相因子の設定方法に関して、プロッホ関数およびその周期関数部分との関連がわかるように記述する。また、プロッホ和の表式をはじめに仮定することなく、第一ブリルアンゾーン内の波数  $k$  によって、固有値問題が分割されることを説明する。2.3.2 節では、強結合パラメータについて概説する。強結合パラメータに基づく行列要素の具体的なモデル式は、すでに包括的にまとめられた文献 [6, 9, 10] があるため省略する。2.3.3 節には、強結合近似モデルを量子井戸構造あるいは量子細線構造に応用する方法を簡単に記す。最後に、2.3.4 節では具体的な計算結果を示す。

### 2.3.1 ハミルトニアン

3 次元格子を考える。2.2.1 節に記したように、結晶は基本構造  $B$  を格子ベクトル  $R$  によって繰り返すことで得られる。いま、基本構造には  $N_a$  個の原子が含まれており、それぞれの原子位置を  $\tau_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, N_a$ ) と表す。強結合近似モデルでは、各原子位置に局在した原子軌道様の基底を考える。そのため、同じ原子位置に局在した基底を区別する添字  $\mu$  を導入する。

位置  $R + \tau_\alpha$  に局在する基底のうち  $\mu$  番目の基底を  $|R, \tau_\alpha, \mu\rangle$  と表す。結晶には 2.2.2 節と同様に周期境界条件を課す。

$|R, \tau_\alpha, \mu\rangle$  を、添字  $i \rightarrow \{\alpha_i, \mu_i\}$  を用いて、 $|R, i\rangle$  と略記する。また、基底に正規直交完全性を仮定する。すなわち、

$$\langle R', i | R, j \rangle = \delta_{R' R} \delta_{ij} \quad (2.31)$$

$$\hat{I} = \sum_{R, i} |R, i\rangle \langle R, i| \quad (2.32)$$

を仮定する [11]。ハミルトニアン行列要素  $\langle R', i | H | R, j \rangle$  は、 $i, j$  を固定したとき、並進対称性により、 $R'$  と  $R$  との差にのみ依存する。そのため、つぎのように、行列要素は  $R' = 0$  とした場合のみを考えておけば十分である。

$$H_{ij}(R) = \langle 0, i | H | R, j \rangle \quad (2.33)$$

$H_{ij}(R)$  は、位置  $R + \tau_{\alpha_j}$  にある軌道  $\mu_j$  から、位置  $\tau_{\alpha_i}$  にある軌道  $\mu_i$  へのホッピングエネルギーを表す。ただし、対角成分  $H_{ii}(0)$  は、位置  $\tau_{\alpha_i}$  にある軌道  $\mu_i$  のオンサイトエネルギーと解釈する。

つぎに、ハミルトニアン行列をブロック対角化する方法を説明する。それぞれのブロックは波数  $k$  でラベルされる。これには一見類似した 2 つの導入方法がある。しかし、すぐ後で説明するよう

に 2 つの方法には明確な違いがある .

### 方法 1

$|\mathbf{R}, i\rangle$  を離散フーリエ変換すると ,

$$|\mathbf{k}, i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, i\rangle \quad (2.34)$$

となる . ここで ,  $1/\sqrt{N_{\text{cell}}}$  の因子は ,  $\langle \mathbf{k}', j | \mathbf{k}, i \rangle = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta_{ij}$  となるように付した . 離散フーリエ変換の性質あるいは式 (2.7) より ,  $|\mathbf{k}, i\rangle = |\mathbf{k} + \mathbf{G}, i\rangle$  である . そのため , 独立な波数ベクトルとして , 第一ブリルアンゾーンに含まれる  $\mathbf{k}$  点を考えればよい . 2.2.3 節に記したように , この独立な波数ベクトル  $\mathbf{k}$  の数は , 格子ベクトル  $\mathbf{R}$  の数と等しい .

$|\mathbf{k}, i\rangle$  を基底とするハミルトニアン行列要素は ,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', i | H | \mathbf{k}, j \rangle &= \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}'+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \mathbf{R}', i | H | \mathbf{R}, j \rangle \\ &= \frac{1}{N_{\text{cell}}} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}'+i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}'+\mathbf{R})} \langle \mathbf{R}', i | H | \mathbf{R}' + \mathbf{R}, j \rangle \\ &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} H_{ij}(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

となる . ここで ,  $\sum_{\mathbf{R}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}'} = N_{\text{cell}} \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{G}}$  および  $\langle \mathbf{R}', i | H | \mathbf{R}' + \mathbf{R}, j \rangle = \langle \mathbf{0}, i | H | \mathbf{R}, j \rangle$  を用いた . 式 (2.35) より ,  $|\mathbf{k}, i\rangle$  を基底としてハミルトニアンを行列表示すると , 行列はブロック対角化されていることがわかる . また , それぞれのブロックは波数  $\mathbf{k}$  で指定される . したがって , 結晶内の電子の固有状態を求めるには , ハミルトニアン行列全体を対角化するかわりに ,  $\mathbf{k}$  ごとに定まるブロック行列を独立なすべての  $\mathbf{k}$  点にわたって対角化すれば十分である . 具体的には , 式 (2.35) の最後の表式から ,

$$H_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} H_{ij}(\mathbf{R}) \quad (2.36)$$

とおいて ,  $i$  行  $j$  列成分を  $H_{ij}(\mathbf{k})$  とする行列を  $H_{\mathbf{k}}$  とし , つぎの固有値問題を解けばよい .

$$H_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} \mathbf{C}_{n\mathbf{k}} \quad (2.37)$$

行列  $H_{\mathbf{k}}$  は , 大きさが  $(N_{\text{tbm}} \times N_{\text{tbm}})$  のエルミート行列 ,  $\mathbf{C}_{n\mathbf{k}}$  は大きさが  $N_{\text{tbm}}$  のベクトルである . ただし , 位置ベクトル  $\tau_{\alpha}$  で指定される原子に局在する軌道の総数を  $N_{\text{b}}(\tau_{\alpha})$  として ,  $N_{\text{tbm}} = \sum_{\alpha}^{N_{\text{a}}} N_{\text{b}}(\tau_{\alpha})$  である . 以上より , 固有値・固有ベクトルの組は  $N_{\text{tbm}}$  個存在するため , それを識別する添字  $n$  を導入した . また , 式 (2.36) および式 (2.7) より ,  $H_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = H_{\mathbf{k}}$  である .

### 方法 2

式 (2.34) で定義される  $|\mathbf{k}, i\rangle$  を , つぎのように変換する .

$$|\mathbf{k}, i\rangle' = e^{i\mathbf{k}\cdot\tau_{\alpha_i}} |\mathbf{k}, i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\tau_{\alpha_i})} |\mathbf{R}, i\rangle \quad (2.38)$$

この式はプロッホ和と呼ばれる。式(2.38)は、ユニタリ行列  $T$ 、

$$T = \begin{bmatrix} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\alpha_1}} & & & \\ & e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\alpha_2}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\alpha_{N_{\text{tbm}}}}} \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

を用いて、 $[(\mathbf{k}, 1)' \ (\mathbf{k}, 2)' \ \cdots (\mathbf{k}, N_{\text{tbm}})'] = [(\mathbf{k}, 1) \ (\mathbf{k}, 2) \ \cdots (\mathbf{k}, N_{\text{tbm}})] T$  と変換したことによって他ならない。したがって、この変換のもと行列  $H_{\mathbf{k}}$  は、

$$H'_{\mathbf{k}} = T^{\dagger} H_{\mathbf{k}} T \quad (2.40)$$

と変換され、行列  $H'_{\mathbf{k}}$  の  $i$  行  $j$  列成分は、

$$H'_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}_{\alpha_j} - \boldsymbol{\tau}_{\alpha_i})} H_{ij}(\mathbf{R}) \quad (2.41)$$

となる。また、固有値問題は、

$$H'_{\mathbf{k}} C'_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} C'_{n\mathbf{k}} \quad (2.42)$$

となる。ただし、 $C'_{n\mathbf{k}} = T^{\dagger} C_{n\mathbf{k}}$  である。方法1の場合とは異なり、一般には  $H'_{\mathbf{k}+G} \neq H'_{\mathbf{k}}$  である。

### 方法1と方法2の違い

まず、 $H_{\mathbf{k}}$  と  $H'_{\mathbf{k}}$  の固有値は等しい。一方で固有ベクトルは、行列  $T$  で互いに変換される。成分で書き表すと、 $C_{n\mathbf{k}}$  の  $i$  番目の成分を  $C_{n\mathbf{k}}(i)$ 、 $C'_{n\mathbf{k}}$  の  $i$  番目の成分を  $C'_{n\mathbf{k}}(i)$  として、 $C'_{n\mathbf{k}}(i) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\alpha_i}} C_{n\mathbf{k}}(i)$  である。それゆえ、 $|C'_{n\mathbf{k}}(i)| = |C_{n\mathbf{k}}(i)|$  となる。このように、方法1と方法2は変換行列  $T$  で関連づけられており、両者は類似している。

2つの方法の違いの一つは、プロッホ関数  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  と  $C_{n\mathbf{k}}(i)$  とが対応しており、プロッホ関数の周期関数部分  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  と  $C'_{n\mathbf{k}}(i)$  とが対応していることである[12]。まず、プロッホ関数を、 $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  あるいは  $\hat{I} = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|$  に注意して、

$$\begin{aligned} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle &= \int d^3\mathbf{r}' \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}') |\mathbf{r}'\rangle = \sum_{\mathbf{R}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} d^3\mathbf{r}' \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R} + \mathbf{r}') |\mathbf{R} + \mathbf{r}'\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{R}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} d^3\mathbf{r}' \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} |\mathbf{R} + \mathbf{r}'\rangle \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$= \sum_{\mathbf{R}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} d^3\mathbf{r}' u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}')\rangle} |\mathbf{R} + \mathbf{r}'\rangle \quad (2.44)$$

と表す。つぎに、式(2.37)の固有ベクトルが、基底  $|\mathbf{k}, i\rangle$  の展開係数であることに注意して、

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} \sum_i C_{n\mathbf{k}}(i) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} |\mathbf{R}, i\rangle \quad (2.45)$$

と表す。同様に、式(2.42)の固有ベクトルが、基底  $|\mathbf{k}, i\rangle'$  の展開係数であることに注意して、

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} \sum_i C'_{n\mathbf{k}}(i) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}_{\alpha_i})} |\mathbf{R}, i\rangle \quad (2.46)$$

と表す。ここで、 $1/\sqrt{N_{\text{cell}}}$  の因子は、固有ベクトル  $C_{nk}$  または  $C'_{nk}$  の規格化に含めた。

式 (2.43) と式 (2.45) とを比べると、プロッホ関数  $\psi_{nk}(\mathbf{r})$  と  $C_{nk}(i)$  とが対応していることがわかる。一方、式 (2.44) と式 (2.46) とを比べると、プロッホ関数の周期関数部分  $u_{nk}(\mathbf{r})$  と  $C'_{nk}(i)$  とが対応していることがわかる。

方法 1 は、式 (2.34) の変換が離散フーリエ変換であるため、数学的意味が明確である。一方、方法 2 は、一見すると数学的意味は見えづらい。しかし、上述したように、方法 2 の固有値問題の固有ベクトルはプロッホ関数の周期関数部分  $u_{nk}(\mathbf{r})$  と対応しており、これは目的によっては良い性質である。なぜなら、固体物理では  $u_{nk}(\mathbf{r})$  に関する積分を計算する必要がよくあるためである。もちろん、どちらの方法も相互に変換できるため、目的に合わせて適切な方法を使い分ければよい。

### 2.3.2 強結合パラメータ

前節の議論では、基底  $|\mathbf{R}, \tau_\alpha, \mu\rangle$  の具体的な表現を決める必要はなかった。しかし、実際に固有値問題を解き固有状態を求めるには、行列要素、

$$H_{ij}(\mathbf{R}) = \langle \mathbf{0}, i | H | \mathbf{R}, j \rangle = \langle \mathbf{0}, \tau_{\alpha_i}, \mu_i | H | \mathbf{R}, \tau_{\alpha_j}, \mu_j \rangle \quad (2.47)$$

の具体的な値が必要であるため、 $|\mathbf{R}, \tau_{\alpha_i}, \mu_i\rangle$  の具体的な表現が必要に思える。しかし、必ずしもそうではない。

経験的強結合近似モデルでは、関心のある系の価電子帯および伝導帯を記述するために必要な原子軌道にのみ着目する。これらの原子軌道は一般に非直交であるが、原子軌道の空間対称性を保存しつつ直交系へと変換する方法が知られている [13]。そのため、経験的強結合近似モデルでは、この直交系の軌道を基底にとると考える。しかし、これらの軌道を明示的に構築する必要はない。そのかわりに、式 (2.47) のハミルトニアン行列要素を、少数のパラメータでモデル化する。このパラメータは強結合パラメータと呼ばれ、第一原理計算や測定結果と一致するよう経験的に与えられる。したがって、固有状態  $|\psi_{nk}\rangle$  は直接的には構築されず、 $C_{nk}$  あるいは  $C'_{nk}$  が固有状態の役割を果たす [12]。

典型的なモデルでは、行列要素は最近接原子間のみ非ゼロとする。このモデルは最近接強結合近似モデルと呼ばれる。また、半導体を扱う一般的なモデルでは、軌道として s 軌道および p 軌道を考える。さらに、高エネルギーの軌道の効果を補うため、s\* 軌道または d 軌道を追加で考慮する [14, 15]。このような  $sp^3s^*$  モデルや  $sp^3d^5s^*$  モデルにおける行列要素のモデル式は、J.C. Slater と G.F. Koster によって包括的に与えられている [6]。

本論文では、IV 族および III-V 族半導体について、最近接  $sp^3d^5s^*$  強結合近似モデルを用いた電子状態および量子輸送計算を行った。そのさい、強結合パラメータは J.M. Jancu らによって与えられたものを用いた [16]。

### 2.3.3 水素終端モデル

2.3.1節では、3次元格子について強結合ハミルトニアンを示したが、2次元格子あるいは1次元格子の場合も同様の結果が成り立つ。例えば、1次元の格子を考える。格子ベクトル  $\mathbf{R}_n$  が、

$$\mathbf{R}_n = n\mathbf{a}_1 = n a \hat{\mathbf{x}} \quad (2.48)$$

であるとする。ここで、 $\mathbf{a}_1$  は基本並進ベクトル、 $\hat{\mathbf{x}}$  はデカルト座標の  $x$  軸方向の単位ベクトル、 $a$  は格子の周期を表す。逆格子ベクトルは、

$$\mathbf{G}_m = m\mathbf{b}_1 = m \frac{2\pi}{a} \hat{\mathbf{x}} \quad (2.49)$$

となる。第一ブリルアンゾーンは  $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}}$  として、 $-\pi/a \leq k_x \leq \pi/a$  である。1次元格子の基本構造  $\mathcal{B}$  も 2.2.1節と同様に定義する。以上の設定のもと 2.3.1節の内容を繰り返すと、式 (2.36) は、

$$H_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_n e^{ik_x a n} H_{ij}(\mathbf{R}_n) \quad (2.50)$$

となる。行列要素  $H_{ij}(\mathbf{R})$  の意味も前節までと同じであり、位置  $\mathbf{R} + \tau_{\alpha_j}$  にある軌道  $\mu_j$  から、位置  $\tau_{\alpha_i}$  にある軌道  $\mu_i$  へのホッピングエネルギー、あるいはオンサイトエネルギーを表す。これらの値は強結合パラメータを用いて、バルク結晶の場合同様に計算すればよい。なお、2次元格子の場合も同様である。

Si の場合、3次元格子を用いた場合と、1次元、あるいは2次元格子を用いた場合の違いは、界面の有無である。3次元格子の場合は、端がないため、すべての原子は周りの4つの原子と共有結合を形成している。しかし、1次元格子あるいは2次元格子の場合、 $\hat{\mathbf{y}}$  方向または  $\hat{\mathbf{z}}$  方向の周期性がないため、界面が存在し未結合手が現れる。未結合手に由来する界面準位はバンドギャップ付近に現れる。したがって、界面準位の影響を取り除くため、水素終端と同様の効果をもたらす水素終端モデルを用いる必要がある [17, 18]。

基本構造  $\mathcal{B}$  の中で、 $\alpha$  番目の原子に未結合手が存在するとする。ハミルトニアン行列の対角ブロック、 $\langle \mathbf{0}, \tau_\alpha, \mu | H | \mathbf{0}, \tau_\alpha, \mu' \rangle$  ( $\mu, \mu' \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$ ) を並べると、

$$\begin{array}{ccccc} & |s\rangle & |p_x\rangle & |p_y\rangle & |p_z\rangle \\ \langle s | & \left[ \begin{array}{cccc} \epsilon_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_p \end{array} \right] & & & \\ \langle p_x | & & & & \\ \langle p_y | & & & & \\ \langle p_z | & & & & \end{array} \quad (2.51)$$

となっている。ここに、未結合手に相当する  $sp^3$  混成軌道のエネルギーをシフトさせるエネルギー  $\delta_H$  を加えればよい。 $\alpha$  番目の原子から見て未結合手の方向を  $\mathbf{d}_H = l\hat{\mathbf{x}} + m\hat{\mathbf{y}} + n\hat{\mathbf{z}}$  とする。ただし、 $l^2 + m^2 + n^2 = 1$  と  $\mathbf{d}_H$  は規格化しておく。基底  $\{|s\rangle, |p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle\}$  から基底

$\{|sp^3\rangle, |sp^3\rangle', |sp^3\rangle'', |sp^3\rangle'''\}$  への変換行列  $T_H$  は、

$$\begin{bmatrix} |sp^3\rangle & |sp^3\rangle' & |sp^3\rangle'' & |sp^3\rangle'''\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |s\rangle & |p_x\rangle & |p_y\rangle & |p_z\rangle \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} 1/2 & * & * & * \\ l & * & * & * \\ m & * & * & * \\ n & * & * & * \end{bmatrix}}_{T_H} \quad (2.52)$$

と与えられる。あの計算からわかるように、行列  $T_H$  の成分のうち、\* で記した部分の具体的な値は必要ない。基底  $\{|sp^3\rangle, |sp^3\rangle', |sp^3\rangle'', |sp^3\rangle'''\}$  における行列要素を、 $\langle sp^3|H|sp^3\rangle = \delta_H$ 、その他をゼロとする。 $\delta_H$  は未結合手となっている  $sp^3$  混成軌道のエネルギーをバンドギャップ付近からシフトさせる。 $\langle sp^3|H|sp^3\rangle$  を基底  $\{|s\rangle, |p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle\}$  で表示すると、

$$T_H \begin{bmatrix} \delta_H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} T_H^\dagger = \delta_H \begin{bmatrix} 1/4 & l/2 & m/2 & n/2 \\ l/2 & l^2 & lm & ln \\ m/2 & ml & m^2 & mn \\ n/2 & nl & nm & n^2 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

となる。この行列を、もとの水素終端を施していないハミルトニアン行列の未結合手が存在するブロックに足すことで、未結合手に由来する界面準位を取り除くことができる。

### 2.3.4 バンド構造

図 2.1(a) に、 $sp^3d^5s^*$  強結合近似モデルを用いて計算したバルク Si のバンド構造を示す。基本構造  $B$  の位数は 2 である。1 原子あたり 10 個の軌道を考慮するため、ハミルトニアン行列  $H_k$  のサイズは  $20 \times 20$  となる。図 2.1(b) に、バルク Si の第一ブリルアンゾーンを示す。赤線で囲まれた領域は既約ブリルアンゾーンを表す。対称性の高い  $k$  点は、 $2\pi/a_0$  を 1 単位として、 $\Gamma = (0, 0, 0)$ 、 $X = (0, 1, 0)$ 、 $L = (1/2, 1/2, 1/2)$ 、 $W = (1/2, 1, 0)$ 、 $K = (3/4, 3/4, 0)$ 、 $U = (1/4, 1, 1/4)$  である。図には示していないが、例えば、 $k = (0, -1, 0)$  は  $X$  点と等価である。

## 2.4 包絡関数近似モデル

2.2 節および 2.3 節では、実効的な一粒子ポテンシャルが式 (2.12) のように、格子ポテンシャル  $U^{(lat)}(r)$  のみで表される場合を考察してきた。しかし、実際には外部から印加された電界やイオン化不純物などが作る外部ポテンシャルが存在する。本節では、これらの外部ポテンシャルが一定の条件を満たす場合、問題が著しく簡略化されることを示す。J.M. Luttinger と W. Kohn によって最初に導出されたいわゆる包絡関数近似または有効質量近似 [19] は、半導体デバイスの登場から現在に至るまで、その動作原理を理解するためにもっとも重要な理論の一つである [20]。このモデルは、半導体中のキャリアの振る舞いを、複雑な結晶ポテンシャルを考慮しつつも著しく単純化された方程式で記述する。すなわち、いくつかの条件のもとで、真空中の電子に対するシュレーディンガー方程式によく似た方程式を得ることができる。

2.4.1 節では、外部ポテンシャルをブロック関数を基底関数として行列表示した結果を一般的に記述する。この節では近似を施しておらず結果は厳密に成り立つ。2.4.2 節では、外部ポテンシャル

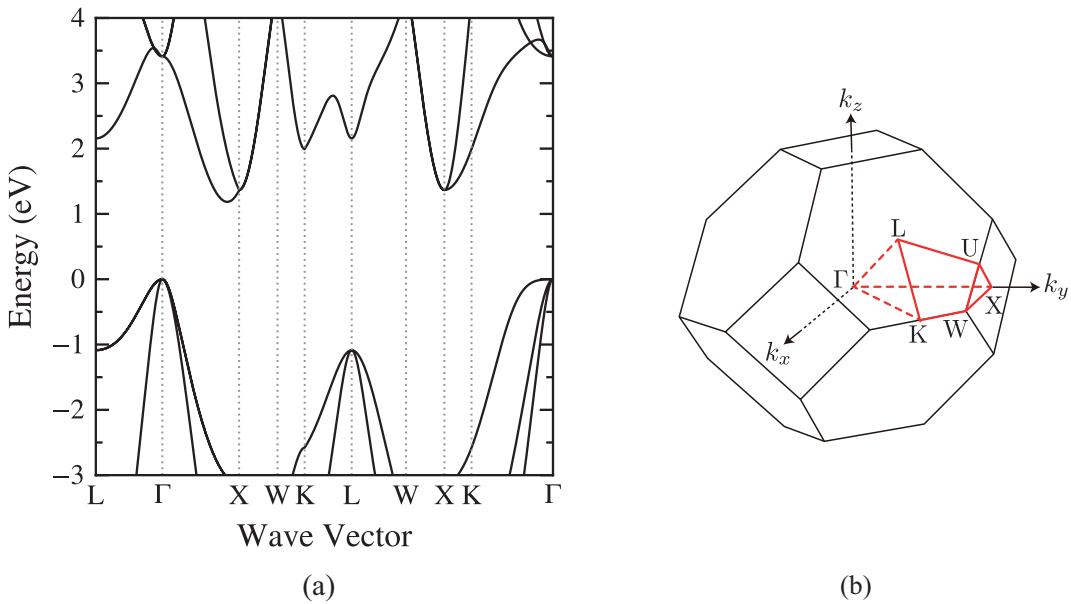


図 2.1: (a)  $sp^3d^5s^*$  強結合近似モデルを用いて計算したバルク Si のバンド構造 . (b) バルク Si の第一ブリルアンゾーン . 赤線で囲まれた領域は既約ブリルアンゾーンを表す . 対称性の高い  $k$  点は ,  $2\pi/a_0$  を 1 単位として ,  $\Gamma = (0, 0, 0)$  ,  $X = (0, 1, 0)$  ,  $L = (1/2, 1/2, 1/2)$  ,  $W = (1/2, 1, 0)$  ,  $K = (3/4, 3/4, 0)$  ,  $U = (1/4, 1, 1/4)$  である .

ルの空間変化がゆるやかであることを仮定し , また , 解析対象の電子が特定の波数近傍の状態から構成されることを仮定し , 包絡関数方程式を導出する . 最後に , 2.4.3 節では , 包絡関数方程式の特別な場合として単一バンド有効質量方程式を示す .

#### 2.4.1 行列要素 $\langle n'k'|U|nk \rangle$

格子ポテンシャル  $U^{(\text{lat})}(\mathbf{r})$  に加えて , 外部ポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  を含むシュレーディンガーアルゴリズムは ,

$$[\hat{H}_0 + U(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U^{(\text{lat})}(\mathbf{r}) \quad (2.54)$$

である . 波動関数  $\psi$  をプロッホ関数  $\psi_{nk}$  で展開すると ,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{nk} c_{nk} \psi_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{nk} c_{nk} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (2.55)$$

となる .  $\hat{H}_0 \psi_{nk} = E_{nk} \psi_{nk}$  に注意して , 式 (2.55) を式 (2.54) に代入すると ,

$$\sum_{nk} c_{nk} [E_{nk} \psi_{nk}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \psi_{nk}(\mathbf{r})] = E \sum_{nk} c_{nk} \psi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (2.56)$$

となる . この方程式の両辺に  $\psi_{n'k'}^*(\mathbf{r})$  を乗じて , 全空間にわたって積分すると ,

$$E_{n'k'} c_{n'k'} + \sum_{nk} c_{nk} \int \psi_{n'k'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{nk}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = E c_{n'k'} \quad (2.57)$$

が得られる。ここで、式(2.18)のプロッホ関数の直交性を利用した。つぎに、行列要素、

$$\langle n'k'|U|nk\rangle = \int \psi_{n'k'}^*(\mathbf{r})U(\mathbf{r})\psi_{nk}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2.58)$$

について考える。まず、外部ポテンシャルをフーリエ級数展開する。

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad U_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\Omega} \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (2.59)$$

これを式(2.58)に代入すると、

$$\langle n'k'|U|nk\rangle = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \int_{\Omega} u_{n'k'}^*(\mathbf{r})u_{nk}(\mathbf{r})e^{-i(k'-k-q)\cdot r} d\mathbf{r} \quad (2.60)$$

となる。ここで、右辺の系全体にわたる積分と、「 $l$ 番目の単位胞  $\Omega_{\text{cell}}$  での積分」を  $l = 1, 2, \dots, N_{\text{cell}}$  の場合それぞれで計算して足し合わせた値とが等しいことを利用する。すなわち、 $l$  番目の単位胞への格子ベクトルを  $\mathbf{R}_l$  としたとき、 $\mathbf{r} = \mathbf{R}_l + \mathbf{r}'$  として、式(2.60)は、

$$\langle n'k'|U|nk\rangle = \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \sum_l e^{-i(k'-k-q)\cdot\mathbf{R}_l} \int_{\Omega_{\text{cell}}} u_{n'k'}^*(\mathbf{r}')u_{nk}(\mathbf{r}')e^{-i(k'-k-q)\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (2.61)$$

と書き換えられる。ここで、 $u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r})$  を用いた。さらに、 $\sum_l e^{-i(k'-k-q)\cdot\mathbf{R}_l} = N_{\text{cell}} \sum_{\mathbf{G}} \delta_{k'-k-q, \mathbf{G}}$  であることを用いると、

$$\begin{aligned} \langle n'k'|U|nk\rangle &= \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}} \delta_{k'-k-q, \mathbf{G}} N_{\text{cell}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} u_{n'k'}^*(\mathbf{r}')u_{nk}(\mathbf{r}')e^{-i(k'-k-q)\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \\ &= \sum_{\mathbf{G}} U_{k'-k-\mathbf{G}} N_{\text{cell}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} u_{n'k'}^*(\mathbf{r}')u_{nk}(\mathbf{r}')e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \\ &= \sum_{\mathbf{G}} U_{(k'-\mathbf{G})-k} N_{\text{cell}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} u_{n', k'-\mathbf{G}}^*(\mathbf{r}')u_{nk}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= \sum_{\mathbf{G}} U_{(k'-\mathbf{G})-k} \langle u_{n', k'-\mathbf{G}} | u_{nk} \rangle \end{aligned} \quad (2.62)$$

となる。ここで、

$$\langle u_{n', k'-\mathbf{G}} | u_{nk} \rangle = N_{\text{cell}} \int_{\Omega_{\text{cell}}} u_{n', k'-\mathbf{G}}^*(\mathbf{r})u_{nk}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.63)$$

と、プロッホ関数の周期関数部分に関する重なり積分を定義した。プロッホ関数は式(2.17)によつて規格化されているため、 $\langle u_{nk} | u_{nk} \rangle = 1$  である。

以上のように、プロッホ関数を基底とした場合における外部ポテンシャルの行列要素  $\langle n'k'|U|nk\rangle$  は、最初の式(2.58)から式(2.62)まで、近似を導入することなく変形できる。

## 2.4.2 包絡関数

式(2.62)を基に、ここから近似を導入する。まず、外部ポテンシャル  $U(\mathbf{r})$  は、格子定数程度の空間スケールでは変化が小さいと仮定する。より正確には、式(2.62)の逆格子ベクトル  $\mathbf{G}$  に関する

る総和の中で,  $G = 0$  のみが非ゼロとなる程度に外部ポテンシャルはゆるやかに変化すると仮定する. すなわち,

$$U_{(\mathbf{k}' - \mathbf{G}) - \mathbf{k}} \approx U_{(\mathbf{k}' - \mathbf{G}) - \mathbf{k}} \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{0}} \quad (2.64)$$

と表されると仮定する. これにより, 式(2.62)は,

$$\langle n' \mathbf{k}' | U | n \mathbf{k} \rangle = U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \langle u_{n' \mathbf{k}'} | u_{n \mathbf{k}} \rangle \quad (2.65)$$

となる.

つぎに, 解析したい電子状態が, ある波数  $k_0$  近傍の状態から構成されていると仮定する. より正確には, 式(2.55)の展開で, ある波数  $k_0$  近傍の波数  $k$  の成分のみが非ゼロであると仮定する. つまり, プロッホ関数の重ね合わせで構成される波束について考え, 波束の実空間上の広がりは, 格子定数程度の空間スケールよりも大きいと仮定する. これにより, 式(2.65)の左辺の  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{k}'$  は  $k_0$  に近い値だけを考えればよい. より正確には,

$$\langle u_{n' \mathbf{k}'} | u_{n \mathbf{k}} \rangle \approx \delta_{n' n} \quad (2.66)$$

としてよい程度に  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{k}'$  が近接したプロッホ関数の線形結合で記述される電子状態を解析対象と仮定する.

以上の近似を導入することで, 式(2.62)は,

$$\langle n' \mathbf{k}' | U | n \mathbf{k} \rangle \approx U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} \delta_{n' n} \quad (2.67)$$

となる. これを式(2.57)に代入すると, つぎの式が得られる.

$$E_{n' \mathbf{k}'} c_{n' \mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}} c_{n' \mathbf{k}} U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} = E c_{n' \mathbf{k}'} \quad (2.68)$$

この式は, 異なるバンド指数の展開係数は互いに混じり合わないことを表す. そのため, 以下ではあるバンドにのみ着目し, バンド指数を省略する.

式(2.68)を逆フーリエ変換する. すなわち, 両辺に  $e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}$  を乗じ,  $\mathbf{k}'$  に関して総和をとる.

$$\sum_{\mathbf{k}'} E(k'_x, k'_y, k'_z) c_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = E \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (2.69)$$

ここでは, 着目しているバンドの分散関係  $E_{\mathbf{k}'}$  を  $E(k'_x, k'_y, k'_z)$  と表した. 式(2.69)の左辺第一項は,

$$\sum_{\mathbf{k}'} E(k'_x, k'_y, k'_z) c_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = \hat{E} \left( -i \frac{\partial}{\partial x}, -i \frac{\partial}{\partial y}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right) \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (2.70)$$

となる. ただし,  $\hat{E}(-i(\partial/\partial x), -i(\partial/\partial y), -i(\partial/\partial z))$  は, エネルギーの波数依存性  $E(k'_x, k'_y, k'_z)$  の式に含まれる  $k'_x$ ,  $k'_y$ ,  $k'_z$  を,

$$k'_x \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial x}, \quad k'_y \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial y}, \quad k'_z \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.71)$$

と形式的に置きかえて作った演算子である。式 (2.69) の左辺第 2 項は、

$$\sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} = U(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.72)$$

となる。これらを式 (2.69) に代入すると、

$$\left[ \hat{E} \left( -i \frac{\partial}{\partial x}, -i \frac{\partial}{\partial y}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right) + U(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.73)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.74)$$

が得られる。

式 (2.74) の  $\varphi(\mathbf{r})$  は包絡関数と呼ばれる。なぜなら、式 (2.55) の展開は包絡関数  $\varphi_n(\mathbf{r})$  を用いて、

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \sum_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.75)$$

と近似できるためである。ここでは、バンド指数を陽に書いた。この式の右辺から、 $\varphi_n(\mathbf{r})$  が包絡関数と呼ばれる意味がわかる。仮定より  $k_0$  近くの狭い波数範囲でのみ  $c_{n\mathbf{k}}$  が非ゼロであるため、 $\varphi_n(\mathbf{r})$  は格子定数程度の空間スケールよりも広い空間スケールで変化する。これに対して  $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  は、格子定数程度の空間スケールで変化する。これらの積が  $\psi(\mathbf{r})$  である。なお、プロッホ関数の周期関数部分の波数  $k$  依存性は小さいという仮定を用いて、 $u_{n\mathbf{k}} \approx u_{n\mathbf{k}_0}$  とした。これは、展開係数  $c_{n\mathbf{k}}$  が非ゼロとなる  $k_0$  近くの波数で、プロッホ関数の周期関数部分の波数  $k$  依存性が小さければ妥当である。

### 2.4.3 有効質量方程式

$E_k$  に具体的な関数形を仮定し、式 (2.73) から单一バンド有効質量方程式を導く。格子ポテンシャルのみが存在する場合の分散関係として、つぎの等方的な放物線を考える。

$$E(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + E_{v0} \quad (2.76)$$

$m^*$  は有効質量、 $E_{v0}$  は  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  のときのエネルギーである。GaAs などの伝導帯谷は  $\Gamma$  点に存在し、分散関係はこのような放物線の式で書ける。單一のバンドのみを考えるため、バンドを区別する添字は省略する。

式 (2.76) から  $k_x \rightarrow -i(\partial/\partial x)$ 、 $k_y \rightarrow -i(\partial/\partial y)$ 、 $k_z \rightarrow -i(\partial/\partial z)$  と置きかえると、

$$\hat{E} \left( -i \frac{\partial}{\partial x}, -i \frac{\partial}{\partial y}, -i \frac{\partial}{\partial z} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + E_{v0} \quad (2.77)$$

となる。したがって、式 (2.73) から、つぎの有効質量方程式が得られる。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + E_{v0} \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.78)$$

有効質量方程式は、真空中の電子に外部ポテンシャル  $U(r)$  が印加された場合のシュレディンガー方程式と類似している。違いは、電子の質量  $m_0$  が有効質量  $m^*$  に変更されていることが見てわかる。さらに、固有関数の意味も異なる。有効質量方程式の固有関数は、式(2.55)の展開で定義された波動関数  $\psi$  の包絡関数である。つまり、式(2.75)より、

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r})u_0(\mathbf{r}) \quad (2.79)$$

と近似的に表現できる。ここで、 $u_0(\mathbf{r})$  は、谷底でのプロッホ関数の周期関数部分である。

より一般的な例として、

$$E(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z} \right] + E_{v0} \quad (2.80)$$

なる分散関係を考える。ここで、 $m_x, m_y, m_z$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向の有効質量である。 $k_0 = (k_{0x}, k_{0y}, k_{0z})$  は伝導帯谷の底の波数であり、 $E_{v0}$  はその波数でのエネルギーである。この式の  $k_x, k_y, k_z$  をそのまま微分演算子に置きかえるのは得策ではない。そのまま置きかえてしまうと、1次の空間微分が表れてしまい、数学的に扱いづらいためである。そこで、式(2.69)の左辺第一項を、

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} E(k_x, k_y, k_z) c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= \sum_{\mathbf{k}} E(k_x + k_{0x}, k_y + k_{0y}, k_z + k_{0z}) c_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right) + E_{v0} \right] c_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}} \\ &= e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right) + E_{v0} \right] c_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + E_{v0} \right] \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (2.81)$$

とする。式(2.69)の左辺第2項と右辺についても同様に計算すると、有効質量方程式、

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\mathbf{r}) + E_{v0} \right] \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (2.82)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.83)$$

が得られる。式(2.83)の右辺の波数に関する総和の中で、展開係数と平面波の波数が  $k_0$  だけずれていることに注意すると、式(2.75)より、

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.84)$$

と近似的に表現できる。ここで、 $\psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  は、着目しているバンドにおいて波数が  $k_0$  のプロッホ関数を表す。

最後に，包絡関数  $\varphi(\mathbf{r})$  の規格化について検討する．式 (2.17) と同様に， $|\psi(\mathbf{r})|^2$  を全体積で積分した値を 1 とすると，

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{\Omega} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \int_{\Omega} |\varphi(\mathbf{r})|^2 |u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \approx \sum_l |\varphi(\mathbf{R}_l)|^2 \int_{\Omega_{\text{cell}}} |u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \\ &= \sum_l |\varphi(\mathbf{R}_l)|^2 \frac{1}{N_{\text{cell}}} = \sum_l |\varphi(\mathbf{R}_l)|^2 \frac{\Omega_{\text{cell}}}{\Omega} \approx \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.85)$$

となる．ここで，包絡関数  $\varphi(\mathbf{r})$  は，単位胞  $\Omega_{\text{cell}}$  の空間スケールよりも，ゆるやかに変化することを用いた．

## 2.5 電子の動力学

これまで，時間に依存しないシュレディンガー方程式の定常的な解について考察してきた．つぎに，波動関数の時間発展について考える．波動関数の時間発展は，時間に依存するシュレディンガー方程式，

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.86)$$

で決まる．基本的な方針は，この式の一般解  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  をブロッホ関数  $\psi_{nk}(\mathbf{r})$  で展開し，展開係数の時間変化を調べることである．すなわち，波動関数の時間発展を調べるさい，ブロッホ関数およびバンド構造は考察を進めるための土台となる．

2.5.1 節では，C. Kittel の方法 [21] に従い，加速定理をベクトルポテンシャルを用いて示す．ここで導入した記法は，つぎの節でも用いる．2.5.2 節では，Krieger-Iafrate (KI) 方程式を導出する．記法による混乱を避けるため，時間に依存する波数  $k(t)$  の導入を，KI 方程式導出の後半に行う．2.5.3 節では，群速度について説明する．これは，多くの教科書で詳細に述べられているため，本論文ではその定義を記法の確認のために簡潔に示す．最後に，2.5.4 節では，波束の概念を概説し，これが，電子の古典的な粒子的描像と量子力学的な波動的描像とを結びつけることを示す．さらに，波束の時間発展が，古典的なハミルトンの正準方程式と同一の表式で記述されることを説明する．このことは，電子を波束と考える限り古典的な力学で培われた結論の多くを，電子の動力学に適用できることを意味する．

### 2.5.1 加速定理

空間的に一様で時間変化しない電界  $\mathbf{F}$  を，つぎのようにベクトルポテンシャルで表現する．

$$\mathbf{A} = -\mathbf{F}t \quad (2.87)$$

このとき，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m_0}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + U^{(\text{lat})}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m_0}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{F}t)^2 + U^{(\text{lat})}(\mathbf{r}) \quad (2.88)$$

となる。ここで、 $\hat{p}$  は運動量演算子である。このハミルトニアン  $\hat{H}(t)$  は格子の周期性をもつため、周期境界条件のもと固有関数はつきのプロット関数となる。

$$\hat{H}(t)\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = E_{n\mathbf{k}}(t)\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t), \quad \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.89)$$

ここで、時刻  $t$  はパラメータとみなす。つまり、時間依存の項を陽に含むハミルトニアンに対して、各時刻における固有関数が式 (2.89) で表せると考える。すなわち、すべての時刻において、 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  は格子ベクトル分の並進演算子  $\hat{T}_R$  の固有関数であり、その固有値は  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  である。このとき、 $k$  は良い量子数であり、外場に影響されない [21]。式 (2.89) を整理すると、

$$\left[ \frac{1}{2m_0} (\hat{p} + \hbar\mathbf{k} - e\mathbf{F}t)^2 + U^{(\text{lat})}(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = E_{n\mathbf{k}}(t)u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.90)$$

となる。運動エネルギー項  $\hat{p} + \hbar\mathbf{k} - e\mathbf{F}t$  の部分に注意すると、時刻  $t$  と量子数  $k$  に、

$$\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{F}t = \hbar\mathbf{k}' - e\mathbf{F}t' \quad (2.91)$$

なる関係があるとき、式 (2.90) の左辺の演算子部分が等しいことがわかる。したがって、式 (2.91) を満たす  $t, t', k, k'$  を用いて、

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = u_{n\mathbf{k}'}(\mathbf{r}, t'), \quad E_{n\mathbf{k}}(t) = E_{n\mathbf{k}'}(t') \quad (2.92)$$

と表せる。ここで、 $t' = 0$  とすると、

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = u_{n, \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar}(\mathbf{r}, 0), \quad E_{n\mathbf{k}}(t) = E_{n, \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar}(0) \quad (2.93)$$

となる。したがって、

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n, \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar}(\mathbf{r}, 0) \quad (2.94)$$

$$E_{n\mathbf{k}}(t) = E_{n, \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar}(0) \quad (2.95)$$

と表すことができる。つまり、任意の時刻における量子数  $(n, \mathbf{k})$  の状態は、時刻  $t = 0$  のエネルギーおよび波動関数を用いて記述できることがわかる。例えば、電子が時刻  $t = 0$  で量子数  $(n, \mathbf{k})$  にあったとする。このとき、並進演算子  $\hat{T}_R$  の固有関数をラベルする量子数である  $k$  は運動の定数であるため、 $t$  秒後でも電子は同じ  $k$  に留まる。バンド指数  $n$  は変化する可能性があるが、ここでは変化せずに最初の  $n$  に留まると仮定する。バンド指数の変化を考慮した一般的な場合は、つきの 2.5.2 節で扱う。このように、量子数  $(n, \mathbf{k})$  が時間経過で変化しない一方、エネルギーおよび波動関数は、式 (2.94) および式 (2.95) のとおりに時間変化する。

以上をまとめると、時刻  $t = 0$  で量子数  $(n, \mathbf{k})$  にあった電子は、 $t \neq 0$  でも同じ量子数  $(n, \mathbf{k})$  に留まるが、そのエネルギーおよび波動関数は  $t = 0$  で量子数  $(n, \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar)$  であったものに変化する。すなわち、バンド構造が時間経過とともに波数空間を  $e\mathbf{F}t/\hbar$  だけ平行移動する。これを逆に見ると、電子は時間が経過するにつれて、固定されたバンド構造の中を  $-e\mathbf{F}t/\hbar$  だけ平行移動する。したがって、時間に依存する波数  $k(t)$  を定義することができ、その時間変化は、

$$\frac{dk(t)}{dt} = -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \quad (2.96)$$

と与えられる。すなわち、時間に依存する結晶運動量  $\hbar k(t)$  の時間変化は、古典的なニュートンの運動方程式と同様の表式で記述される。この法則は加速定理として知られている [21]。

### 2.5.2 Krieger-lafrate 方程式

時間に依存するシュレディンガー方程式の一般解  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  を、各時刻での固有関数  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$  を用いて、つぎのように展開する。

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n\mathbf{k}} C_{n\mathbf{k}}(t) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n\mathbf{k}} C_{n\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n, \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar}(\mathbf{r}, 0) \quad (2.97)$$

時間に依存するシュレディンガー方程式  $i\hbar(\partial/\partial t)\Psi = \hat{H}(t)\Psi$  の左辺に、式 (2.97) を代入すると、

$$(左辺) = i\hbar \sum_{n\mathbf{k}} \left[ \frac{dC_{n\mathbf{k}}(t)}{dt} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) + C_{n\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left( \frac{-e\mathbf{F}}{\hbar} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{k}''} u_{n, \mathbf{k}''}(\mathbf{r}, 0) \Big|_{\mathbf{k}'' = \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar} \right] \quad (2.98)$$

となる。この式に、 $\psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{n', \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar}^*(\mathbf{r}, 0)$  を乗じて積分すると、

$$\begin{aligned} (左辺) &= i\hbar \frac{dC_{n'\mathbf{k}'}(t)}{dt} - ie\mathbf{F} \cdot \sum_{n\mathbf{k}} C_{n\mathbf{k}}(t) \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n', \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar}^*(\mathbf{r}, 0) \nabla_{\mathbf{k}''} u_{n, \mathbf{k}''}(\mathbf{r}, 0) \Big|_{\mathbf{k}'' = \mathbf{k} - e\mathbf{F}t/\hbar} \\ &= i\hbar \frac{dC_{n'\mathbf{k}'}(t)}{dt} - ie\mathbf{F} \cdot \sum_n C_{n\mathbf{k}'}(t) \int d\mathbf{r} u_{n', \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar}^*(\mathbf{r}, 0) \nabla_{\mathbf{k}''} u_{n, \mathbf{k}''}(\mathbf{r}, 0) \Big|_{\mathbf{k}'' = \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar} \\ &= i\hbar \frac{dC_{n'\mathbf{k}'}(t)}{dt} + e\mathbf{F} \cdot \sum_n C_{n\mathbf{k}'}(t) \mathbf{X}_{n', n}(\mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar) \end{aligned} \quad (2.99)$$

となる。ここで、

$$\mathbf{X}_{n', n}(\mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar) = -i \int d\mathbf{r} u_{n', \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar}^*(\mathbf{r}, 0) \nabla_{\mathbf{k}''} u_{n, \mathbf{k}''}(\mathbf{r}, 0) \Big|_{\mathbf{k}'' = \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar} \quad (2.100)$$

とおいた。一方、時間に依存するシュレディンガー方程式  $i\hbar(\partial/\partial t)\Psi = \hat{H}(t)\Psi$  の右辺に、式 (2.97) を代入し、 $\psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}, t)$  を乗じて積分すると、

$$(右辺) = C_{n'\mathbf{k}'}(t) E_{n', \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar}(0) \quad (2.101)$$

となる。以上より、時間に依存するシュレディンガー方程式は、

$$i\hbar \frac{dC_{n'\mathbf{k}'}(t)}{dt} + e\mathbf{F} \cdot \sum_n C_{n\mathbf{k}'}(t) \mathbf{X}_{n', n}(\mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar) = C_{n'\mathbf{k}'}(t) E_{n', \mathbf{k}' - e\mathbf{F}t/\hbar}(0) \quad (2.102)$$

となる。この式は、異なる量子数  $k$  の状態は互いに混じり合わないことを表している。

式 (2.96) より、つぎの時間に依存する波数を導入する<sup>3</sup>。

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k} - \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} t \quad (2.103)$$

<sup>3</sup>  $\exp[i\mathbf{k}(t) \cdot \mathbf{r}]$  ではなく、 $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  が周期境界条件を満たすことに注意。

式(2.103)を用いると、式(2.102)は、

$$i\hbar \frac{dC_{n\mathbf{k}(0)}(t)}{dt} + e\mathbf{F} \cdot \sum_{n'} C_{n'\mathbf{k}(0)}(t) \mathbf{X}_{n,n'}(\mathbf{k}(t)) = C_{n\mathbf{k}(0)}(t) E_{n\mathbf{k}(t)}(0) \quad (2.104)$$

と表せる。ここで、式(2.103)より、量子数  $\mathbf{k}$  は  $\mathbf{k}(0)$  と書けることを用いた。さらに、

$$C_{n\mathbf{k}(0)}(t) = a_n(t) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_{n\mathbf{k}(t')}(0) dt' \right] \quad (2.105)$$

とおいて、これを式(2.104)に代入し整理すると、Krieger-Iafrate 方程式 [22]、

$$\frac{da_n(t)}{dt} = -\frac{e\mathbf{F}}{i\hbar} \cdot \sum_{n'} a_{n'}(t) \mathbf{X}_{n,n'}(\mathbf{k}(t)) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_{n\mathbf{k}(t')} - E_{n'\mathbf{k}(t')}) dt' \right] \quad (2.106)$$

が得られる。ここで、 $E_{n\mathbf{k}(t)}(0)$  を  $E_{n\mathbf{k}(t)}$  と略記した。 $|a_n(t)|^2$  は電子を  $n$  番目のバンドに見出す確率を表す。

### 2.5.3 群速度

プロッホ状態  $(n, \mathbf{k})$  の速度期待値は、

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle n\mathbf{k} | [\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}), \hat{\mathbf{r}}] | n\mathbf{k} \rangle \quad (2.107)$$

と定義される。この式の行列要素の部分は、

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k} | [\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}), \hat{\mathbf{r}}] | n\mathbf{k} \rangle &= -i \int u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{k}} \left( e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= -i \int u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{k}} \left( \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{k}) \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= -i \nabla_{\mathbf{k}} \int u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= -i \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.108)$$

となる。ここで、 $\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{k})$  やヘルマン・ファインマンの定理などを用いた。

以上より、プロッホ状態  $(n, \mathbf{k})$  の速度期待値は、分散関係の波数微分を用いて、

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \quad (2.109)$$

となる。これは、古典的な波動理論における群速度の表式と一致している。

### 2.5.4 波束および運動方程式

古典力学および古典電磁気学では、電子を質量  $m_0$  をもつ点電荷として表現する。この場合、電子の初期位置と初期速度が与えられると、その後の電子の時間発展はニュートンの運動方程式によって一意に決定される。このような電子に対する古典的な粒子的描像は、巨視的スケールにおける

る多くの観測事実の説明に成功している。したがって、量子力学はその極限において、このような古典的なモデルと整合している必要がある。しかし、単一のプロッホ状態では、電子の確率密度は  $|\psi_{nk}(\mathbf{r})|^2 = |u_{nk}(\mathbf{r})|^2$  となり、格子間隔程度では変化する一方、巨視的には全空間で一様となり、粒子的描像とは相容れない。この問題は波束を導入することで解決できる。

バンド指数  $n$ 、波数  $k_0$  の単一のプロッホ関数を考える。単一のプロッホ関数は全空間に確率密度が広がっているが、波数  $k_0$  近傍の  $\Delta k$  の範囲にあるプロッホ関数の線形結合を考えることで、波束を構成できる。すなわち、 $|k - k_0| < \Delta k$  を満たす  $k$  でのみ値をもつ係数  $C_k$  を用いて、 $\sum_k C_k \psi_k(\mathbf{r})$  なる波束を構成する。ここで、波束は単一のバンドから構成されると仮定し、バンド指数を省略した。 $C_k$  の位相を適切に選ぶことで、波束の確率密度を任意の位置  $\mathbf{r}_0$  の近傍に集中させることができる。また、実空間上で波束の広がり  $\Delta r$  と波束を構成するプロッホ関数の範囲  $\Delta k$  には、 $|\Delta r| \approx 1/|\Delta k|$  という関係がある。これは、粒子の位置と運動量の不確定性関係を表している。

第一ブリルアンゾーンの広さに対して  $\Delta k$  が小さいと仮定すれば、波束の波数ベクトルはおよそ  $k_0$  で代表できる。この場合、不確定性関係より波束は実空間上でいくつかの単位胞にわたって広がる。これとは逆に、実空間上で単位胞程度のスケールに局在した波束を構成するには、第一ブリルアンゾーン全体にわたるプロッホ関数を重ね合わせる必要がある。

古典力学や古典電磁気学のように電子の巨視的な振る舞いを考える場合、単位胞のスケールは 1 nm よりも小さいため、実空間上でいくつかの単位胞程度にわたる電子位置の不確定性  $\Delta r$  は無視できる。したがって、波束の中心を位置  $\mathbf{r}_0$  で代表できると同時に、波数も  $k_0$  で代表できる。このように、波束は、単位胞スケールでの波動関数に关心がない限り、位置と運動量が明確に定義された点電荷としてモデル化することができる。

$n$  番目のバンドから構成される波束について、その代表点をあらためて  $\mathbf{r}, \mathbf{k}$  と表す。代表点の時間発展には、2.5.1 節と 2.5.3 節の結果を適用できる。結果をまとめると、

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = +\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (2.110)$$

となる。ここで、 $E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = E_{nk} + U(\mathbf{r})$  とおいた。式 (2.110) は、古典的なハミルトン力学の正準方程式と同一の表式であることがわかる。

## 2.6 散乱

バンド構造および電子の動力学と合わせて、散乱は結晶の電気的性質を理解するために重要な現象である。系が非平衡状態から熱平衡状態あるいは非平衡定常状態へどのように緩和するかは、散乱によって説明される。散乱は、状態  $(n_0, \mathbf{k}_0)$  から状態  $(n, \mathbf{k})$  近傍への単位時間あたりの遷移確率によって記述される。このような散乱の取り扱いは、外部電界に由来するポテンシャルの空間変化スケールが、連続する散乱間に電子が移動する平均距離よりも十分大きく、一方、散乱を引き起こす相互作用が空間的に局在し、過去に起こった他の散乱との量子干渉効果が無視できる場合に正当化される [23]。散乱を引き起こす相互作用は様々であるが、通常これらの相互作用は互いに独立とみなされ、対応する遷移確率はフェルミの黄金則に基づいて計算される。

Siデバイスにおける主要な散乱過程として、フォノン散乱、不純物散乱、界面ラフネス散乱が知られている。これらの散乱過程の記述には共通する部分もある一方、個別に議論すべき点もある。例えば、一電子状態に基づいて電子とフォノンとの相互作用を正しく記述することは困難であり、この場合、多粒子状態を扱うモデルが必要である。それでも、散乱過程の記述には共通する部分が存在するため、本節ではバルク結晶における遷移確率の一般的な表式を考察する。個別に考慮すべき内容は次章以降に記す。

2.6.1節では、相互作用が1体のポテンシャルエネルギーで表現されると仮定し、フェルミの黄金則の表式を導く。2.6.2節では、フェルミの黄金則の物理的意味について考察し、加速と散乱に基づく半古典的な輸送モデルの大枠を示す。最後に、2.6.3節では、遷移確率から散乱確率を計算する方針を簡単に示す。

### 2.6.1 フェルミの黄金則

時間に依存するシュレディンガー方程式の一般解  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  を、プロッホ関数  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を用いて、つきのように展開する。

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n\mathbf{k}} B_{n\mathbf{k}}(t) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.111)$$

$$B_{n\mathbf{k}}(t) = C_{n\mathbf{k}}(t) \exp\left(-\frac{iE_{n\mathbf{k}}t}{\hbar}\right) \quad (2.112)$$

ハミルトニアン  $\hat{H}$  には、格子ポテンシャルに加えて、時間に依存する散乱ポテンシャル  $U(\mathbf{r}, t)$  が含まれているとする。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U(\mathbf{r}, t) \quad (2.113)$$

時間に依存するシュレディンガー方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.114)$$

である。これに、式(2.111)を代入し、両辺に  $\psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})$  を乗じて全空間で積分すると、

$$\frac{\partial B_{n'\mathbf{k}'}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n\mathbf{k}} \langle n'\mathbf{k}' | U | n\mathbf{k} \rangle B_{n\mathbf{k}}(t) + \frac{1}{i\hbar} E_{n'\mathbf{k}'} B_{n'\mathbf{k}'}(t) \quad (2.115)$$

となる。ここで、式(2.18)で表されるプロッホ関数の直交性を用いた。式(2.115)は、展開係数  $B_{n\mathbf{k}}(t)$  に対する連立微分方程式を表している。行列要素  $\langle n'\mathbf{k}' | U | n\mathbf{k} \rangle$  が与えられれば、初期時刻  $t = 0$  における展開係数  $B_{n\mathbf{k}}(0)$  の値を決めると、それ以降の時間発展はこの連立微分方程式から数値的に求めることができる。

0次近似として、散乱ポテンシャルが  $U(\mathbf{r}, t) = 0$  の場合を考えると、

$$B_{n\mathbf{k}}(t) = B_{n\mathbf{k}}(0) \exp\left(-\frac{iE_{n\mathbf{k}}t}{\hbar}\right) \quad (2.116)$$

となる。すなわち、時間とともに展開係数の位相のみが、各々のプロッホ関数の固有エネルギーによって決まる時間スケールで変化する。

時刻  $t = 0$  において状態  $(n_0, \mathbf{k}_0)$  にいる電子の時間発展を考える。すなわち、初期条件を  $B_{n\mathbf{k}}(0) = \delta_{n_0, n} \delta_{\mathbf{k}_0, \mathbf{k}}$  として、式 (2.115) を解く。ここで、散乱が弱いと仮定し、遷移中に  $B_{n_0\mathbf{k}_0}(t)$  の大きさがほとんど減少しないとして、 $B_{n_0\mathbf{k}_0}(t)$  の時間発展を式 (2.116) を用いて近似する。

$$B_{n_0\mathbf{k}_0}(t) \approx B_{n_0\mathbf{k}_0}(0) \exp\left(-\frac{iE_{n_0\mathbf{k}_0}t}{\hbar}\right) \quad (2.117)$$

仮定より、すべての  $(n, \mathbf{k}) \neq (n_0, \mathbf{k}_0)$  に対して、 $|B_{n\mathbf{k}}| \ll |B_{n_0\mathbf{k}_0}|$  である。したがって、式 (2.115) は、その総和において  $(n_0, \mathbf{k}_0)$  以外の項を無視すると、

$$\frac{\partial B_{n'\mathbf{k}'}(t)}{\partial t} \approx \frac{1}{i\hbar} \langle n'\mathbf{k}' | U | n_0\mathbf{k}_0 \rangle \exp\left(-\frac{iE_{n_0\mathbf{k}_0}t}{\hbar}\right) + \frac{1}{i\hbar} E_{n'\mathbf{k}'} B_{n'\mathbf{k}'}(t) \quad (2.118)$$

と近似できる。この式に、式 (2.112) を代入し整理すると、

$$\frac{\partial C_{n'\mathbf{k}'}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \langle n'\mathbf{k}' | U | n_0\mathbf{k}_0 \rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_{n'\mathbf{k}'} - E_{n_0\mathbf{k}_0})t\right] \quad (2.119)$$

となる。ここで、散乱ポテンシャル  $U(\mathbf{r}, t)$  の時間依存性を、 $U(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}$  と表す。これを式 (2.119) に代入して微分方程式を解くと、

$$\begin{aligned} C_{n'\mathbf{k}'}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \langle n'\mathbf{k}' | U(\mathbf{r}, \omega) | n_0\mathbf{k}_0 \rangle \int_0^t dt' \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_{n'\mathbf{k}'} - E_{n_0\mathbf{k}_0} - \hbar\omega)t'\right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle n'\mathbf{k}' | U(\mathbf{r}, \omega) | n_0\mathbf{k}_0 \rangle e^{i\Lambda t/2} \text{sinc}(\Lambda t/2) t \end{aligned} \quad (2.120)$$

となる。ここで、 $\Lambda = [E_{n'\mathbf{k}'} - E_{n_0\mathbf{k}_0} - \hbar\omega] / \hbar$  とおいた。

時刻  $t$  に電子を状態  $(n', \mathbf{k}')$  に見いだす確率は、 $|C_{n'\mathbf{k}'}(t)|^2$  であるため、単位時間あたりに電子が初期状態  $(n_0, \mathbf{k}_0)$  から状態  $(n', \mathbf{k}')$  に遷移する割合は、

$$S_{n_0, n'}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}') = \frac{|C_{n'\mathbf{k}'}(t)|^2}{t} = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n'\mathbf{k}' | U(\mathbf{r}, \omega) | n_0\mathbf{k}_0 \rangle|^2 \text{sinc}^2(\Lambda t/2) t \quad (2.121)$$

である。 $t \gg 1/\Lambda$  となる程度に十分に時間が経過した場合には、 $\text{sinc}^2(\Lambda t/2) t \rightarrow 2\pi\delta(\Lambda)$  と近似できる。したがって、散乱が弱いという仮定のもと、式 (2.121) は、

$$S_{n_0, n'}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n'\mathbf{k}' | U(\mathbf{r}, \omega) | n_0\mathbf{k}_0 \rangle|^2 \delta(E_{n'\mathbf{k}'} - E_{n_0\mathbf{k}_0} - \hbar\omega) \quad (2.122)$$

となる。この式はフェルミの黄金則として知られている。

### 2.6.2 半古典電子輸送

式 (2.122) より、電子が始状態  $(n_0, \mathbf{k}_0)$  から終状態  $(n', \mathbf{k}')$  へ単位時間あたりに遷移する割合は、ディラックのデルタ関数と行列要素  $|\langle n'\mathbf{k}' | U(\mathbf{r}, \omega) | n_0\mathbf{k}_0 \rangle|^2$  によって決まることがわかる。フェルミの黄金則は、具体的な遷移確率の計算方法を提供するだけでなく、散乱によって引き起こされる電子状態間の遷移にいくつかの制約を与える。

式 (2.122) の  $\delta(E_{n'k'} - E_{n_0k_0} - \hbar\omega)$  によって, 始状態のエネルギー  $E_{n_0k_0}$  に, 散乱ポテンシャルの調和振動的な時間依存性に由来するエネルギー  $\hbar\omega$  を加えたエネルギーを終状態とする場合にのみ, 遷移確率が非ゼロとなる. このエネルギーに関する制約は, フェルミの黄金則の導出における長時間極限から生じるため, 散乱強度が弱い, すなわち, 散乱確率が低い場合に正当化される. つまり, いくつかの連続した散乱を受ける電子について, 散乱間の平均的な時間間隔が比較的長い場合, デルタ関数を用いたエネルギーの制約が正当化される. 具体的には,  $T$  を散乱間の平均的な時間間隔とすると,  $\Delta E = 2\pi\hbar/T$  がエネルギー軸上で無視できるほど,  $T$  は十分に長くなければならない. 例えば,  $|\Delta E| < 1 \text{ meV}$  を得たい場合,  $T$  はおよそ 4 ps よりも大きい必要がある. 明らかに高散乱領域では, このエネルギー保存に至る近似は厳密には成り立たない. この高い散乱確率によるエネルギーの不確定性は, 衝突広がり (Collisional Broadening) として知られているが, 半古典的なキャリア輸送の取り扱いにおいてはほとんど無視されている. ホットキャリア輸送において衝突広がりが果たす役割に関する研究が報告されている [24].

つぎに, 式 (2.122) の行列要素を, 2.4.1 節と同じ手順で,

$$\langle n'k' | U(r, \omega) | n_0k_0 \rangle = \sum_G U_{(k'-G)-k_0}^{(\omega)} \langle u_{n', k'-G} | u_{n_0 k_0} \rangle \quad (2.123)$$

と変形する. この式より, 電子が始状態  $(n_0, k_0)$  から終状態  $(n', k')$  へ遷移するには, フーリエ係数  $U_{(k'-G)-k_0}^{(\omega)}$  と, ブロッホ関数の周期関数部分の重なり積分  $\langle u_{n'k'-G} | u_{n_0 k_0} \rangle$  が非ゼロである必要があることがわかる. このうち,  $G = 0$  に由来する散乱過程はノーマル過程,  $G \neq 0$  に由来する散乱過程はウムクラップ過程と呼ばれる. 例えば, バルク Si における谷内遷移はノーマル過程が支配的であり, 谷間遷移はウムクラップ過程が支配的であると理解できる [25].

フェルミの黄金則は, 式 (2.110) では記述できない実空間上で急峻に変動する散乱ポテンシャルの影響を, 輸送モデルに含めることを可能にする. 具体的には, 散乱確率が低い場合, 実空間上でゆるやかに変動する外場下における粒子の運動 (自由走行) の持続時間は長くなる. 一方, 散乱ポテンシャルの影響は, 自由走行の時間スケールから見ると瞬時に発生する散乱過程としてモデル化できる. 結果として, 散乱は電子の実空間上での位置を変更せず, 波数ベクトルおよびバンド指数を瞬時に変化させる. したがって, 有限の持続時間をもつ自由走行と瞬時の衝突とが交互に繰り返されるとして, 電子の輸送現象は半古典的に記述される [26].

この半古典輸送モデルでは, ある散乱とそれ以前に起こった他の散乱とに由来する波動関数の干渉効果は無視される. 位相緩和はフォノン散乱などの非弾性散乱によって生じるため, 室温では量子干渉の効果を観測することは難しい. 一方, ラフネス散乱や不純物散乱などの弾性散乱では位相緩和が起こらないため, フォノン数密度が小さくなる低温下では量子干渉の効果が観測される. このような状況では, 電子の輸送現象を半古典的に記述することはできない.

### 2.6.3 散乱確率

状態  $(n_0, k_0)$  の量子緩和時間  $\tau_{n_0 k_0}^q$  は,

$$\frac{1}{\tau_{n_0 k_0}^q} = \sum_{n k} S_{n_0, n}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) \quad (2.124)$$

と表せる。ここで、終状態  $(n, \mathbf{k})$  が空いていることを仮定した。 $\tau_{n_0 \mathbf{k}_0}^q$  は单一粒子寿命とも呼ばれる。また、量子緩和時間の逆数  $1/\tau_{n_0 \mathbf{k}_0}^q$  は散乱確率と呼ばれる。

ノーマル過程のみを考えると、式(2.122)は、

$$S_{n_0, n}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_0}|^2 \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{n_0 \mathbf{k}_0} - \hbar\omega) \quad (2.125)$$

となる。ここで、散乱ポテンシャルの上付き添字  $\omega$  を省略した。また、ブロッホ関数の周期関数部分に関する重なり積分を、 $\langle u_{n\mathbf{k}} | u_{n_0 \mathbf{k}_0} \rangle \approx 1$  と近似した。この近似がよく施されるが、無視された重なり積分の効果は散乱ポテンシャル部分に実効的に含められると考えられる[27]。式(2.125)を式(2.124)に代入すると、

$$\frac{1}{\tau_{n_0 \mathbf{k}_0}^q} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n\mathbf{k}} |U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_0}|^2 \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{n_0 \mathbf{k}_0} - \hbar\omega) \quad (2.126)$$

となる。ここで、 $\Omega \rightarrow \infty$  とすると、上式の  $\mathbf{k}$  に関する和は積分に変換される(2.2.3節参照)。一方、 $U_{\mathbf{q}}$  はフーリエ係数でありフーリエ変換  $U(\mathbf{q})$  とは、 $\Omega \rightarrow \infty$  のもと、

$$U_{\mathbf{q}} = \frac{U(\mathbf{q})}{\Omega} \quad (2.127)$$

なる関係がある。この式を、式(2.126)に代入すると、

$$\frac{1}{\tau_{n_0 \mathbf{k}_0}^q} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\Omega} \sum_{n\mathbf{k}} \mathcal{S}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{n_0 \mathbf{k}_0} - \hbar\omega) \quad (2.128)$$

となる。ここで、パワースペクトル密度を  $\mathcal{S}(\mathbf{q}) = |U(\mathbf{q})|^2/\Omega$  とおいた。さらに計算を進めるには、分散関係  $E_{n\mathbf{k}}$  の具体的な表式が必要である。

特別な場合として、 $\mathcal{S}(\mathbf{q}) \approx C$  と定数に近似できる場合を考える。このとき、式(2.128)は、

$$\frac{1}{\tau_{n_0 \mathbf{k}_0}^q} = \frac{2\pi C}{\hbar} \frac{1}{\Omega} \sum_{n\mathbf{k}} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{n_0 \mathbf{k}_0} - \hbar\omega) = \frac{2\pi C}{\hbar} D(E_{n_0 \mathbf{k}_0} + \hbar\omega) \quad (2.129)$$

となる。ここで、 $D(E_{n_0 \mathbf{k}_0} + \hbar\omega)$  は終状態のエネルギーにおける状態密度を表す。2.2.3節より、状態密度の具体的な表式はバンド構造に依存する。

## 2.7 電子輸送モデル

2.6.2節では、有限の持続時間をもつ自由走行とフェルミの黄金則に基づく瞬時の散乱とが交互に繰り返されるという半古典的な電子輸送モデルについて、その成立条件も含めて記した。従うと、2.7.1節に記載のとおり、半古典的な電子輸送現象の支配方程式であるボルツマン輸送方程式を自然に理解できる。しかしながら、ボルツマン輸送方程式をシュレディンガー方程式などに基づくミクロな理論から厳密に導くことはいまだ達成されていない[23]。ミクロな理論が記述する運動は時間反転に対して対称である一方、L.E. Boltzmann が  $H$  定理を証明したように、ボルツマン輸送方程式は不可逆な現象を記述できる。この両者の質的な差異に関する問題を一般的に解決する

方法はまだ見つかっていない。それにもかかわらず、ボルツマン輸送方程式は、半導体デバイスのキャリア輸送解析において直感的かつ多くの情報を提供し、今日のデバイスシミュレーションの基礎となっている。一方、電子の可干渉性が重要な役割を果たす場合や、外場による空間的不均一が大きい場合には、ボルツマン輸送方程式を用いることはできないことに注意が必要である。この場合には、いわゆる量子輸送シミュレーションを用いる必要がある。

2.7.1 節では、位相空間における連続の式から、ボルツマン輸送方程式を直感的に導入する。2.7.2 節では、モンテカルロシミュレーションについて概要を記す。モンテカルロシミュレーションはボルツマン輸送方程式の厳密解を提供する強力な手法である。最後に、2.7.3 節では、量子輸送シミュレーションについて概説する。

### 2.7.1 ボルツマン輸送方程式

位置に関する3次元と波数に関する3次元とを合わせた、6次元の位相空間を考える。電子は波束として、その位置と波数とが明確に定義されていると仮定する。このとき、位相空間上で  $\mathbf{r}$  から  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{k}$  から  $\mathbf{k} + dk$  の範囲で指定される微小体積に含まれる電子のうち、バンド指数  $n$  のバンドから構成される波束で表される電子数を  $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)d\mathbf{r}dk$  と表す。

電子は位相空間上を速度  $\mathbf{v} = (\dot{\mathbf{r}}, \dot{\mathbf{k}})$  で移動すると考えられる。ここで、 $\dot{\mathbf{r}}$  および  $\dot{\mathbf{k}}$  は式 (2.110) で与えられる。自由走行時にバンド指数が変化しないと仮定すると、位相空間上で電子が突然消えたり現れたりしないため、つぎの連続の方程式が成り立つ [28]。

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \nabla \cdot (f_n \mathbf{v}) = 0 \quad (2.130)$$

ここで、 $\nabla = (\nabla_{\mathbf{r}}, \nabla_{\mathbf{k}})$  である。左辺第2項は、 $\nabla f_n \cdot \mathbf{v} + f_n \nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla f_n \cdot \mathbf{v}$  となる。なぜなら、式 (2.110) より、 $\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = 0$  が成り立つためである。したがって、式 (2.130) は、

$$\frac{\partial f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + \nabla_{\mathbf{r}} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = 0 \quad (2.131)$$

となる。この式は、位相空間上のある閉領域内に含まれる電子数は、その境界から出入りする電子数によって変化することを表す。

この変化に加えて、散乱による電子数変化を合わせて考慮する。散乱は瞬時に発生するため、電子の実空間上の位置を変化させないと考えられる。したがって、 $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{k}$  を中心とした位相空間要素からその外部への単位時間あたりの電子流出量  $S_n^{\text{out}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  は、

$$S_n^{\text{out}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \sum_{n' \mathbf{k}'} S_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [1 - f_{n'}(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)] \quad (2.132)$$

と表せる。ここで、 $S_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  は始状態  $(n, \mathbf{k})$  から終状態  $(n', \mathbf{k}')$  への遷移確率で、フェルミの黄金則から計算される。同様にして、 $\mathbf{r}$  と  $\mathbf{k}$  を中心とした位相空間要素へのその外部から単位時間あたりの電子流入量  $S_n^{\text{in}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  は、

$$S_n^{\text{in}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = [1 - f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] \sum_{n' \mathbf{k}'} S_{n', n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{n'}(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) \quad (2.133)$$

と表せる。連続の方程式に加えて、散乱による電子流出と電子流入を考慮すると、式 (2.131) は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{r}} E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) + \nabla_{\mathbf{r}} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \\ = S_n^{\text{in}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - S_n^{\text{out}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \end{aligned} \quad (2.134)$$

と書き換えられる。この式はボルツマン輸送方程式として知られている。

ボルツマン輸送方程式の近似解は、いわゆるモーメント法を用いて得ることができる。これは、ボルツマン輸送方程式から適切な積分や  $k$  についての平均をとることで得られるバランス方程式を解くことで、ボルツマン輸送方程式の解を近似的に得る手法である。したがって、この手法では、分布関数  $f$  について波数方向の情報は得られない。このバランス方程式は TCAD シミュレータで広く用いられている。バランス方程式の詳細な議論と導出は文献 [29, 30] に記載されている。

本論文では、第 5 章において、緩和時間近似を施したボルツマン輸送方程式を用いて、Si ナノシート構造における電子移動度の結晶方位依存性をシミュレーションした結果を示す。

### 2.7.2 モンテカルロシミュレーション

ボルツマン輸送方程式は、最大 7 つの独立変数 (実空間座標、波数空間座標および時間) に依存する未知の分布関数  $f$  に関する積分微分方程式である。散乱項における  $(1 - f)$  の因子によって非線形でもある。シミュレーションするデバイス構造の対称性を利用して変数の数を減らすことは可能であるが、それでも標準的な数値計算手法を用いて厳密に解くことは困難である [31]。

モンテカルロ法は、分布関数  $f$  に関する事前の仮定なしに、ボルツマン輸送方程式を厳密に解く強力なシミュレーション手法である [32, 33]。この手法は乱数に基づく統計的な手法であり、サンプル粒子の実空間および波数空間における軌道のシミュレーションに基づいている。

モンテカルロ法は、電子輸送の分野では 1966 年に T. Kurosawa によって最初に導入された [34]。その後、W. Fawcett らによって、ボルツマン輸送方程式の厳密解と等価であることが示された [35]。1970 年代後半以降、キャリア輸送の研究に広く利用されてきた [25]。これまで、様々な数値的および物理的な改良がモンテカルロデバイスシミュレーションに導入されてきた。例えば、フルバンド構造の考慮 [36]、ポアソン方程式とのカップリングにおける効率的な数値計算手法 [37]、ホットエレクトロン効果 (インパクトイオン化、ゲート絶縁膜への電子注入など) のシミュレーション [38]、あるいはトラップ準位への電子捕獲放出過程を考慮したシミュレーション [39] などが挙げられる。

モンテカルロシミュレーションでは、ボルツマン輸送方程式の場合と同様に、位置と波数とが明確に定義された電子の軌道を、自由走行と瞬時の散乱とが繰り返すという半古典的な枠組みのもとシミュレーションする。モンテカルロシミュレーションのアルゴリズムの包括的な解説は文献 [23, 25–27, 29, 32, 33] に記載されている。このアルゴリズムの概要を簡単に理解するために、ボルツマン輸送方程式を位相空間上における電子の軌道に沿って積分した式を考えるとよい。これは Chamber の式として知られている [40]。簡単のため、空間的に一様な系を仮定すると、

$$f_n(\mathbf{k}, t) = \int_0^{\infty} ds \exp \left[ - \int_{-s}^0 \frac{ds'}{\tau_{n\mathbf{k}(t+s')}} \right] S_n^{\text{in}}(\mathbf{k}(t-s), t-s) \quad (2.135)$$

となる。ここで、 $k(t) = k - eFt/\hbar$  であり、 $\tau_{nk}^q$  は 2.6.3 節で導入した量子緩和時間である。式 (2.135) は、つぎのように解釈できる。時刻  $t$ 、波数  $k$  における分布関数  $f_n(k, t)$  を求めるためには、過去のすべての時刻  $t - s$  ( $s > 0$ ) において、その時刻に状態  $(n, k(t-s))$  に流入してきた電子のうち、その後時刻  $t$  まで散乱されずに時間発展した電子を数えればよい、ということである。この一連の過程をシミュレーションするため、モンテカルロシミュレーションは以下の手順に従う。

1. 系の初期条件を反映して、位相空間上における電子の初期位置を決める。
2. すべての散乱過程に関して、量子緩和時間をそれぞれ計算する。そして、すべての量子緩和時間の逆数の総和を計算し、これを全散乱確率  $W_n(k)$  とする。ここで、 $n$  はバンド指数である。
3. 全散乱確率に基づいて、電子の自由走行時間  $t_{FF}$  を計算する。これを確率的に行うため、0 から 1 の一様乱数  $r$  を用いて、

$$r = 1 - \exp \left[ - \int_0^{t_{FF}} W_n(k(t')) dt' \right] \quad (2.136)$$

とする。これは、一般に  $t_{FF}$  について解析的に解くことはできず、数値的に評価するにしても指数部の数値積分が煩雑である。そこで、H.D. Rees によって導入された自己散乱アルゴリズム [41] がよく用いられる。

4. 自由走行時間  $t_{FF}$  だけ電子の運動方程式 [式 (2.110)] を解き、位相空間上の位置を更新する。
5. 更新後の位相空間上での位置から、遷移確率に基づき、散乱後の終状態を確率的に決定する。
6. 以下同様に、自由走行と散乱とを繰り返しシミュレーションする。

本論文では、第 5 章において、Krieger-Iafrate 方程式とマルチサブバンドモンテカルロ法とを組み合わせることで、自由走行時サブバンド間遷移が輸送特性に与える影響について解析した結果を述べる。

### 2.7.3 量子輸送シミュレーション

着目している系あるいは領域のサイズが、電子が可干渉性を維持しながら移動する距離と同程度である場合、電子の運動はシュレディンガー方程式によって記述される。このような状況では、2.6.2 節で記した、有限の持続時間をもつ自由走行とフェルミの黄金則に基づく瞬時の散乱とが交互に繰り返されるという半古典的な輸送モデルを適用することはできない。

半古典的な枠組みを超え、量子論的な効果を取り入れた輸送計算手法として、非平衡グリーン関数 (NEGF: Non-Equilibrium Green Function) 法が知られている。NEGF 法の先駆的な研究は、1960 年代初頭の L.V. Keldysh [42] や L.P. Kadanoff と G. Baym [43] にまでさかのぼることができる。その後、メソスコピック系における電子輸送現象への適用が、S. Datta [44] によって行われ、現代の微細電子デバイスの解析に広く利用されるようになった。NEGF 法は、非平衡多体系において可観測量を計算するための一般的な枠組みを提供する。例えば、強結合近似モデル [45] や擬ポテンシャル法 [46] など、任意の電子状態モデルに基づく定式化が可能であり、さらに様々な散乱モデルを幅広く扱うことができる。これは、自己エネルギーを用いた散乱の自然な取り扱いによるもの

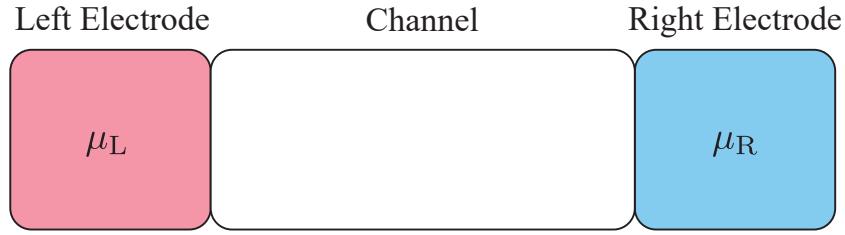


図 2.2: NEGF 法に基づき透過関数をシミュレーションする系の模式図 .  $\mu_L$  および  $\mu_R$  は左電極および右電極の化学ポテンシャルを表す .

であり , NEGF 法の利点の一つである . NEGF 法に関する包括的な解説は文献 [44, 47–49] に記載されている .

本論文では , チャネル内において位相緩和過程をともなわない , 弹道的な NEGF 法に基づくシミュレーションを行った . この手法では , 計算したい系をチャネル領域と電極領域とに分割する (図 2.2 参照) . 電極はつねに熱平衡状態であると仮定され , 電極間の化学ポテンシャル差は外部電源から印加された電圧と等しいと考える . したがって , 外部電圧に由来し , 電子は化学ポテンシャルが高い電極からチャネル領域に流入し , 化学ポテンシャルが低い電極へと流出する [47] . このような過程はランダウラー理論 [50] と密接に関連している . 実際 , ランダウラー理論によると , チャネルを流れる電流  $I$  は ,

$$I = \frac{n_{\text{sp}} e}{2\pi\hbar} \int T(E) [f_L(E) - f_R(E)] \, dE \quad (2.137)$$

と与えられる . ここで ,  $f_\alpha(E) = (e^{\beta(E-\mu_\alpha)} + 1)^{-1}$  ( $\alpha = L, R$ ) であり ,  $\mu_\alpha$  は  $\alpha$  電極領域の化学ポテンシャルである . また ,  $E$  は電子のエネルギー ,  $T(E)$  は透過関数である . この透過関数  $T(E)$  が , 弹道的な NEGF 法における主要な計算対象の一つである .

NEGF 法に基づく量子輸送シミュレーションでは , つぎの式で与えられる遅延グリーン関数  $G(E)$  が中心的な役割を果たす .

$$G(E) = [E - H - \Sigma(E)]^{-1} \quad (2.138)$$

ここで ,  $H$  はチャネル領域のハミルトニアンを表す .  $\Sigma(E)$  は遅延自己エネルギーであり , チャネルが電極と接続していること , および電子が散乱体と相互作用していることを表している . 数値計算では , 適当な基底系を導入し  $H$  および  $\Sigma(E)$  を行列表示することで , 逆行列演算から  $G(E)$  を計算する . 用いる基底系やデバイスの幾何構造に応じてこれらの行列サイズは異なるが , 一般に行列サイズは大きくなるため , 逆行列演算の計算量は大きくなる . そのため , 再帰グリーン関数法 [45, 51] や等価モデル [52, 53] などの高速計算手法が用いられる . 本論文で用いた NEGF 法に基づく透過関数の具体的な計算方法は , 3.4 節に記す .

第 3 章では , 本研究で新規に開発した高速計算手法である 1 次元等価モデルを説明する . 1 次元等価モデルでは , 波動関数を用いることなくバンド構造の情報のみから , 1 次元系の等価モデルを構築できる . 第 4 章では , 単一モードナノシートにおいてラフネス散乱で決まる平均自由行程を , 透過関数  $T(E)$  から抽出するために , 本研究で新規に開発した手法を述べる .

## 2.8 まとめ

本章では、電子状態と輸送理論について概説した。まず、格子および逆格子に基づく結晶の記述方法およびブロッホ状態の一般的な性質を述べ、その後、強結合近似モデルおよび有効質量近似モデルについて説明した。つぎに、加速定理、群速度といった電子の動力学に関する概念を述べた。つづいて、散乱過程のフェルミの黄金則に基づく記述方法を述べた。最後に、ボルツマン輸送方程式、モンテカルロシミュレーション、および量子輸送シミュレーションについて概説した。

## 参考文献

- [1] G. Burns and J.L. Birman, *Introduction to group theory with applications*, Academic Press (1977).
- [2] S. Datta, *Quantum Phenomena*, Addison-Wesley (1989).
- [3] 清水 明, *統計力学の基礎*, 東京大学出版会 (2024).
- [4] P. Hohenberg and W. Kohn, “Inhomogeneous Electron Gas,” *Phys. Rev.*, **136**, B864 (1964).
- [5] W. Kohn and L.J. Sham, “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects,” *Phys. Rev.*, **140**, A1133 (1965).
- [6] J.C. Slater and G.F. Koster, “Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem,” *Phys. Rev.*, **94**, 1498 (1954).
- [7] M. Luisier, A. Schenk, W. Fichtner, and G. Klimeck, “Atomistic simulation of nanowires in the  $sp^3d^5s^*$  tight-binding formalism: From boundary conditions to strain calculations,” *Phys. Rev. B*, **74**, 205323 (2006).
- [8] D. Vasileska, S.M. Goodnick, and G. Klimeck, *Computational Electronics: Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation*, CRC Press (2010).
- [9] 三好 旦六, 小川 真人, 土屋 英昭, *ナノエレクトロニクスの基礎*, 培風館 (2007).
- [10] W.A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*, Dover Publications (2012).
- [11] J.J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Cambridge University Press (2020).
- [12] D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators*, Cambridge University Press (2018).
- [13] P.-O. Löwdin, “On the Non-Orthogonality Problem Connected with the Use of Atomic Wave Functions in the Theory of Molecules and Crystals,” *J. Chem. Phys.*, **18**, 365 (1950).
- [14] P. Vogl, H.P. Hjalmarson, and J.D. Dow, “A Semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors,” *J. Phys. Chem. Solids*, **44**, 365 (1983).
- [15] T.B. Boykin, G. Klimeck, and F. Oyafuso, “Valence band effective-mass expressions in

the  $sp^3d^5s^*$  empirical tight-binding model applied to a Si and Ge parametrization," Phys. Rev. B, **69**, 115201 (2004).

[16] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, "Empirical  $spds^*$  tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters," Phys. Rev. B, **57**, 6493 (1998).

[17] M. Cardona, "Vibrational Spectra of Hydrogen in Silicon and Germanium," Phys. Status Solidi B, **118**, 463 (1983).

[18] S. Lee, F. Oyafuso, P. von Allmen, and G. Klimeck, "Boundary conditions for the electronic structure of finite-extent embedded semiconductor nanostructures," Phys. Rev. B, **69**, 045316 (2004).

[19] J.M. Luttinger and W. Kohn, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields," Phys. Rev., **97**, 869 (1955).

[20] Y. Taur and T.H. Ning, Fundamentals of Modern VLSI Devices, Cambridge University Press (2021).

[21] C. Kittel, Quantum Theory of Solids, Wiley (1987).

[22] J.B. Krieger and G.J. Iafrate, "Time evolution of Bloch electrons in a homogeneous electric field," Phys. Rev. B, **33**, 5494 (1986).

[23] M.V. Fischetti and W.G. Vandenberghe, Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures, Springer (2016).

[24] J. Bude, K. Hess, and G.J. Iafrate, "Impact ionization in semiconductors: Effects of high electric fields and high scattering rates," Phys. Rev. B, **45**, 10958 (1992).

[25] C. Jacoboni and L. Reggiani, "The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials," Rev. Mod. Phys., **55**, 645 (1983).

[26] D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, Nanoscale MOS Transistors: Semi-Classical Transport and Applications, Cambridge University Press (2011).

[27] C. Jacoboni, Theory of Electron Transport in Semiconductors, Springer (2010).

[28] C. Kittel, Elementary Statistical Physics, Wiley (1967).

[29] M. Lundstrom, Fundamentals of Carrier Transport, Cambridge University Press (2009).

[30] C. Jungemann and B. Meinerzhagen, Hierarchical Device Simulation: The Monte-Carlo Perspective, Springer (2003).

[31] K. Banoo, M. Lundstrom, and R.K. Smith, "Direct solution of the Boltzmann transport equation in nanoscale Si devices," 2000 International Conference on Simulation Semiconductor Processes and Devices, 50 (2000).

[32] R.W. Hockney and J.W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles, Routledge (1989).

[33] K. Tomizawa, Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices, Artech House

(1993).

- [34] T. Kurosamwa, "Monte Carlo calculation of hot electron problems," International Conference on the Physics of Semiconductors, 424 (1966).
- [35] A.D. Boardman, W. Fawcett, and H.D. Rees, "Monte Carlo calculation of the velocity-field relationship for gallium arsenide," Solid State Commun., **6**, 305 (1968).
- [36] M.V. Fischetti and S.E. Laux, "Monte carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects," Phys. Rev. B, **38**, 9721 (1988).
- [37] F. Venturi, R.K. Smith, E.C. Sangiorgi, M.R. Pinto, and B. Ricco, "A general purpose device simulator coupling Poisson and Monte Carlo transport with applications to deep submicron MOSFETs," IEEE Trans. Comput. Aided Des. Integr. Circuits Syst., **8**, 360 (1989).
- [38] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, "A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact-ionization model," J. Appl. Phys., **75**, 297 (1994).
- [39] F. Hashimoto, T. Suzuki, H. Minari, N. Nakazaki, J. Komachi, and N. Sano, "Self-Consistent Monte Carlo Device Simulation of Capture-Excitation Processes of Carriers," 2023 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), 361 (2023).
- [40] R.G. Chambers, "The Kinetic Formulation of Conduction Problems," Proc. Phys. Soc. London, Sect. A, **65**, 458 (1952).
- [41] H.D. Rees, "Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state," J. Phys. Chem. Solids, **30**, 643 (1969).
- [42] L.V. Keldysh, "Diagram technique for nonequilibrium processes," Zh. Eksp. Teor. Fiz., **47**, 1515 (1964).
- [43] L.P. Kadanoff and G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, Benjamin (1962).
- [44] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press (1995).
- [45] R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, and D. Jovanovic, "Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices," J. Appl. Phys., **81**, 7845 (1997).
- [46] H.J. Choi and J. Ihm, "Ab initio pseudopotential method for the calculation of conductance in quantum wires," Phys. Rev. B, **59**, 2267 (1999).
- [47] S. Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor, Cambridge University Press (2005).
- [48] H. Haug and A.-P. Jauho, Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors, Springer (2008).
- [49] G. Stefanucci and R. van Leeuwen, Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Sys-

tems: A Modern Introduction, Cambridge University Press (2013).

[50] R. Landauer, “Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction,” *IBM J. Res. Dev.*, **1**, 223 (1957).

[51] A. Svizhenko, M.P. Anantram, T.R. Govindan, B. Biegel, and R. Venugopal, “Two-dimensional quantum mechanical modeling of nanotransistors,” *J. Appl. Phys.*, **91**, 2343 (2002).

[52] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Equivalent transport models in atomistic quantum wires,” *Phys. Rev. B*, **85**, 035317 (2012).

[53] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Scattering basis representation in ballistic transport simulations of nanowire transistors,” *Math. Comput. Modell.*, **58**, 312 (2013).



## 第3章

# 半導体1次元構造の1次元等価モデル

### 3.1 はじめに

間断なく微細化が進められてきたトランジスタは、その寸法がナノメートルオーダーに達している。このような極微細なスケールのデバイスでは、量子力学的効果や原子論的効果がデバイス特性に表れる。したがって、これらの効果を取り入れたデバイスシミュレータの開発が、次世代トランジスタの性能予測のために必要である。

非平衡グリーン関数 (NEGF: Non-Equilibrium Green Function) 法は、ナノスケールデバイスの量子輸送特性を解析するためのもっとも信頼できるシミュレーション手法の一つである [1-5]。近年、第一原理に基づく NEGF シミュレーションの報告 [6-9] が増えている。しかし、これらのシミュレータを次世代デバイスの開発に利用するためには、多くの課題が残されている。とくに、多くの計算資源を要する点が課題である。NEGF シミュレーションでは、「チャネル領域を記述するハミルトニアン行列」と同じサイズの行列に対して逆行列演算を実行する必要がある。ハミルトニアン行列サイズは、電子状態モデルやデバイス幾何構造によって異なるが、一般に大きくなる。逆行列演算の計算量は行列サイズの約 3 乗に比例して増加するため、これが NEGF シミュレーション全体のボトルネックとなる。

とくに、密度汎関数理論 (DFT: Density Functional Theory) などの第一原理的な電子状態モデルでは、電子状態計算の精度は高いものの、価電子帯下部から伝導帯上部までの広いエネルギー範囲の状態を含むため、ハミルトニアン行列サイズが大きくなる。通常、デバイスの輸送特性を担うのはバンドギャップ付近の電子のみであり、DFT モデルが含む広いエネルギー範囲の状態は必要ない。このことを利用して、広いエネルギー範囲の情報を含む電子状態モデルから、バンドギャップ付近の狭いエネルギー範囲の情報を抽出することで、ハミルトニアン行列サイズの小さな等価モデルを構築する手法が提案されている [10]。

等価モデルは、はじめに Si ナノワイヤ FET のシミュレーションに応用された [10]。その後、非直交基底系への拡張 [6]、ヘテロ接合や欠陥を含むデバイスへの応用 [11]、チャネル領域と電極領域で第一原理モデルと等価モデルを使い分けるハイブリッド法 [7] などが報告されている。これらの等価モデルでは、元のハミルトニアン行列を対角化して得られる波動関数を利用して、サイズの小さなハミルトニアン行列を構築する。これに対して本研究では、波動関数を利用することなく、バ

ンド構造のみから等価モデルを構築する手法を新規に開発した [12, 13]。本章では、開発した等価モデルとその性能について議論する。

## 3.2 バンド内輸送

本節では、開発した1次元等価モデル(1DEM: One-Dimensional Equivalent Model)について述べる。3.2.1節では、1DEMの表現行列について説明する。3.2.2節では、表現行列のパラメータを決定する方法を述べる。

1DEMでは数学的に可能な最大限の自由度を利用するため、素朴にパラメータを決定すると非物理的な状態を含む可能性がある。そのため、3.2.3節では、高効率なバンド内輸送シミュレーションを目的に、非物理的な状態を除去する手順について説明する。

### 3.2.1 1次元等価モデルの表現行列

1DEMの表現行列について説明する [12]。図3.1に示すような、格子定数  $a$  の擬1次元鎖を1DEMとして考える。このとき、最近接サイト間にのみ相互作用が存在すると仮定すると、系全体のハミルトニアン行列は、

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & S^T & D & S & & & \\ & & S^T & D & S & & \\ & & & S^T & D & S & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

と表される。ここで、各サイトに  $N$  個軌道が存在すると仮定すると、 $D$  は  $N \times N$  の実対称行列であり、同一サイトに含まれる軌道間の相互作用を格納した行列と対応する。一方、 $S$  は  $N \times N$  の実行列であり、異なる最近接サイトにそれぞれ含まれる軌道間の相互作用を格納した行列に対応する。この擬1次元鎖のバンド構造は、最近接サイト間にのみ相互作用があることに注意すると、2.3節より、固有値問題、

$$[S^T e^{-ika} + D + S e^{ika}] \psi_{nk} = E_n(k) \psi_{nk} \quad (3.2)$$

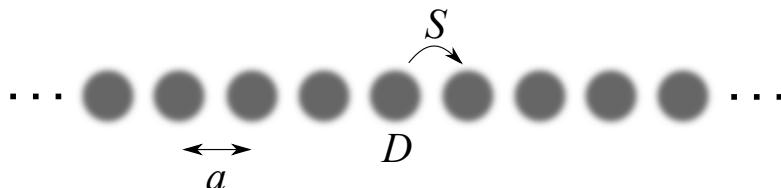


図3.1: 格子定数  $a$  の擬1次元鎖。同一サイト(黒丸)に含まれる軌道間の相互作用は行列  $D$  によって記述され、最近接サイトにそれぞれ含まれる軌道間の相互作用は行列  $S$  によって記述される。

を解くことで求められる。ここで、 $k$  は波数、 $n$  は同一波数の固有状態を区別するバンド指数である。上付きの  $T$  は行列の転置を表す。 $D$  は実対称行列であるため、直交行列  $U$  を用いて、

$$D' = U^T D U \quad (3.3)$$

と対角化できる。 $S$  についても同じ  $U$  を用いて、

$$S' = U^T S U \quad (3.4)$$

と表せる。ただし、 $S'$  は一般に対角行列ではなく通常の実行列である。式 (3.2) の左から  $U^T$  を乗じて、 $UU^T = I$  であることを用いると、

$$[U^T S^T U e^{-ika} + U^T D U + U^T S U e^{ika}] U^T \psi_{nk} = E_n(k) U^T \psi_{nk} \quad (3.5)$$

となり、式 (3.3)、式 (3.4) を用いると、

$$[S'^T e^{-ika} + D' + S' e^{ika}] \psi_{nk} = E_n(k) \psi_{nk} \quad (3.6)$$

となる。ここで、 $U^T \psi_{nk}$  をあらためて  $\psi_{nk}$  とした。以上より、式 (3.1) のようにハミルトニアン行列が、最近接サイト間でのみ相互作用が存在する形式で与えられる場合、バンド構造  $E_n(k)$  を変化させることなく  $D$  を対角表示できる。したがって、任意の擬 1 次元鎖状の系について、行列  $D$  を、

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_N \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

と  $N$  個のパラメータで表し、行列  $S$  を、

$$S = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1N} \\ s_{21} & s_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{N1} & \dots & \dots & s_{NN} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

と  $N^2$  個のパラメータで表すことができる。この  $N + N^2$  個のモデルパラメータ  $\{\theta_j\} = \{d_1, d_2, \dots, d_N, s_{11}, s_{12}, \dots, s_{NN}\}$  を適切に設定することで、任意の擬 1 次元鎖のバンド構造  $E_n(k)$  を表現できる。

一般に DFT や強結合近似モデル (TBM: Tight-Binding Model) などの原子論モデルを用いると、価電子帯深くの低いエネルギーから伝導帯上部の高いエネルギーにわたる広い範囲のバンド構造を計算できる。しかし、輸送計算に関与するのはバンドギャップ付近の電子状態のみであり、広いエネルギー範囲のバンド構造は必要ない。1DEM では  $N + N^2$  個のパラメータ  $\{\theta_j\}$  を適切に設定することで、与えられた広いエネルギー範囲にわたるバンド構造の中から、輸送に関与するバンドギャップ付近のバンド構造のみを表現する行列  $D$  と行列  $S$  を構成する。つぎの 3.2.2 節で、モデルパラメータ  $\{\theta_j\}$  を決定する方法を述べる。

### 3.2.2 モデルパラメータの決定方法

1DEM の適切なモデルパラメータは、目標とするバンド構造へのフィッティングを通して決定する。具体的には、以下で定式化するような、目標バンド構造と 1DEM のバンド構造との二乗誤差を最小化することで  $\{\theta_j\}$  を決定する。ただし、目標バンド構造  $\hat{E}_n(k)$  は、DFT や TBM、あるいは実験などによって事前に明らかにしておく必要がある。

バンド構造に関する損失関数  $L(\{\theta_j\})$  をつぎのように定義する。

$$L(\{\theta_j\}) = \frac{1}{2} \sum_n \sum_k \left[ \hat{E}_n(k) - E_n(k) \right]^2 \quad (3.9)$$

ここで、波数  $k$  とバンド指数  $n$  の総和をとる範囲は任意である。例えば、 $ka = 0 \sim \pi/4$  の範囲でバンド構造を再現したい場合には、その部分のみ評価すればよい。

式 (3.9) を効率よく最小化するには、モデルパラメータを微小変化させたときのバンド構造の微小変化  $\partial E_n(k)/\partial \theta_j$  を求める必要がある。一般に、固有値問題のパラメータ依存性は複雑な問題である。本研究では  $\partial E_n(k)/\partial \theta_j$  を求めるために、ヘルマン・ファインマンの定理 [14] を用いた。

$$\frac{\partial E_n(k)}{\partial \theta_j} = \left\langle \psi_{nk} \left| \frac{\partial H(k)}{\partial \theta_j} \right| \psi_{nk} \right\rangle \quad (3.10)$$

$\partial E_n(k)/\partial \theta_j$  の数値的な計算には TensorFlow [15] を用いた。TensorFlow は、機械学習に基づくアプリケーションを容易に開発できるよう設計された、柔軟かつ包括的なモジュール群を提供するライブラリである。このライブラリには自動微分機能が備わっており、勾配法に基づく様々な関数最小化アルゴリズムを容易に利用できる。本研究では、損失関数の最小化アルゴリズムとして適応モーメント推定 (ADAM: Adaptive Moment Estimation) [16] を採用した。ADAM は、過去の勾配情報の 1 次および 2 次のモーメントを用いて学習率を適応的に調整することで、パラメータ空間内の鞍点や局所最小値に留まることなく、大域的な最小値を効率よく探索するアルゴリズムである。

図 3.2 に、式 (3.10) の損失関数を最小化するために繰り返す 3 つの手続きを示す。最初の手順は試行ハミルトニアン  $H^0$  を用意することである。 $H^0$  は、適当に初期化されたパラメータ  $\{\theta_j^0\}$  から構成される  $D^0$  と  $S^0$  によって与えられる。つぎに、 $H^0$  を対角化することで、試行バンド構造  $E_n^0(k)$  を計算する。その後、試行バンド構造  $E_n^0(k)$  と目標バンド構造  $\hat{E}_n(k)$  との二乗誤差を計算し、損失関数  $L$  を得る。さらに、各手順ごとに微分係数  $\partial E_n(k)/\partial \theta_j$  と  $\partial L/\partial E_n(k)$  を求め、ADAM アルゴリズムを適用し、 $L$  を小さくする方向にモデルパラメータを  $\{\theta_j^0\}$  から  $\{\theta_j^1\}$  に更新する。

以上の手順を、損失関数  $L$  が十分に小さい値となるまで繰り返すことで、目標バンド構造を再現するモデルパラメータ  $\{\theta_j\}$  を決定する。

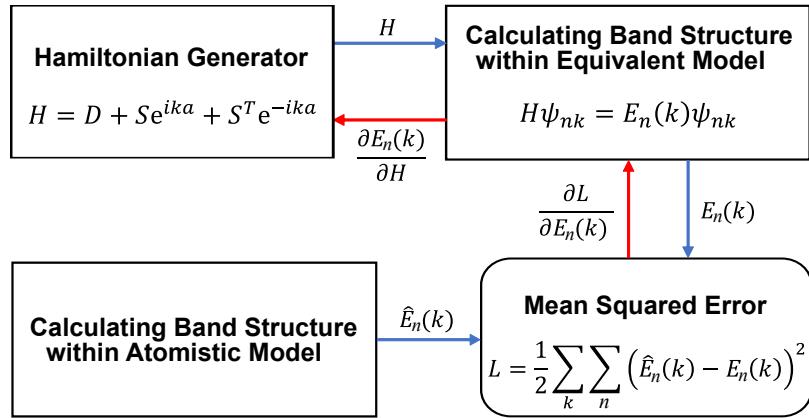


図 3.2: 損失関数  $L$  を最小化する計算の流れ . 赤線は自動微分を表す .

### 3.2.3 バンド交差・反交差

3.2.1 節で述べた 1DEM の表現行列では、バンドの交差を正確に表現できない場合がある。これは、系全体のハミルトニアンの副対角ブロック行列である  $S$  が、相互作用しないはずのバンド間の行列要素に対して有限の値をとる可能性があるためである。したがって、3.2.1 節で述べた 1DEM の表現行列では、本来交差すべきバンド構造が反交差してしまう可能性がある。

このような問題は、元のハミルトニアン行列からブロック状態を直接抽出する行列次元削減法 [10, 17–23] では起こらない。しかし、本研究で開発した 1DEM では、バンド構造の情報のみからハミルトニアン行列を構築するため、3.2.1 節で述べた行列  $D$  と  $S$  に物理的な制限をほとんど設けていない。その結果モデルパラメータの自由度が大きく、素朴にパラメータの最適化を実行すると、非物理的な状態を含む可能性がある。

本研究では、1DEM がこのような非物理的な状態を含まないように、モード分割法およびバンド折返し・位相シフトによる方法を開発した [12]。まず、 $k \neq 0$  におけるバンド交差は、 $S$  の一部の要素を事前にゼロに固定することで表現できる。この方法をモード分割法と呼び、詳細は後述する。一方、モード分割法を用いても、 $k = 0$  におけるバンドの交差を表現することはできない。 $S$  の値を実数に制限したまま  $k = 0$  におけるバンド交差を表現するため、バンドの折返しと位相シフトを用いた解決方法を導入した。これらの手法は、第一に非物理的なバンド構造を取り除くことを目的として導入されたものであるが、後述するように、結果的に計算量のさらなる削減につながる。

#### モード分割法

$k \neq 0$  におけるバンド交差を表現する手法であるモード分割法について述べる。まず、バンド構造をいくつかのグループに分ける。このとき、各グループに属するバンドは、他のグループに属するいかなるバンドとも相互作用（反交差）しないようにする。

グループが全部で  $M$  個ある場合,  $j$  番目のグループに含まれるバンドの本数を  $m_j$  とすると, 1DEM のハミルトニアンの大きさ  $N$  はつぎの式で与えられる.

$$N = \sum_{j=1}^M m_j \quad (3.11)$$

異なるグループは互いに相互作用していないので, 系全体のハミルトニアンの対角ブロック行列  $D$  は,

$$D = \begin{bmatrix} D^{(1)} & & & \\ & D^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & D^{(M)} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

と与えられる. また, 副対角行列  $S$  は,

$$S = \begin{bmatrix} S^{(1)} & & & \\ & S^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & S^{(M)} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

と与えられる. ここで,  $D^{(j)}$  は大きさが  $m_j \times m_j$  の実対角行列,  $S^{(j)}$  は大きさが  $m_j \times m_j$  の実行列である. それぞれのグループのバンド構造は,

$$[S^{(j)\top} e^{-ika} + D^{(j)} + S^{(j)} e^{ika}] \psi_{n_j k}^{(j)} = E_{n_j}^{(j)}(k) \psi_{n_j k}^{(j)} \quad (3.14)$$

と与えられる. 1DEM のバンド構造  $E_n(k)$  は各グループのバンド構造の和集合となる.

$$E_n(k) = \bigcup_{j=1}^M E_{n_j}^{(j)}(k) \quad (3.15)$$

3.2.1節で述べた 1DEM の表現行列では, パラメータの総数は  $N + N^2$  個である. 一方, モード分割法を用いた場合, パラメータの総数は  $\sum_{j=1}^M (m_j + m_j^2)$  個となり, 設定すべきパラメータの数が減少する. そのため, 最適なパラメータの探索をより高速に行うことができる. さらに, 以下で述べるように, 量子輸送シミュレーションもより高速に実行できる.

NEGF 法では, ハミルトニアンと同じサイズの行列に対する逆行列演算がシミュレーション全体の計算量の大部分を占める. モード分割法を用いない場合, 逆行列演算の計算量は  $N^3$  に比例する. 一方, モード分割法を用いると, 逆行列演算の計算量は  $\sum_j m_j^3$  に比例する. そのため, 逆行列演算の計算量を削減でき, 量子輸送シミュレーションを高速に行うことができる.

### バンドの折返しおよび位相シフト

$k = 0$  におけるバンドの交差を表現する手法であるバンドの折返しおよび位相シフトについて説明する. 図 3.3 に示すように, 1 次元の系において波数空間における格子定数は, 実空間における格子定数に反比例する. 系の実空間における格子定数を図 3.3(b) のように  $2a$  と仮定した場合, 実

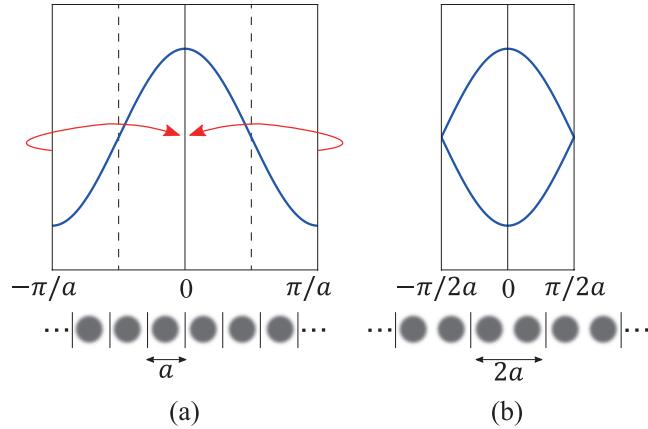


図 3.3: 1 次元モデルにおけるバンドの折返し . (a) 格子定数が  $a$  の 1 次元系のバンド構造 . (b) (a) と同じ系において , 格子定数を  $2a$  と仮定した場合のバンド構造 . 破線と赤矢印で示すように , 第一ブリルアンゾーンの長さが半分になるようにバンド構造が折り返す .

空間における格子定数が  $a$  のときのバンド構造 [図 3.3(a)] をちょうど折返したバンド構造が得られる . つづいて位相を  $\pi$  だけシフトさせることで , バンドの交差点を第一ブリルアンゾーンの端から中心 ( $k = 0$ ) に移動させることができる .

バンドの折返しおよび位相シフトは , 対角行列  $D^{(j)}$  と副対角行列  $S^{(j)}$  とを , 折り返す前のバンド構造に関する行列  $D_o^{(j)}$  ,  $S_o^{(j)}$  を用いて ,

$$D^{(j)} = \begin{bmatrix} D_o^{(j)} & S_o^{(j)} \\ S_o^{(j)T} & D_o^{(j)} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

$$S^{(j)} = - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ S_o^{(j)} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

とそれぞれ定義することで実現できる . この方法を用いることで ,  $k = 0$  におけるバンド交差を 1DEM で表現できる .

### 3.3 バンド間輸送

3.2.1 節では , 1DEM の表現行列を定義し , そのバンド構造がモデルパラメータによって一意に定まることを示した . 3.2.2 節では , モデルパラメータを目標バンド構造へのフィッティングを通して得る方法と , その最適化アルゴリズムとして ADAM を利用したことを記した . 3.2.3 節では , モード分割法とバンド折返しおよび位相シフトを用いて , モデルパラメータの探索範囲を狭め , 非物理的な状態を取り除く方法を述べた .

これらの手法を用いることで , バンド内輸送シミュレーションを精度良く実行するために十分な情報を含んだ 1DEM を構築できる . しかし , この 1DEM ではバンド間輸送シミュレーションを精度良く実行することが難しい . その理由は主に以下の 3 点にある .

1つ目の理由は、減衰状態に関する情報をこれまでの1DEMでは十分に表現できていない点にある。一般にバンド間トンネルは、伝搬状態から減衰状態を経由して別の伝搬状態に接続する様子から理解される[24–27]。したがって、減衰状態に関する分散関係を表す複素バンド構造も含めてモデルパラメータをフィッティングすることで、減衰状態の情報を含んだ1DEMを構築することができる。この方法を3.3.1節で述べる。

2つ目の理由は、デバイスの実空間上の対称性をこれまでの1DEMでは考慮できていない点にある。本研究では計算例として、閃亜鉛鉱からなる量子細線構造を扱う。この半導体1次元構造では、チャネルに導入するポテンシャルを左右反転させても透過関数は変化しない。しかし、対称性を考慮していない1DEMでは、チャネルに導入するポテンシャルを左右反転させると透過関数が異なる値を取ってしまう。この問題を解決するため、1DEMのハミルトニアン行列に実空間上のパリティ変換に対する対称性を導入する必要がある。この方法を3.3.2節で述べる。

3つ目の理由は、1DEMでは輸送方向に関する軌道の位置の分解能が、再現を目指す1次元構造が本来もつ分解能より低い点にある。1DEMでは行列 $D$ に含まれる軌道が空間上のどの位置に局在しているかを特定できない。この問題を解決するため、複数の単位胞をまとめて1つの単位胞とみなすことで位置の分解能を向上させる方法を開発した。この方法を3.3.3節で述べる。

### 3.3.1 複素バンド構造に対するフィッティング

系全体のハミルトニアンが1DEMを用いて、

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & S^T & D & S & & \\ & & S^T & D & S & \\ & & & S^T & D & S \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

と表されているとき、一般化固有値問題 $A\chi_n(E) = z_n(E)B\chi_n(E)$ 、

$$\underbrace{\begin{bmatrix} S^T & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_A \chi_n(E) = z \underbrace{\begin{bmatrix} EI - D & -S \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_B \chi_n(E) \quad (3.19)$$

の固有値 $z_n(E)$ を用いて、減衰定数 $\kappa_n(E)$ は、

$$\kappa_n(E) = -\text{Re}[\log z]/a \quad (3.20)$$

と与えられる[5, 28]。ここで、 $a$ は格子定数、 $E$ はエネルギー、 $n$ は同一エネルギーの固有状態を区別する添字である。以上より、系の減衰状態を特徴づける減衰定数 $\kappa_n(E)$ は、モデルパラメータ $\{\theta_j\}$ によって一意に定まることがわかる。

本研究では、固有値問題に関する摂動理論の式(3.10)を用いるために式(3.19)の一般化固有値

問題を  $M = A^{-1}B$  として、行列  $M$  に対する固有値問題に帰着した [13] .

$$\underbrace{\begin{bmatrix} (S^T)^{-1}(EI - D) & -(S^T)^{-1}S \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_M \chi_n(E) = \lambda_n(E) \chi_n(E) \quad (3.21)$$

$$\lambda_n(E) = z_n(E)^{-1} \quad (3.22)$$

ここで、行列  $S$  は 1DEM の行列であるため、つねに正則にとることができるもの。

モデルパラメータは、目標とする複素バンド構造へのフィッティングを通して決定する。すなわち、目標の減衰定数  $\hat{\kappa}_n(E)$  と、1DEM の減衰定数  $\kappa_n(E)$  との 2 乗誤差を最小化することで、モデルパラメータを決定する。複素バンド構造に関する損失関数  $L(\{\theta_j\})$  を、

$$L(\{\theta_j\}) = \frac{1}{2} \sum_E \sum_n [\hat{\kappa}_n(E) - \kappa_n(E)]^2 \quad (3.23)$$

と定義する。ここで、エネルギー  $E$  と添字  $n$  の総和をとる範囲は任意である。例えば、特定のエネルギー範囲で複素バンド構造を再現したい場合には、その部分のみを評価すればよい。

式 (3.23) を効率よく最小化するには、モデルパラメータを微小変化させたときの複素バンド構造の微小変化  $\partial \kappa_n(E) / \partial \theta_j$  を求める必要がある。これは、式 (3.21) を用いることで、3.2.2 節で説明した方法と同様に求められる。ADAM アルゴリズムを用いたパラメータ探索も同様に実行することができる。

### 3.3.2 空間反転対称性の導入

1DEM がパリティ変換に対して不变になる条件は、

$$\begin{cases} D = PDP \\ S = PS^T P \end{cases} \quad (3.24)$$

$$(3.25)$$

を満たす行列  $P$  が存在することである。ただし、 $P$  は  $T(i, j)$  を用いて、

$$P = T(i_1, j_1)T(i_2, j_2) \cdots T(i_l, j_l) \quad (3.26)$$

と表される。ここで、 $T(i, j)$  は単位行列の  $(i, i)$  成分および  $(j, j)$  成分を 0 とし、かわりに  $(i, j)$  成分および  $(j, i)$  成分を 1 にした行列である。 $l$  は任意の自然数を表す。以下、この条件が、1DEM がパリティ変換に対して不变となる十分条件である理由を説明する。

左右に電極をとりつけた 1 次元の系において、遅延グリーン関数は、

$$G^R(E) = [EI - H_C - \Sigma_L(E) - \Sigma_R(E)]^{-1} \quad (3.27)$$

と表される(3.4節参照)。ただし、

$$H_C = \underbrace{\begin{bmatrix} D & S & & \\ S^T & D & \ddots & \\ \ddots & \ddots & S & \\ & S^T & D \end{bmatrix}}_{H_0} + \underbrace{\begin{bmatrix} U_1 I & & & \\ & U_2 I & & \\ & & \ddots & \\ & & & U_n I \end{bmatrix}}_{U_C} \quad (3.28)$$

であり、 $H_0$ は電極を取り除いた場合の一様なチャネル領域のハミルトニアンで、 $U_C$ はチャネル領域において $i$ 番目の単位胞のポテンシャルエネルギー $U_i$ を格納した行列である。 $\Sigma_L(E)$ 、 $\Sigma_R(E)$ はそれぞれ左電極、右電極の自己エネルギーを表す行列である。パリティ変換とはすなわち、

$$U_C \longrightarrow U_{C^P} = \begin{bmatrix} U_n I & & & \\ & U_{n-1} I & & \\ & & \ddots & \\ & & & U_1 I \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

と置きかえることを意味する。そのため、この系におけるパリティ演算子 $\Pi$ は、

$$\Pi = \begin{bmatrix} & & P \\ & P & \\ \ddots & & \\ P & & \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

と表せる。したがって、 $\Pi = \Pi^{-1} = \Pi^\dagger$ に注意して、式(3.24)、式(3.25)が成り立っているならば、

$$\Pi H_0 \Pi^{-1} = \Pi H_0 \Pi = \begin{bmatrix} PDP & PS^T P & & \\ PSP & PDP & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & PS^T P \\ & & PSP & PDP \end{bmatrix} = H_0 \quad (3.31)$$

となり、ハミルトニアンは空間反転操作に対して不变となる。例えば、 $S$ が対称行列ならば、明らかに1DEMは空間反転操作に対して不变となる。

本研究では対称性を導入した1DEMとして、

$$D = \begin{bmatrix} C & Q \\ Q & C \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

$$S = \begin{bmatrix} W & M \\ V & W \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

を用いた。ただし、行列 $C$ は実対角行列で、行列 $Q, V, W, M$ は実対称行列である。このとき、式(3.24)、式(3.25)を満たす $P$ は、

$$P = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

である。

### 3.3.3 拡張された単位胞による位置情報の追加

3.2.1 節で述べた 1DEM では、サイト 1 つあたりの実空間上での長さが目標とする系の格子定数  $a$  と等しいと仮定していた。ここで、任意の整数  $m$  を用い、サイト 1 つあたりの長さが  $a/m$  であると仮定すると、ハミルトニアンをつぎのように表すことができる。

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & S_{(m)}^T & D_{(m)} & S_{(m)} & \\ & S_{(m)}^T & D_{(m)} & S_{(m)} & \\ & S_{(m)}^T & D_{(m)} & S_{(m)} & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

$$D_{(m)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \cdots & m \\ D & S & & \\ S^T & D & \ddots & \\ \ddots & \ddots & S & \\ & S^T & D & \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

$$S_{(m)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & \cdots & m \\ & & & \\ & & & \\ S & & & \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

この系では、図 3.4 に示すように、サイトが  $m$  個並んで合計の長さが  $a$  になる。すなわち、行列  $D_{(m)}$  および  $S_{(m)}$  は、単位胞を  $m$  個まとめて新しく構成した単位胞のハミルトニアンを表している。この新しく構成した単位胞を、本研究では拡張された単位胞と呼ぶことにする。

拡張された単位胞から得られるバンド構造は、元の単位胞のバンド構造を、対応するより小さなブリルアンゾーンに折りたたむことで得られる。この点に注意して、拡張された単位胞のバンド構造  $E_n^{(m)}(k)$  が目標のバンド構造と一致するようにモデルパラメータを調整すればよい。ただし、 $E_n^{(m)}(k)$  は、つぎの固有値問題によって定まる。

$$[S_{(m)}^T e^{-ika} + D_{(m)} + S_{(m)} e^{ika}] \psi_{nk}^{(m)} = E_n^{(m)}(k) \psi_{nk}^{(m)} \quad (3.38)$$

一方、複素バンド構造についてはバンドの折返しが発生しないため、3.3.1 節の方法で複素バンド構造に対するフィッティングを行うことができる。

以上のように行列  $D_{(m)}$ 、 $S_{(m)}$  を構成することで、 $D_{(m)}$  に含まれる軌道の位置を特定できる。これは、図 3.4 に示すように単位胞が等間隔で配置されているため、軌道がどの単位胞に含まれているかを確認することで、軌道の位置がわかるためである。したがって、輸送方向に関する軌道の位置の分解能が低いという 1DEM の問題は、拡張された単位胞を用いることで解決できる。

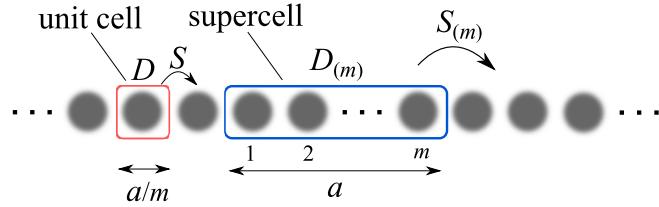


図 3.4: サイト (黒丸) が  $m$  個並んで合計の長さが  $a$  になると考へた場合の 1 次元系 . それぞれのサイトは行列  $D$  によって記述され , 最近接のサイト同士の相互作用は行列  $S$  によって与えられる . 行列  $D_{(m)}$  ,  $S_{(m)}$  は拡張された単位胞のハミルトニアンを表す .

### 3.4 1次元等価モデルに基づく非平衡グリーン関数法

NEGF 法は量子力学的效果を本質的に取り入れることが可能な計算手法の一つである . 本節では , 1DEM のような擬 1 次元モデルにおけるコヒーレントな透過関数の計算方法について説明する [2, 29–31] .

#### 3.4.1 開いた系の取り扱い

輸送問題を扱うため , 図 3.5 に示すように ,  $n$  個の単位胞からなるチャネル領域の左右に , 半無限の単位胞が連なる電極が接続された系を考える . ここで , 最近接単位胞間にのみ相互作用があると仮定する . このとき , チャネル領域に加えて電極領域も含んだ系全体のハミルトニアンは , 各領域ごとのハミルトニアンを用いて ,

$$\underbrace{\begin{bmatrix} H_L & H_{LC} & 0 \\ H_{LC}^\dagger & H_C & H_{CR} \\ 0 & H_{CR}^\dagger & H_R \end{bmatrix}}_{\mathcal{H}} \begin{bmatrix} \Phi_L \\ \Phi_C \\ \Phi_R \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Phi_L \\ \Phi_C \\ \Phi_R \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

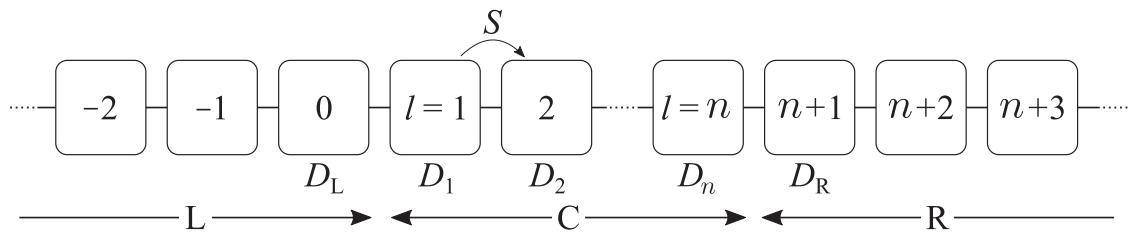


図 3.5:  $N$  個の単位胞からなるチャネル領域 (C) の左右に半無限の周期的で一様な電極 (L, R) が接続された系 .

と表せる。ここで、各領域のハミルトニアン行列は以下の式で与えられる。

$$H_L = \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & D_L & S \\ & S^\dagger & D_L \end{bmatrix}, H_{LC} = \begin{bmatrix} & & \\ & & S \\ & S & \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

$$H_C = \begin{bmatrix} D_1 & S & & & \\ S^\dagger & D_2 & S & & \\ & S^\dagger & D_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & S \\ & & & S^\dagger & D_n \end{bmatrix}, H_{CR} = \begin{bmatrix} & & & \\ & & & S \\ & & & \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

$$H_R = \begin{bmatrix} D_R & S & & \\ S^\dagger & D_R & & \\ & & \ddots & \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

$D_i$  は、孤立した単位胞のハミルトニアン  $D$ 、 $i$  番目の単位胞におけるポテンシャルエネルギー  $U_i$ 、単位行列  $I$  を用いて、

$$D_i = D + U_i I \quad (3.43)$$

と表され、 $D_L$ 、 $D_R$  も同様に電極におけるポテンシャルエネルギー  $U_L$ 、 $U_R$  を用いて、

$$D_L = D + U_L I, \quad D_R = D + U_R I \quad (3.44)$$

と表される。

全系の遅延グリーン関数行列（以下、誤解のない場合は、単にグリーン関数と呼ぶ） $\mathcal{G}^r(E)$  は、

$$\mathcal{G}^r(E) = [EI - \mathcal{H} + i0]^{-1} = \begin{bmatrix} EI - H_L + i0 & -H_{LC} & 0 \\ -H_{LC}^\dagger & EI - H_C + i0 & -H_{CR} \\ 0 & -H_{CR}^\dagger & EI - H_R + i0 \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.45)$$

と表せる。ここで、ブロックごとにグリーン関数を定義する。

$$\begin{bmatrix} G_L & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} EI - H_L + i0 & -H_{LC} & 0 \\ -H_{LC}^\dagger & EI - H_C + i0 & -H_{CR} \\ 0 & -H_{CR}^\dagger & EI - H_R + i0 \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.46)$$

この式より、チャネル領域のグリーン関数  $G(E)$  は、つぎのように表せる。

$$G(E) = [EI - H_C - \Sigma_L(E) - \Sigma_R(E)]^{-1} \quad (3.47)$$

ここで、 $\Sigma_L(E)$  および  $\Sigma_R(E)$  は、左電極および右電極の効果を表す自己エネルギーであり、孤立した電極のグリーン関数  $g_L(E) = [EI - H_L + i0]^{-1}$ 、 $g_R(E) = [EI - H_R + i0]^{-1}$  を用いて、

$$\Sigma_L(E) = H_{LC}^\dagger g_L(E) H_{LC}, \quad \Sigma_R(E) = H_{CR} g_R(E) H_{CR}^\dagger \quad (3.48)$$

と与えられる。

チャネルが電極から孤立している場合、チャネルのグリーン関数は  $g(E) = [EI - H_C + i0]^{-1}$  で与えられる。一方、チャネルが左右の電極に接続された場合、式(3.47)を見ると、 $H_C \rightarrow H_C + \Sigma_L(E) + \Sigma_R(E)$  となることがわかる。すなわち、 $\Sigma_{L/R}(E)$  は、チャネルが電極に接続された効果を表す。

後述するように、半無限の孤立した電極のグリーン関数  $g_L(E)$ ,  $g_R(E)$  から、式(3.48)を用いて  $\Sigma_{L/R}(E)$  を求めることができる。さらに、自己エネルギー  $\Sigma_{L/R}(E)$  から、式(3.47)を用いて、電極に接続されたチャネルのグリーン関数  $G(E)$  が計算できる。

なお、式(3.46)から式(3.47)への変形は、以下のとおりである。式(3.46)は、

$$\begin{bmatrix} EI - H_L + i0 & -H_{LC} & 0 \\ -H_{LC}^\dagger & EI - H_C + i0 & -H_{CR} \\ 0 & -H_{CR}^\dagger & EI - H_R + i0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_L & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_R \end{bmatrix} = 1 \quad (3.49)$$

と表される。この式において、左行列の2行目と右行列の2列目の積より、

$$-H_{LC}^\dagger G_{LC} + [EI - H_C + i0]G - H_{CR}G_{RC} = 1 \quad (3.50)$$

が得られる。同様に1行目と2列目および3行目と2列目の積より、

$$\underbrace{[EI - H_L + i0]}_{g_L^{-1}} G_{LC} - H_{LC}G = 0, \quad -H_{CR}^\dagger G + \underbrace{[EI - H_R + i0]}_{g_R^{-1}} G_{RC} = 0 \quad (3.51)$$

が得られる。これらの式より  $G_{LC} = g_L H_{LC} G$ ,  $G_{RC} = g_R H_{CR}^\dagger G$  と表されるため、式(3.50)に代入すると、

$$-H_{LC}^\dagger g_L H_{LC} G + [EI - H_C + i0]G - H_{CR}g_R H_{CR}^\dagger G = 1 \quad (3.52)$$

すなわち、

$$[E - H_C - \underbrace{H_{LC}^\dagger g_L H_{LC}}_{\Sigma_L} - \underbrace{H_{CR}g_R H_{CR}^\dagger}_{\Sigma_R}]G = 1 \quad (3.53)$$

となり、式(3.47)が得られる。ここで、自己エネルギー  $\Sigma_{L/R}(E)$  が複素行列となることから、微小量  $+i0$  を省略した。

### 3.4.2 電極の自己エネルギー

電極の効果を表す自己エネルギー  $\Sigma_{L/R}(E)$  が求まると、式(3.47)よりチャネルのグリーン関数  $G(E)$  を求めることができる。行列  $\Sigma_{L/R}(E)$  のサイズは、チャネルのハミルトニアン  $H_C$  と同じサイズであるため、式(3.47)は有限サイズの逆行列演算となり数値計算可能である。

しかし、式(3.48)を用いて自己エネルギーを求めるためには、無限次元の行列を扱わなくてはならず、数値計算にあたり工夫が必要となる。以下で述べるように、電極部分が一様・周期的であることを利用することにより、数値計算が可能となる。

右側電極に関するグリーン関数  $g_R(E) = [E - H_R + i0]^{-1}$  について考える。 $g_R(E)$  を、

$$g_R = \begin{bmatrix} g_{n+1,n+1} & g_{n+1,n+2} & \cdots \\ g_{n+2,n+1} & g_{n+2,n+2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

と表す。ここで、 $g_{i,j}$  は、 $D_R, S$  と同じサイズの行列である。以下、 $g_{i,j}, D_R, S$  のサイズを、一般的に、 $M \times M$  と表す。式 (3.41) で示したように、 $H_{CR}$  は左下のブロックにのみ値があるため、

$$\Sigma_R = H_{CR}g_R(E)H_{CR}^\dagger = \begin{bmatrix} & & \\ & & \\ & & Sg_{n+1,n+1}S^\dagger \end{bmatrix} \quad (3.55)$$

となり、 $\Sigma_R$  は右下のブロックにのみ値があることがわかる。また、 $g_{i,j}$  ( $i, j \geq n+1$ ) のうち、 $g_{n+1,n+1}$  のみが  $\Sigma_R$  の計算に必要であることもわかる。一方、 $H_R$  は式 (3.42) で与えられるため、

$$\begin{bmatrix} EI - D_R + i0 & -S & \cdots \\ -S^\dagger & EI - D_R + i0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{n+1,n+1} & g_{n+1,n+2} & \cdots \\ g_{n+2,n+1} & g_{n+2,n+2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = 1 \quad (3.56)$$

が得られる。この式から  $g_{n+1,n+1}$  に関係する部分を取り出す。

$$[EI - D_R + i0]g_{n+1,n+1} - Sg_{n+2,n+1} = 1 \quad (3.57)$$

$$-S^\dagger g_{n+1,n+1} + [EI - D_R + i0]g_{n+2,n+1} - Sg_{n+3,n+1} = 0 \quad (3.58)$$

下側の式 (3.58) は、右電極における波動方程式、

$$-S^\dagger \Phi_{l-1} + [EI - D_R] \Phi_l - S \Phi_{l+1} = 0 \quad (3.59)$$

と同じ形をしている。このことを利用して式 (3.58) を解く。

電極領域は一様・周期的であるため、位相因子  $z$  を用いて波動関数は、

$$\Phi_{l+1} = z \Phi_l \quad (3.60)$$

と表せる。この式を利用して、式 (3.59) から  $\Phi_{l-1}$  を消去すると、

$$-z^{-1} S^\dagger \Phi_l + [E - H] \Phi_l - S \Phi_{l+1} = 0 \quad (3.61)$$

が得られる。この式と式 (3.60) をまとめると、

$$\underbrace{\begin{bmatrix} S^\dagger & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} \Phi_l \\ \Phi_{l+1} \end{bmatrix}}_\chi = z \underbrace{\begin{bmatrix} EI - D_R & -S \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_B \underbrace{\begin{bmatrix} \Phi_l \\ \Phi_{l+1} \end{bmatrix}}_\chi \quad (3.62)$$

となり、一般化固有値問題  $A\chi = zB\chi$  が得られる。この一般化固有値問題を解くと、固有値  $z_i$  と固有ベクトル  $\chi_i$  の組  $(z_i, \chi_i)$  が最大  $2M$  組得られる。ここでは、ちょうど  $2M$  個の組が得られた場合について考える。それら  $2M$  個の組のうち、半分の  $M$  個は電極内を右向きに進む波、残り半分は左向きに進む波を表す。

右電極の遅延グリーン関数は、チャネルから外へ流れ出る状態から構成されるべきである。そこで、右向きに進行する波のみを取り出し（左右の判定方法は次節で述べる）、それらの固有値と固有ベクトルとを、

$$z_i, \quad \chi_i = \begin{bmatrix} \psi_i \\ z_i \psi_i \end{bmatrix} \quad (i = 1, 2, \dots, M) \quad (3.63)$$

と表す。式(3.59)で表した電極内の波動方程式の右向き解  $\Phi_l$  は、一般的に  $\psi_i$  の線形結合で表せる。

$$\Phi_l = \sum_i c_i (z_i)^l \psi_i \quad (3.64)$$

ここで、 $c_i$  は  $\Phi_l$  の展開係数である。いま、

$$\Psi_R = \begin{bmatrix} \psi_1 & \psi_2 & \cdots & \psi_M \end{bmatrix}, Z_R = \begin{bmatrix} z_1 & & & \\ & z_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & z_M \end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix} c_1 & & & \\ & c_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & c_M \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

なる正方行列  $\Psi_R, Z_R, C$  を導入する（ $z_i, \psi_i$  が右向きの波であることを示すため添字 R を追加した）。すると、式(3.64)は、 $\Phi_l = \Psi_R Z_R^l C$  と表せる。同様にして、 $\Phi_{l+1} = \Psi_R Z_R^{l+1} C$  であるため、これら2つの式から  $C$  を消去し、

$$\Phi_{l+1} = \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1} \Phi_l \quad (3.66)$$

が得られる。この式に現れる  $\Psi_R Z_R \Psi_R^{-1}$  のように隣同士の波動関数を結ぶ因子をプロッホ因子と呼ぶ。

式(3.59)を満たす右向きプロッホ解  $\Phi_l$  が、式(3.66)を満たすことから、式(3.58)を満たす  $g_{i,j}$  は、

$$g_{n+2,n+1} = \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1} g_{n+1,n+1}, \quad g_{n+3,n+1} = [\Psi_R Z_R \Psi_R^{-1}]^2 g_{n+1,n+1} \quad (3.67)$$

を満たすことがわかる。これらの式を、式(3.57)と式(3.58)に代入すると、

$$[E - H - S \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1}] g_{n+1,n+1} = 1 \quad (3.68)$$

$$\{-S^\dagger + [E - H - S \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1}] \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1}\} g_{n+1,n+1} = 0 \quad (3.69)$$

となり、

$$g_{n+1,n+1} = \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1} S^{\dagger -1} \quad (3.70)$$

が得られる。この式より、 $g_{n+1,n+1}$  を有限サイズの行列演算で求めることができる。すなわち、自己エネルギー  $\Sigma_R$  の右下ブロック成分  $\sigma_R$  は、

$$\sigma_R = S g_{n+1,n+1} S^\dagger = S \Psi_R Z_R \Psi_R^{-1} \quad (3.71)$$

と計算できる。

同様に、左側電極の効果を表す自己エネルギー  $\Sigma_L$  の左上ブロック成分  $\sigma_L$  は、

$$\sigma_L = S^\dagger g_{0,0} S = S^\dagger \Psi_L Z_L^{-1} \Psi_L^{-1} \quad (3.72)$$

と与えられる。ここで、 $Z_L, \Psi_L$  は左電極内で左向きに進むプロッホ波に関する固有値、固有ベクトルから構成される行列を表す。

### 3.4.3 プロッホ波の進行方向の判定方法

式 (3.62) の一般化固有値問題を解くと, 固有値  $z_i$  と固有ベクトル  $\chi_i$  の組  $(z_i, \chi_i)$  が最大  $2M$  組得られる. そのうち, 右向きに進む波は  $M$  個, 左向きに進む波は  $M$  個である. このプロッホ波の進行方向の判定方法について述べる [32].

プロッホ波は, 伝搬状態と減衰状態の 2 つに大きく分けることができる. 伝搬状態では, 位相因子が  $|z| = 1$  となり, 減衰状態では, 位相因子が  $|z| \neq 1$  となる. 伝搬状態と減衰状態では進行方向の判定方法が異なる.

#### 減衰状態の場合

減衰状態は  $|z| < 1$  と  $|z| > 1$  の状態が同数存在し, それぞれ, 正方向と負方向に進行しながら減衰していく状態である.

#### 伝搬状態の場合

伝搬状態についても正方向と負方向に進行する状態が同数存在する. しかし, 減衰状態の場合のように, 位相因子の絶対値では判定することができない. 固有ベクトル  $\psi_i$  と固有値  $z_i$  を用いて固有状態の速度を求ることで, 進行方向を判定することができる [32].

固有ベクトル  $\psi_i$  と固有値  $z_i$  は, 式 (3.59) を満たす.

$$S^\dagger z_i^{-1} \psi_i + D\psi_i + S z_i \psi_i = E\psi_i \quad (3.73)$$

この式の両辺に, 左から  $\psi_i^\dagger$  をかけると,

$$z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i + \psi_i^\dagger D\psi_i + z_i \psi_i^\dagger S\psi_i = E|\psi_i|^2 \quad (3.74)$$

が得られる. すなわち,

$$E = \frac{1}{|\psi_i|^2} \left[ z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i + \psi_i^\dagger D\psi_i + z_i \psi_i^\dagger S\psi_i \right] \quad (3.75)$$

が得られる. この式の右辺で  $k$  に依存するのは, 位相因子  $z_i = \exp(ika)$  のみであるため, 速度  $v$  は,

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{ia}{\hbar|\psi_i|^2} \left[ -z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i + z_i \psi_i^\dagger S\psi_i \right] \quad (3.76)$$

となる. ここで  $z_i^{-1} \psi_i^\dagger S^\dagger \psi_i = (z_i \psi_i^\dagger S\psi_i)^*$  であるため, 括弧内は  $i2\text{Im}[z_i \psi_i^\dagger S\psi_i]$  となり,

$$v = -\frac{2a}{\hbar|\psi_i|^2} \text{Im}[z_i \psi_i^\dagger S\psi_i] \quad (3.77)$$

が得られる. この式より,  $v$  の正負がわかり進行方向を判定することができる.

### 3.4.4 透過関数

チャネルのグリーン関数  $G(E)$  と電極の自己エネルギー  $\Sigma_{L/R}(E)$  とを用いて以下のように透過関数  $T(E)$  を計算することができる [2] .

$$T(E) = \text{Tr} [\Gamma_L(E)G(E)\Gamma_R(E)G^\dagger(E)] \quad (3.78)$$

ここで,  $\Gamma_R(E)$  および  $\Gamma_L(E)$  は,

$$\Gamma_R(E) = i [\Sigma_R(E) - \Sigma_R^\dagger(E)], \quad \Gamma_L(E) = i [\Sigma_L(E) - \Sigma_L^\dagger(E)] \quad (3.79)$$

と与えられる. 式 (3.55) および式 (3.71) で与えられるように,  $\Sigma_R(E)$  は右下ブロックにのみ値がある. 同様に  $\Sigma_L(E)$  は左上ブロックにのみ値がある. したがって,  $\Gamma_R(E)$ ,  $\Gamma_L(E)$  はそれぞれ右下ブロック, 左上ブロックにのみ値があり, これらを  $\gamma_R(E)$ ,  $\gamma_L(E)$  とおくと, 式 (3.78) を以下のように式変形することができる.

$$\begin{aligned} T(E) &= \text{Tr} \left( \begin{bmatrix} \gamma_L & & \\ & \ddots & \\ & & \gamma_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{1,1} & \cdots & G_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n,1} & \cdots & G_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & \ddots & \\ & & \gamma_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{1,1}^\dagger & \cdots & G_{n,1}^\dagger \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{1,n}^\dagger & \cdots & G_{n,n}^\dagger \end{bmatrix} \right) \\ &= \text{Tr} [\gamma_L(E)G_{1,n}(E)\gamma_R(E)G_{1,n}^\dagger(E)] \end{aligned} \quad (3.80)$$

ここで,  $\gamma_L(E)$  および  $\gamma_R(E)$  は,

$$\gamma_R(E) = i [\sigma_R(E) - \sigma_R^\dagger(E)], \quad \gamma_L(E) = i [\sigma_L(E) - \sigma_L^\dagger(E)] \quad (3.81)$$

である. 以上より, 透過関数  $T(E)$  を計算するのに必要となるのは,  $G(E)$  の右上ブロック成分  $G_{1,n}(E)$  のみであり, グリーン関数  $G(E)$  の全要素を計算する必要はないことがわかる.

NEGF 法では, グリーン関数  $G(E)$  を求める式 (3.47) の逆行列演算がシミュレーションのボトルネックとなる. そのため, 逆行列を計算する行列がブロック三重対角であることを利用した高速計算手法である再帰グリーン関数法 [33, 34] がよく用いられる. この方法では, グリーン関数  $G(E)$  の全要素を計算することなく, 右上のブロック成分  $G_{1,N}$  を効率的に計算することができる. 本研究では, 高速計算手法として再帰グリーン関数法を採用した.

## 3.5 シミュレーション結果

本節では, 開発した 1DEM を様々な半導体 1 次元構造に適用した結果を述べる. 具体的に想定した半導体 1 次元構造は, アームチェア端グラフェンナノリボンに加え, Si, GaAs, InAs, AlAs 量子細線である.

はじめに, TBM に基づいてバンド構造を計算した. Si, GaAs, InAs, AlAs 量子細線の計算には, スピン軌道相互作用を無視した最近接  $sp^3d^5s^*TBM$  を用いた. このモデルでは, 各原子にそれぞれ 10 個の基底が存在する. そのため, 単位胞に含まれる原子数を  $N_a$  とすると, TBM の行列サ

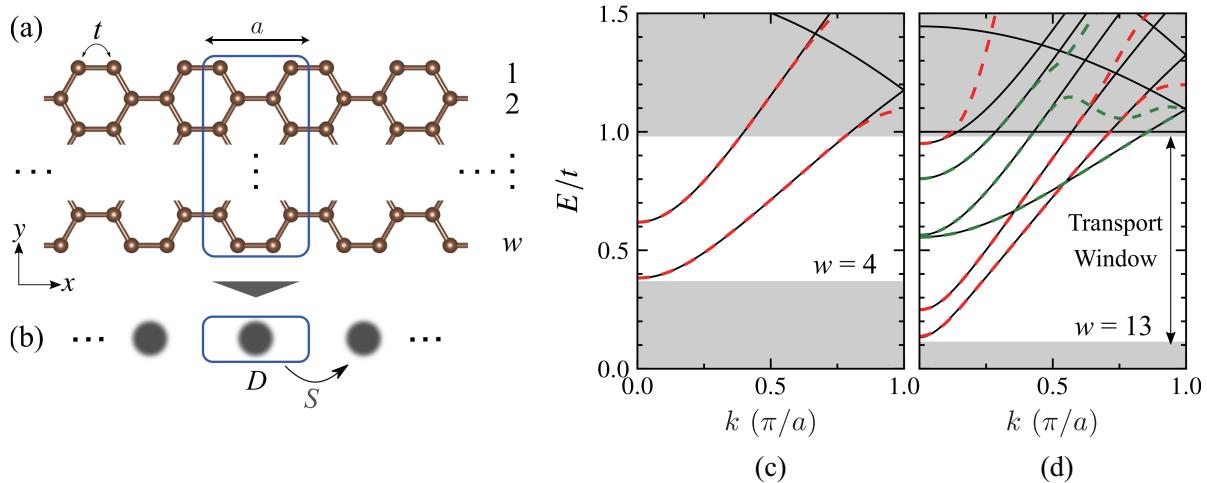


図 3.6: (a) リボン幅  $w$  のアームチェア端グラフェンナノリボン . 青矩形は単位胞を表し , 単位胞には炭素原子が  $2w$  個含まれる . (b) 対角行列  $D$  と対称行列  $S$  で表現された 1DEM . (c)(d)  $w = 4$  および  $w = 13$  におけるバンド構造 . 黒実線は TBM から計算したバンド構造 , 破線は 1DEM から計算したバンド構造を表す . エネルギーは最近接炭素原子間のホッピングエネルギー  $t$  によって規格化されている .

イズは  $N_{\text{TBM}} = 10N_{\text{a}}$  となる . 強結合パラメータは , J.M. Jancu らによって報告されたパラメータ [35] を用いた .

つぎに , TBM から計算したバンド構造を再現するように , 1DEM を構築した . さらに , TBM に基づく NEGF 法 (TBM-NEGF) [36] から計算した輸送特性と , 1DEM に基づく NEGF 法 (1DEM-NEGF) から計算した輸送特性を比較した .

### 3.5.1 バンド構造

図 3.6(a) に示すようなリボン幅が  $w$  のアームチェア端グラフェンナノリボンを考えた . 青色の矩形は単位胞を表し , その中には炭素原子が  $2w$  個含まれる . TBM によるバンド構造計算では , 最近接原子の  $p_z$  軌道間にのみホッピングエネルギー  $t$  が存在すると仮定した . そのため , TBM の行列サイズは  $N_{\text{TBM}} = 2w$  となる .

このリボン幅  $w$  のアームチェア端グラフェンナノリボンに対して 1DEM を構築した . 図 3.6(b) は , 擬 1 次元鎖で表される 1DEM を表している .

図 3.6(c) は ,  $w = 4$  のアームチェア端グラフェンナノリボンのバンド構造を表す . 黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 8$  の TBM から計算したバンド構造である . このうち , バンド端から約  $0.6t$  の範囲を再現するように 1DEM を構築した . このようなバンド端付近のエネルギー範囲を , 輸送エネルギー窓 (Transport Window) と呼ぶ . 図 3.6(c) の赤破線は ,  $N = 4$  の 1DEM から計算したバンド構造であり , 1DEM が輸送エネルギー窓内のバンド構造を精度良く表現していることがわかる . TBM に対するサイズ削減比は ,  $N/N_{\text{TBM}} = 4/8$  である .

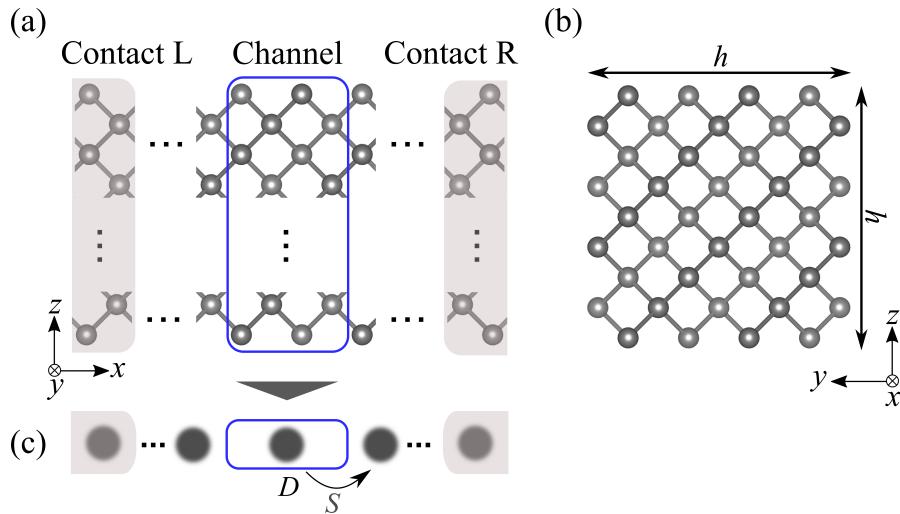


図 3.7: Si 量子細線の模式図 . (a)  $x$  ,  $y$  ,  $z$  軸方向の結晶方位はいずれも  $\langle 100 \rangle$  . (b) 断面形状は  $h \times h$  の正方形を仮定 . (c) Si 量子細線のバンド端付近のバンド構造を再現する 1DEM .

1DEM のサイズ  $N$  をどの程度に設定すれば、輸送エネルギー窓内のバンド構造を精度良く表現できるかを、事前に知ることは難しい。より効果的なサイズ削減比を達成するには、必要十分な  $N$  を設定することが重要である。本研究では、徐々に  $N$  を大きくしていき、目標のバンド構造を表現できたときの 1DEM を用いて、バンド計算や量子輸送計算を行った。この例では、 $N = 4$  とすることで、TBM のバンド構造を精度良く表現できた。なお、 $N$  に対するモデルパラメータ数はおよそ  $N^2$  に比例して増加するため、 $N$  を増やすとバンド構造の表現力が急激に向上すると考えられる。

図 3.6(d) は、 $w = 13$  のアームチェア端グラフェンナノリボンのバンド構造を表す。黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 26$  の TBM から計算したバンド構造である。赤破線と緑破線は、それぞれ  $m_1 = 10$  ,  $m_2 = 10$  とするモード分割法を用いて構築した  $N = 20$  の 1DEM を表している。1DEM のバンド構造は、TBM のバンド構造と精度良く一致していることがわかる。TBM に対するサイズ削減比は、 $N/N_{\text{TBM}} = 20/26$  である。これらの例では、もとから TBM のサイズがある程度小さいため、サイズ削減の効果はそれほど大きくない。

図 3.7(a)(b) は、正方形断面の Si 量子細線を表す。輸送方向 ( $x$  軸方向) と断面方向 ( $y$  軸および  $z$  軸方向) の結晶方位はいずれも  $\langle 100 \rangle$  とした。1 辺が  $h$  の正方形に原子を敷き詰めることで、断面の原子配置を決定した。この 1 次元構造に対して 1DEM を構築した。図 3.7(c) は、擬 1 次元鎖で表される 1DEM を表す。

図 3.8 は、 $h = 2 \text{ nm}$  の Si 量子細線の正孔に関するバンド構造を表す。図 3.8(a) は、 $N_{\text{TBM}} = 1120$  の TBM から計算したバンド構造である。一方、図 3.8(b) は、 $m_1 = 10$  (赤破線) ,  $m_2 = 20$  (青破線) とするモード分割法を用いて構築した  $N = 30$  の 1DEM を表す。 $k = 0$  でのバンド交差を表現するために、バンドの折返しおよび位相シフトを用いた。TBM に対するサイズ削減比は、 $N/N_{\text{TBM}} = 30/1120$  である。1DEM が、バンド端から約 0.22 eV の輸送エネルギー窓内のバンド

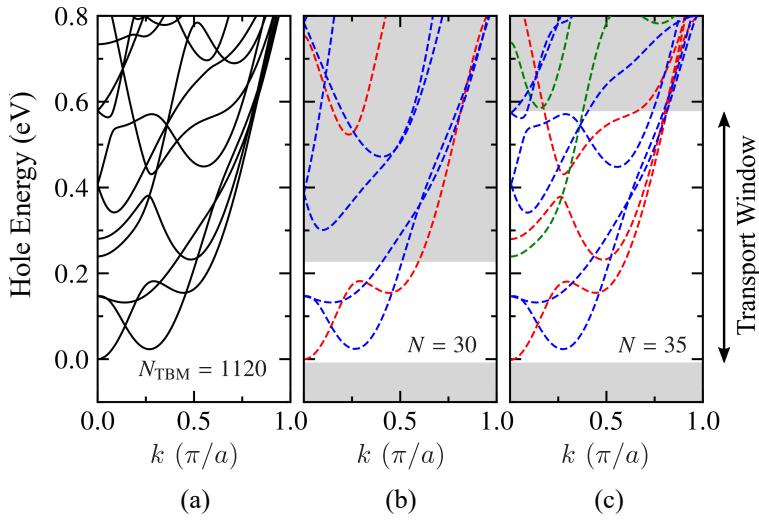


図 3.8:  $h = 2$  nm の Si 量子細線の正孔に関するバンド構造 . (a)  $N_{\text{TBM}} = 1120$  の TBM . (b)  $m_1 = 10$  (赤破線) ,  $m_2 = 20$  (青破線) とするモード分割法を用いて構築した  $N = 30$  の 1DEM . (c)  $m_1 = 10$  (赤破線) ,  $m_2 = 20$  (青破線) ,  $m_3 = 5$  (緑破線) とするモード分割法を用いて構築した  $N = 35$  の 1DEM .

構造を精度良く表現していることがわかる .

図 3.8(c) は ,  $m_1 = 10$  (赤破線) ,  $m_2 = 20$  (青破線) ,  $m_3 = 5$  (緑破線) とするモード分割法を用いて構築した  $N = 35$  の 1DEM を表す .  $k = 0$  でのバンド交差を表現するため , バンドの折返しありおよび位相シフトを用いた . TBM に対するサイズ削減比は ,  $N/N_{\text{TBM}} = 35/1120$  である . 1DEM が , バンド端から約 0.58 eV の輸送エネルギー窓内のバンド構造を精度良く表現していることがわかる . このように , サイズ  $N$  を変えることで , 1DEM はより広いエネルギー範囲のバンド構造を表現できる .

これらの例では , 元の TBM のサイズが  $N_{\text{TBM}} = 1120$  と大きいため , 1DEM を用いることで大幅にハミルトニアン行列サイズを削減できることがわかる .

### 3.5.2 バンド内輸送シミュレーション

構築した 1DEM に基づく 1DEM-NEGF を用いて , 透過関数をシミュレーションした . ソース , ドレイン , チャネル領域はすべて同一の物質および構造からなると仮定した . チャネル領域には , つきの式で表されるエカート型ポテンシャル [37] を導入した .

$$V(x) = \frac{(\sqrt{V_G} + \sqrt{V_G + V_{SD}})^2 \xi}{(1 + \xi)^2} - \frac{V_{SD} \xi}{1 + \xi} \quad (3.82)$$

ここで ,  $\xi = \exp(2\pi x/l)$  である . エカート型ポテンシャルは MOSFET のポテンシャル分布を模擬する .  $V_G$  がゲートバイアス ,  $V_{SD}$  がソースドレイン間のバイアス ,  $l$  がゲート長を表すパラメータである .

はじめに , p 型デバイスへの応用を想定し , 正孔の輸送シミュレーションを行った . 図 3.8(b) の

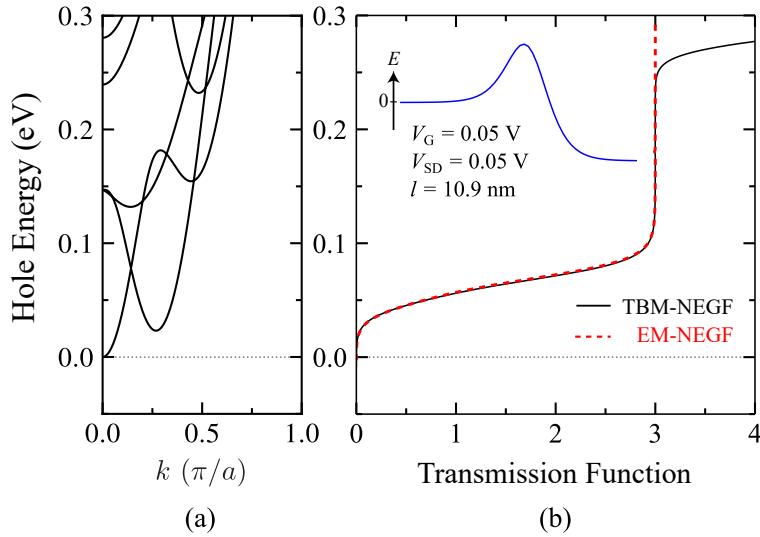


図 3.9: (a)  $h = 2$  nm の Si 量子細線の正孔に関するバンド構造 .  $N_{\text{TBM}} = 1120$  の TBM から計算した . (b) 黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 1120$  の TBM に基づく TBM-NEGF から計算した透過関数 , 赤破線は  $N = 30$  の 1DEM に基づく 1DEM-NEGF から計算した透過関数を表す . 輸送エネルギー窓幅は約 0.22 eV である . 揃入図はチャネルに導入したポテンシャル分布を表す .

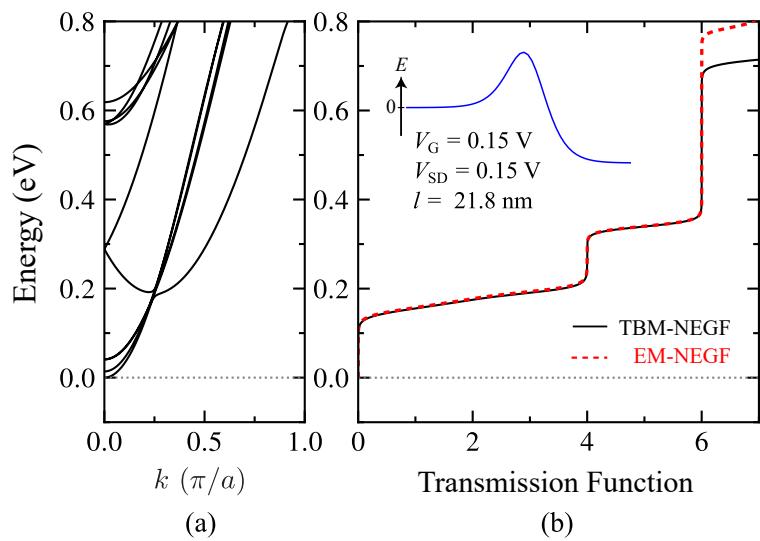


図 3.10: (a)  $h = 1.35$  nm の Si 量子細線のバンド構造 .  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した . (b) 黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく TBM-NEGF から計算した透過関数 , 赤破線は  $N = 40$  の 1DEM に基づく 1DEM-NEGF から計算した透過関数を表す . 輸送エネルギー窓幅は約 0.65 eV である . 揃入図はチャネルに導入したポテンシャル分布を表す .

$N = 30$  の 1DEM に基づき, 1DEM-NEGF を用いて透過関数を計算した。これを元の  $N_{\text{TBM}} = 1120$  の TBM に基づく TBM-NEGF を用いて計算した透過関数と比較した。シミュレーションのさい,  $V_G = 0.05$  V,  $V_{\text{SD}} = 0.05$  V,  $l = 10.9$  nm とするエカート型ポテンシャルをチャネルに導入した。図 3.9(a) に,  $N_{\text{TBM}} = 1120$  の TBM から計算したバンド構造を示す。図 3.9(b) に, 1DEM-NEGF から計算した透過関数  $T_{\text{EM}}(E)$  を赤破線で, TBM-NEGF から計算した透過関数  $T_{\text{TBM}}(E)$  を黒実線で示す。1DEM は, エネルギー幅約 0.22 eV の輸送エネルギー窓内の透過関数を再現していることがわかる。1DEM-NEGF と TBM-NEGF の誤差は, もっとも透過関数の誤差が大きいエネルギーにおいて,  $\max_E [T_{\text{TBM}}(E) - T_{\text{EM}}(E)] \approx 0.021$  (相対誤差で 1.2 %) となった。

つぎに, n 型デバイスへの応用を想定し, 電子の輸送シミュレーションを行った。図 3.10(a) は,  $h = 1.35$  nm の Si 量子細線のバンド構造である。 $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した。このうち, バンド端からエネルギー幅約 0.65 eV の範囲のバンド構造を表現する  $N = 40$  の 1DEM を構築した。構築した 1DEM に基づき, 1DEM-NEGF を用いて透過関数を計算した。これを元の  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく TBM-NEGF を用いて計算した透過関数と比較した。シミュレーションのさい,  $V_G = 0.15$  V,  $V_{\text{SD}} = 0.15$  V,  $l = 21.8$  nm とするエカート型ポテンシャルをチャネルに導入した。図 3.10(b) に, 1DEM-NEGF から計算した透過関数  $T_{\text{EM}}(E)$  を赤破線で, TBM-NEGF から計算した透過関数  $T_{\text{TBM}}(E)$  を黒実線で示す。1DEM は, エネルギー幅約 0.65 eV の輸送エネルギー窓内の透過関数を再現していることがわかる。1DEM-NEGF と TBM-NEGF の誤差は, もっとも誤差が大きいエネルギーにおいて,  $\max_E [T_{\text{TBM}}(E) - T_{\text{EM}}(E)] \approx 0.027$  (相対誤差で 1.0 %) となった。

以上のように, 電子と正孔どちらのバンド内輸送シミュレーションも, 1DEM で高精度かつ高速に行うことができる。

### 3.5.3 直接遷移型半導体におけるバンド間輸送シミュレーション

図 3.11(a)(b) に示すような III-V 族化合物半導体からなる量子細線に対して, 1DEM を適用した。量子細線の輸送方向 ( $x$  軸方向), 断面方向 ( $y$  軸および  $z$  軸方向) の結晶方位はいずれも  $\langle 100 \rangle$  とした。1 辺が  $h$  の正方形に原子を敷き詰めることで, 断面の原子配置を決定した。1DEM を構築した後, 1DEM-NEGF を用いてバンド間輸送シミュレーションを行った。

本節では, 直接遷移型半導体である GaAs と InAs を例として扱った。どちらも TBM のサイズは  $N_{\text{TBM}} = 600$  とし, 1DEM のサイズは  $N = 48$  とした。ただし, 図 3.11(c) に示すように,  $m = 4$  とする拡張された単位胞を用いた。また, バンド間輸送を扱うために, パリティ対称性を 1DEM に導入した。さらに, TBM の伝導帯端および価電子帯端付近の  $E$ - $k$  関係に加えて, バンドギャップ中の  $E$ - $\kappa$  関係を表現するように, 1DEM のモデルパラメータを調整した。

図 3.12(a) は,  $h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線のバンド構造を表す。右側のパネルは実バンド構造 ( $E$ - $k$  関係) を表し, 左側のパネルは複素バンド構造 ( $E$ - $\kappa$  関係) を表す。 $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した結果を黒実線で示す。また,  $N = 48$  の 1DEM から計算したバンド構造を赤破線で示す。輸送エネルギー窓内における  $E$ - $k$  関係, およびもっとも内側の  $E$ - $\kappa$  関係がよく一致していることがわかる。

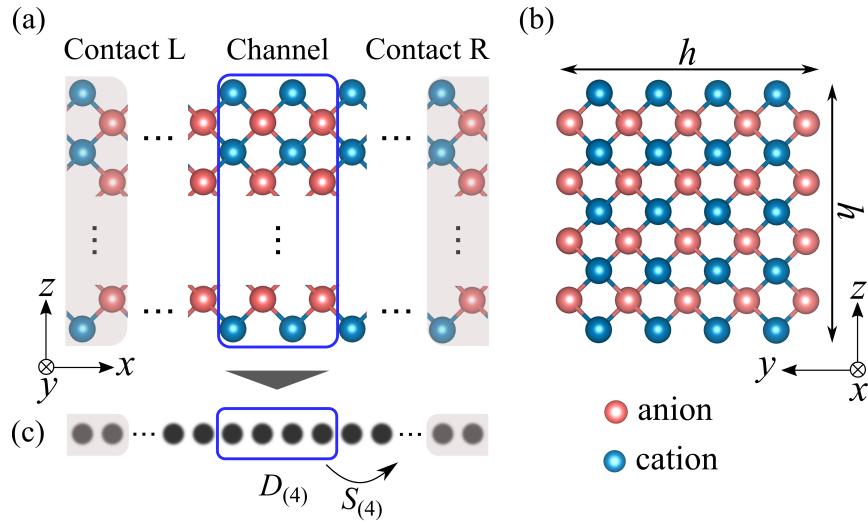


図 3.11: 閃亜鉛鉱量子細線の模式図 . (a)  $x$ ,  $y$ ,  $z$  軸方向の結晶方位はいずれも  $\langle 100 \rangle$  . (b) 断面形状は  $h \times h$  の正方形を仮定 . (c) 閃亜鉛鉱量子細線のバンド端付近のバンド構造を再現する 1DEM . 拡張された単位胞 ( $m = 4$ ) を用いた .

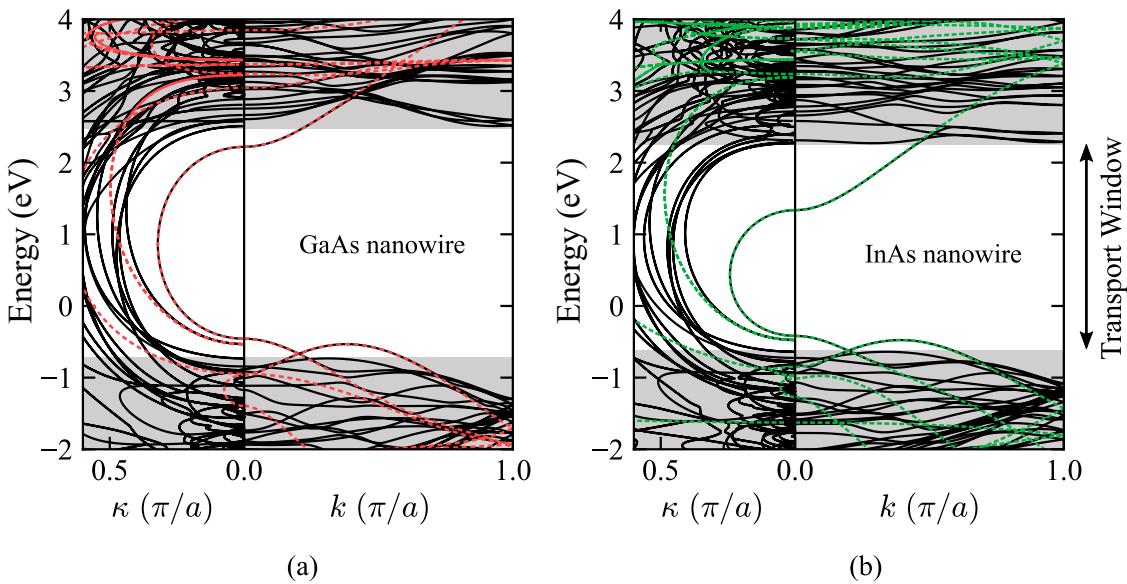


図 3.12: (a)  $h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線のバンド構造 . 黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した . 赤破線は  $N = 48$  の 1DEM から計算した . (b)  $h = 1.51$  nm の InAs 量子細線のバンド構造 . 黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した . 赤破線は  $N = 48$  の 1DEM から計算した .

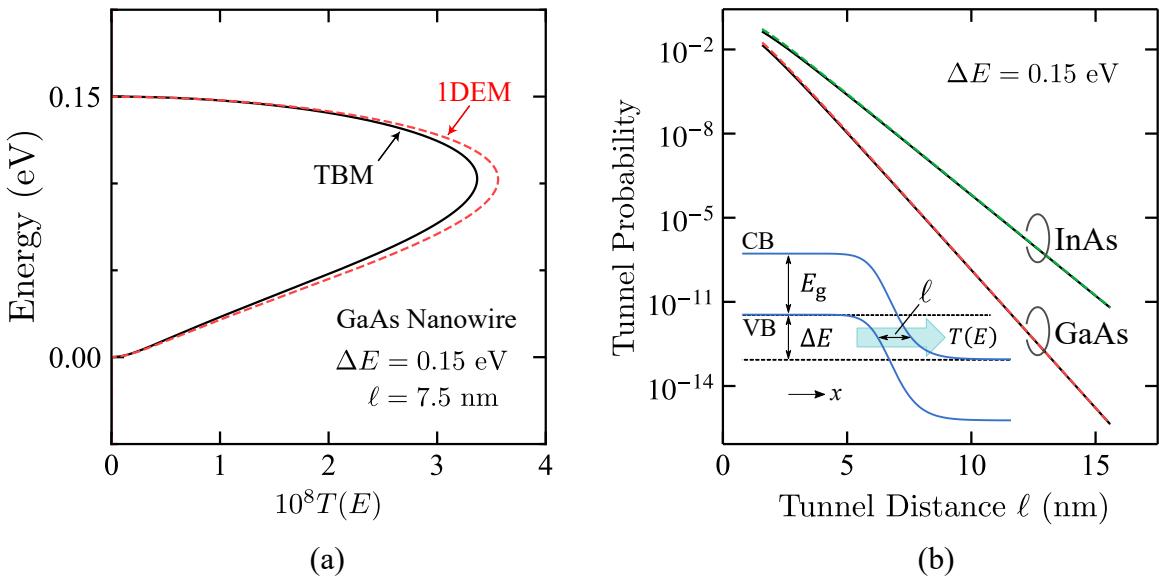


図 3.13: (a)  $h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線における、バンド間トンネル透過関数  $T(E)$  のエネルギー依存性。黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した。赤破線は  $N = 48$  の 1DEM から計算した。(b) GaAs, InAs 量子細線における、トンネル確率のトンネル距離  $\ell$  依存性。黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM から計算した。破線はそれぞれ  $N = 48$  の 1DEM から計算した。挿入図は (a)(b) の計算においてチャネルに導入したエカート型ポテンシャルを表す。

つぎに、NEGF 法を用いて、バンド間トンネル (BTBT: Band-to-band Tunneling) シミュレーションから透過関数を求めた。ソース、ドレイン、チャネル領域はすべて同一の物質および構造からなると仮定した。チャネル領域には、式 (3.82) で与えられるエカート型ポテンシャルを導入した。ただし、エカート型ポテンシャルがトンネル FET のポテンシャル分布を模擬するように、 $V_G = 0$ ,  $V_{SD} = V_g + \Delta E$  とした。ここで、 $V_g$  は、TBM から計算した系のバンドギャップ表す。 $\Delta E$  はトンネル窓であり、伝導帯と価電子帯がエネルギー的にどれだけ重なっているかを表す。

図 3.13(a) に透過関数のシミュレーション結果を示す。黒実線は TBM-NEGF, 赤破線は 1DEM-NEGF を用いて計算した透過関数である。もっとも誤差が大きいエネルギーにおいて、透過関数の相対誤差は 5.8% であった。1DEM-NEGF を用いて計算した透過関数は、TBM-NEGF の結果と比較的よく一致していることがわかる。

図 3.13(b) は、最大トンネル確率のトンネル距離  $\ell$  依存性を表す。ここで、最大トンネル確率は透過関数  $T(E)$  の最大値  $\max_E(T(E))$  とした。また、図 3.13(b) の挿入図に示すように、トンネル距離  $\ell$  は、トンネル窓の中央における価電子帯と伝導帯の距離を表す。図 3.13(b) には、 $h = 1.51$  nm の InAs 量子細線の結果も合わせて示した。InAs 量子細線について、TBM と 1DEM のバンド構造を図 3.12(b) に示す。1DEM-NEGF を用いて計算した最大トンネル確率は、TBM-NEGF の結果と比較的よく一致していることがわかる。

つぎに、最大 BTBT 電流  $I_{\max}$  を求めた。 $I_{\max}$  は透過関数  $T(E)$  を用いて、つぎの式から計算した。

$$I_{\max} = \frac{n_{\text{sp}} e}{\hbar} \int \frac{dE}{2\pi} T(E) \quad (3.83)$$

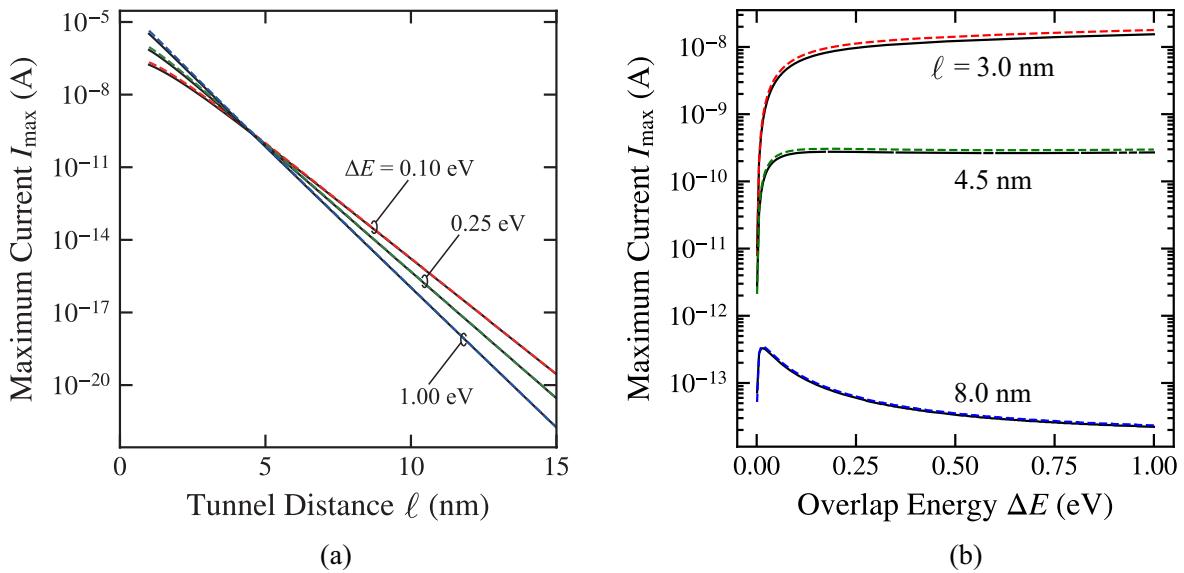


図 3.14: (a)  $h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線における、最大バンド間トンネル電流  $I_{\max}$  のトンネル距離  $\ell$  依存性。 $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく結果を実線で、 $N = 48$  の 1DEM に基づく結果を破線で示す。トンネル窓を  $\Delta E = 0.10, 0.25, 1.00$  eV とした結果をそれぞれ、赤線、緑線、青線で表す。(b)  $h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線における、最大バンド間トンネル電流  $I_{\max}$  のトンネル窓  $\Delta E$  依存性。 $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく結果を実線で、 $N = 48$  の 1DEM に基づく結果を破線で示す。トンネル距離を  $\ell = 3.0, 4.5, 8.0$  nm とした場合の結果をそれぞれ、赤線、緑線、青線で表す。

ここで、 $n_{\text{sp}} = 2$  はスピンの縮退度を表す。左側電極(ソース電極)の状態は電子で完全に占有され、右側電極(ドレイン電極)の状態は完全に空であると仮定した。電極の電子占有状態を考慮したBTBT電流は、式(3.83)よりも小さくなる。

$h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線の最大 BTBT 電流  $I_{\max}$  を計算した結果を述べる。図 3.12(a)において黒実線で表される  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM と、赤破線で表される  $N = 48$  の 1DEM とを用いて、それぞれ  $I_{\max}$  を計算した。

図 3.14(a) に、 $\Delta E = 0.10, 0.25, 1.00$  eV とした場合における  $I_{\max}$  のトンネル距離  $\ell$  依存性を示す。TBM-NEGF の結果は実線で、1DEM-NEGF の結果は破線で示す。 $I_{\max}$  はトンネル距離とともに指数関数的に減少することがわかる。1DEM は TBM の結果をよく再現しており、 $\ell$  の増加とともに  $I_{\max}$  の相対誤差は減少することがわかる。例えば、 $\ell = 5$  nm の場合、相対誤差  $|I_{\max}^{\text{EM}} - I_{\max}^{\text{TBM}}|/I_{\max}^{\text{TBM}}$  は約 10% である。一方、 $\ell = 15$  nm の場合、約 1% まで相対誤差が減少することがわかる。

この理由はつぎのように考えられる。トンネル距離  $\ell$  が短い場合、チャネル内のポテンシャル分布は急峻に変化する。そのため、電子がバンドギャップを通過して価電子帯から伝導帯へトンネルするとき、もっとも内側の減衰状態から外側の減衰状態へ遷移する確率が高くなると考えられる[38]。 $N = 48$  の 1DEM はもっとも内側の減衰状態のみを考慮して構築した[図 3.12(a) 参照]。したがって、トンネル距離  $\ell$  が短い場合には、 $I_{\max}$  の相対誤差が大きくなると考えられる。

図 3.14(b) に、 $I_{\max}$  の  $\Delta E$  依存性を示す。TBM-NEGF の結果は実線で、1DEM-NEGF の結

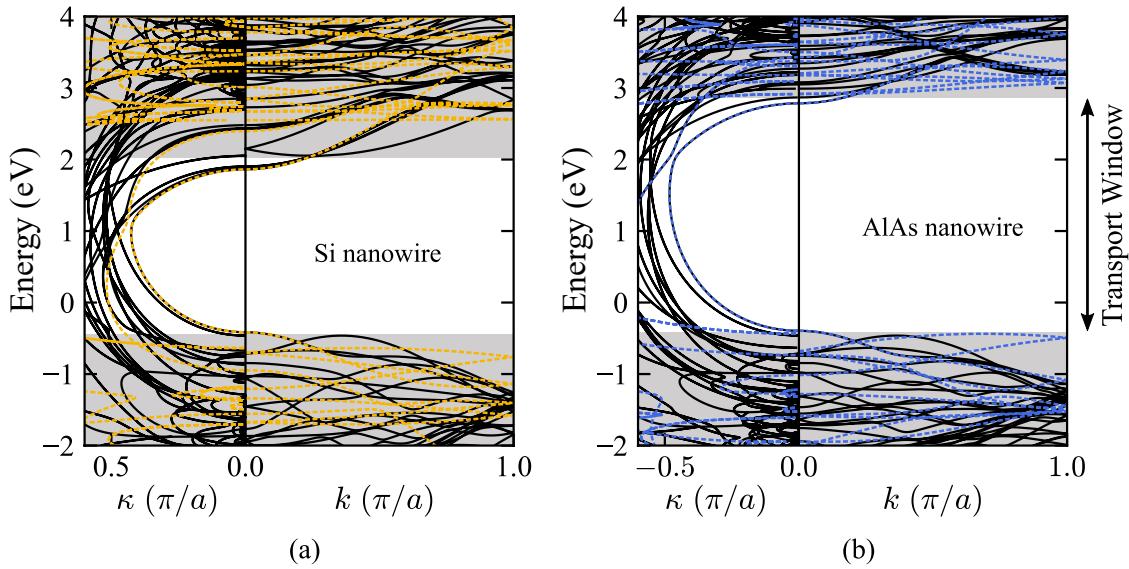


図 3.15: (a)  $h = 1.35$  nm の Si 量子細線のバンド構造 .  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく結果を実線で ,  $N = 48$  の 1DEM に基づく結果を破線で示す . (b)  $h = 1.41$  nm の AlAs 量子細線のバンド構造 .  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく結果を実線で ,  $N = 48$  の 1DEM に基づく結果を破線で示す .

果は破線で示す . 1DEM は TBM の  $I_{\text{max}}$  をよく再現していることがわかる .

### 3.5.4 間接遷移型半導体におけるバンド間輸送シミュレーション

3.5.3 節では , 直接遷移型半導体である GaAs および InAs からなる量子細線について 1DEM を構築し , バンド間輸送シミュレーションを行った . これに対して本節では , 間接遷移型半導体である Si および AlAs からなる量子細線について 1DEM を構築し , バンド間輸送シミュレーションを行った結果を述べる .

図 3.15(a) に ,  $h = 1.35$  nm の Si 量子細線のバンド構造を示す . 黒実線は  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM を用いて計算したバンド構造である . このバンド構造を再現するように 1DEM を構築した . 構築した  $N = 48$  の 1DEM のバンド構造を , 図 3.15(a) の破線に示す . 價電子帯と伝導帯をつなぐとともに内側の減衰状態がよく再現できていることがわかる .

つぎに , NEGF 法を用いて透過関数をシミュレーションした . 図 3.16(a) に , 透過関数  $T(E)$  のエネルギー依存性を示す . 黒実線および黄破線はそれぞれ , TBM-NEGF および 1DEM-NEGF を用いて計算した透過関数である . 両者の値は大きく異なることがわかる .

図 3.16(b) に , トンネル確率のトンネル距離依存性を示す . 図には AlAs , GaAs , InAs 量子細線の結果も合わせて示した . ただし , GaAs , InAs 量子細線については 3.5.3 節で構築した  $N = 48$  の 1DEM を用いた . AlAs 量子細線については , TBM と 1DEM のバンド構造を図 3.15(b) に示す .

図 3.16(b) より , 直接遷移型半導体 (GaAs , InAs) の場合では , 1DEM-NEGF の結果は TBM-

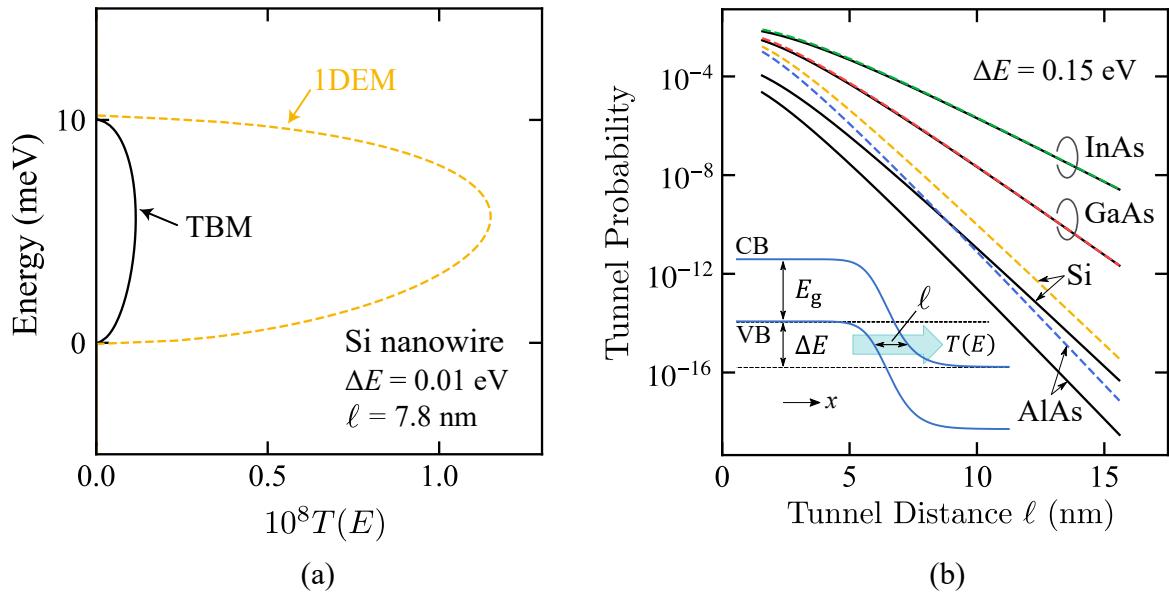


図 3.16: (a)  $h = 1.35 \text{ nm}$  の Si 量子細線のバンド間トンネル透過関数  $T(E)$  .  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく結果を実線で ,  $N = 48$  の 1DEM に基づく結果を黄破線で示す . (b) GaAs , InAs , Si , AlAs 量子細線におけるトンネル確率のトンネル距離  $\ell$  依存性 .  $N_{\text{TBM}} = 600$  の TBM に基づく結果を実線で ,  $N = 48$  の 1DEM に基づく結果を破線で示す . 挿入図は (a)(b) の計算においてチャネルに導入したエカート型ポテンシャルを表す .

NEGF の結果と精度良く一致していることがわかる . 一方 , 間接遷移型半導体 (Si , AlAs) の場合には , 1DEM-NEGF の結果は TBM-NEGF の結果と大きく異なることがわかる .

以上のように , 直接遷移型半導体と間接遷移型半導体では , 1DEM-NEGF を用いたバンド間輸送シミュレーションの精度が大きく異なる . この理由を , バルク結晶および量子細線構造の複素バンド構造から考察した .

図 3.17(a) にバルク Si のバンド構造 , (b) にバルク Si の  $\Gamma$ -X 方向の複素バンド構造 , (c) に  $h = 1.31 \text{ nm}$  の Si 量子細線の複素バンド構造を示す . 図 3.17(d) にバルク GaAs のバンド構造 , (e) にバルク GaAs の  $\Gamma$ -X 方向の複素バンド構造 , (f) に  $h = 1.41 \text{ nm}$  の GaAs 量子細線の複素バンド構造を示す . いずれも , スピン軌道相互作用を無視した最近接  $\text{sp}^3\text{d}^5\text{s}^* \text{TBM}$  を用いて計算した [35] . 各電子状態に対応する固有ベクトルのうち , p 軌道成分の割合をカラープロットしている . すなわち , 赤色のバンドは p 軌道由来のバンドで , 青色のバンドは主に s 軌道由来のバンドである<sup>\*1</sup> .

まず , 図 3.17(a)(d) を見ると , バルク Si とバルク GaAs の伝導帯は s 軌道由来 , 値電子帯は p 軌道由来であることがわかる . これは , 主要な半導体全般に見られる特徴である . つぎに , 図 3.17(b)(e) を見ると , バルク Si とバルク GaAs で複素バンド構造の性質が異なることがわかる .

バルク Si では ,  $\Gamma$  点にある値電子帯端から伸びる減衰状態は , 値電子帯から測って約 3.5 eV ほ

<sup>\*1</sup> 主にと書いたのは , TBM の基底として s 軌道と p 軌道だけではなく ,  $\text{s}^*$  軌道と d 軌道も考慮しているためである .

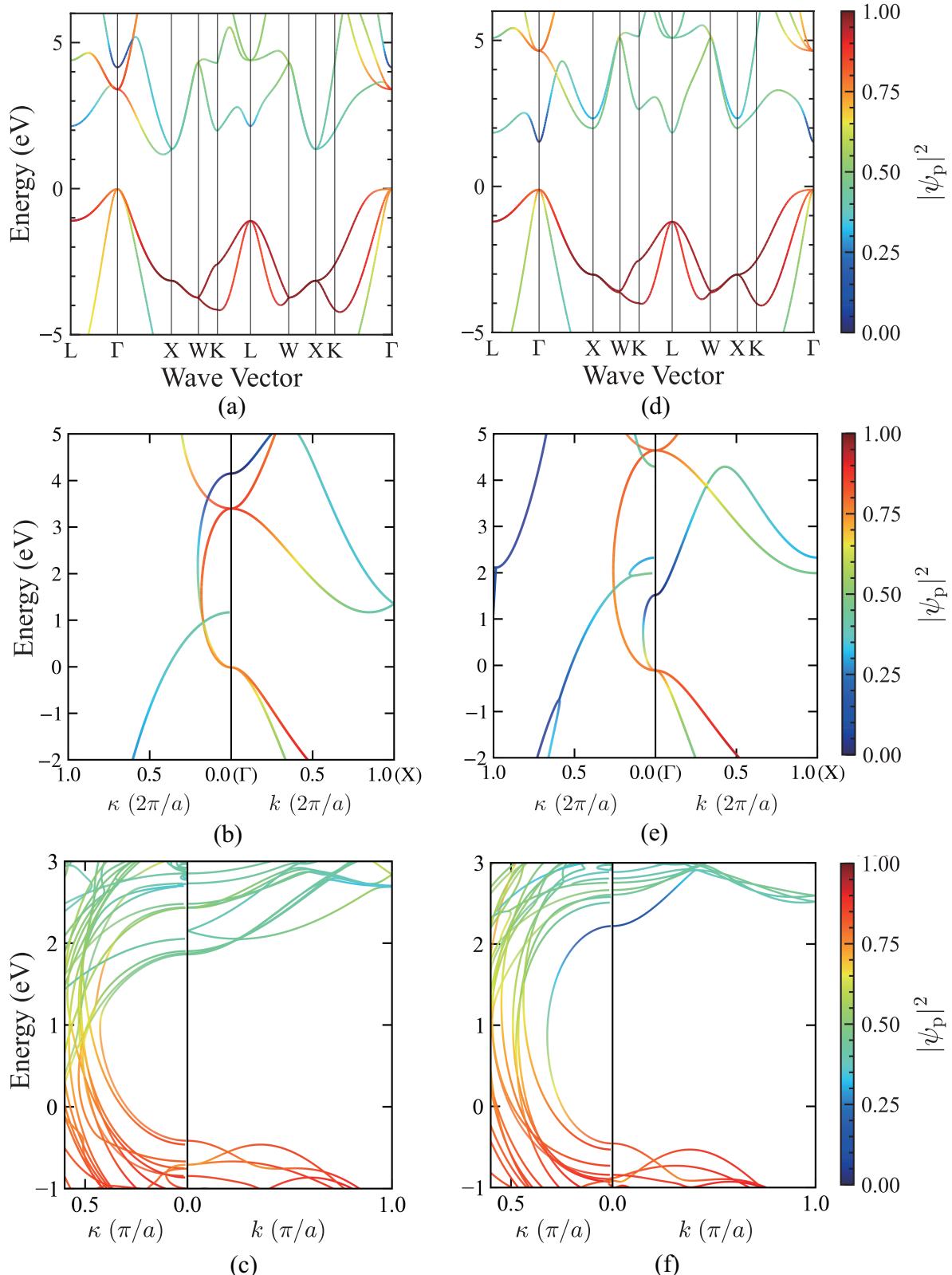


図 3.17: (a) バルク Si のバンド構造 . (b) バルク Si の  $\Gamma$ -X 方向の複素バンド構造 . (c)  $h = 1.31$  nm の Si 量子細線の複素バンド構造 . (d) バルク GaAs のバンド構造 . (e) バルク GaAs の  $\Gamma$ -X 方向の複素バンド構造 . (f)  $h = 1.41$  nm の GaAs 量子細線の複素バンド構造 . 線の色は p 軌道成分の割合を表す .

ど上にある伝導帯へと繋がっていることがわかる。したがって、約 1.1 eV 付近の伝導帯端から伸びる減衰状態とは接続していない。これは、バンドがどの軌道由来かを見ても明らかである。

一方、バルク GaAs では様相が異なる。バルク GaAs では、軽い正孔から伸びる減衰状態は、伝導帯端の状態と連続的に接続していることがわかる。これは、 $E-\kappa$  図の線の色からも明らかである。

このようなバルク結晶における減衰状態の性質を引き継いで、1次元系である量子細線構造でも、Si と GaAs では減衰状態の様相が異なる。図 3.17(c)(f) を見ると、Si 量子細線では、 $k = 0$  の価電子帯端から伸びる減衰状態は、エネルギーが 1.2 eV 付近でより外側の減衰状態と反交差した後、 $k = 0$  の伝導帯端に接続していることがわかる。一方、GaAs 量子細線では、 $k = 0$  の価電子帯端から伸びる減衰状態は  $k = 0$  の伝導帯端へと連続的に接続していることがわかる。

3.5.3 節で述べたように、直接遷移型半導体である GaAs および InAs からなる量子細線では、1DEM を用いてバンド間輸送シミュレーションを精度良く実行できる。しかし、間接遷移型半導体である Si および AlAs 量子細線では、1DEM 用いてバンド間輸送シミュレーションを精度良く実行できなかった。

図 3.17(f) に示すように、GaAs 量子細線では伝導帯と価電子帯が連続的に繋がっているため、このもっとも内側の減衰状態のみを 1DEM で表現すれば、精度良くバンド間輸送シミュレーションを行える。減衰状態の連続性から、トンネルしている電子は同じ減衰状態に留まると期待でき、このもっとも内側の減衰状態が BTBT に支配的な影響を与えると考えられる。

一方、図 3.17(c) に示すように、Si 量子細線では伝導帯と価電子帯とが連続的に繋がらず、反交差が見られる。トンネルしている電子は同じ減衰状態に留まることではなく、比較的高い確率でより外側の減衰状態に遷移すると考えられる。したがって、図 3.15 のように、もっとも内側の減衰状態のみを表現した 1DEM では、BTBT シミュレーションの誤差が大きくなると考えられる。付録 A に記すように、表現する減衰状態の数を増やすと、BTBT シミュレーションの精度は向上する考えられる。

### 3.6 まとめ

本研究では、高効率な量子輸送シミュレーションを実現するため、広いエネルギー範囲にわたるバンド構造から、バンドギャップ付近の輸送に関与するエネルギー範囲の状態を抽出する 1DEM を新規に開発した。1DEM では、輸送に関与しないバンド構造の情報を除くことで、ハミルトニアント行列サイズを小さくすることができる。そのため、1DEM を用いることでハミルトニアント行列に基づく量子輸送シミュレーションを高効率に実行できる。

1DEM では、サイズ  $N$  のハミルトニアント行列がもつ数学的に可能な最大の自由度（パラメータ）を活用して状態を抽出する。そのため、モデルパラメータの最適化には、多数のパラメータを効率的に最適化できる ADAM アルゴリズムを用いた。さらに、この自由度の高さに起因する非物理的な状態を除去するため、以下の 5 つのスキームを導入した。

1. モード分割法
2. バンド折返しありおよび位相シフト

3. 複素バンド構造に対するフィッティング
4. 空間反転対称性の考慮
5. 拡張された単位胞による位置情報の追加

開発した 1DEM を様々な半導体 1 次元構造に適用し、その性能を評価した。性能評価のリファレンスとして TBM を用いた。TBM から計算した広いエネルギー範囲にわたるバンド構造から、バンドギャップ付近の輸送に関するエネルギー範囲の状態を抽出し、1DEM を構築した。TBM と構築した 1DEM のバンド構造を比較した結果、1DEM がバンドギャップ付近の TBM の情報を、サイズの小さな行列で精度良く表現できることを確認した。

つぎに、TBM に基づく NEGF 法から計算した透過関数と 1DEM に基づく NEGF 法から計算した透過関数を比較した。バンド内輸送シミュレーションでは、1DEM-NEGF の結果が TBM-NEGF の結果と精度良く一致することが確認できた。具体的には、相対誤差数 % の範囲で、計算量はおよそ 1000 分の 1 程度に削減できた。

一方、バンド間輸送シミュレーションでは、直接遷移型半導体の場合、もっとも内側の減衰状態をフィッティングすることで、1DEM-NEGF の結果が TBM-NEGF の結果と精度良く一致することがわかった。

しかし、間接遷移型半導体の場合、もっとも内側の減衰状態をフィッティングしても、1DEM-NEGF の結果が TBM-NEGF の結果と精度良く一致しないことがわかった。これは、間接遷移型半導体では、もっとも内側の減衰状態だけでなく、外側の減衰状態もバンド間輸送現象に関与するためであると考えられる。

## 参考文献

- [1] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995).
- [2] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press (2005).
- [3] M. Di Ventra, *Electrical Transport in Nanoscale Systems*, Cambridge University Press (2008).
- [4] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer (2008).
- [5] M.V. Fischetti and W.G. Vandenberghe, *Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures*, Springer (2016).
- [6] M. Shin, W.J. Jeong, and J. Lee, “Density functional theory based simulations of silicon nanowire field effect transistors,” *J. Appl. Phys.*, **119**, 154505 (2016).
- [7] F. Ducry, M.H. Bani-Hashemian, and M. Luisier, “Hybrid Mode-Space–Real-Space Approximation for First-Principles Quantum Transport Simulation of Inhomogeneous Devices,” *Phys. Rev. Appl.*, **13**, 044067 (2020).
- [8] M.G. Pala, P. Giannozzi, and D. Esseni, “Unit cell restricted Bloch functions basis for first-principle transport models: Theory and application,” *Phys. Rev. B*, **102**, 045410

(2020).

- [9] M. Ye, X. Jiang, S.-S. Li, and L.-W. Wang, “Large-scale first-principles quantum transport simulations using plane wave basis set on high performance computing platforms,” *Comput. Phys. Commun.*, **260**, 107737 (2021).
- [10] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Equivalent transport models in atomistic quantum wires,” *Phys. Rev. B*, **85**, 035317 (2012).
- [11] M. Shin, “Hetero-structure mode space method for efficient device simulations,” *J. Appl. Phys.*, **130**, 104303 (2021).
- [12] J. Okada, F. Hashimoto, and N. Mori, “Reduction of order of device Hamiltonian with adaptive moment estimation,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **60**, SBBH08 (2021).
- [13] J. Okada, F. Hashimoto, and N. Mori, “Equivalent model for band-to-band tunneling simulation of direct-gap III–V semiconductor nanowires,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **60**, 091002 (2021).
- [14] R.P. Feynman, “Forces in molecules,” *Phys. Rev.*, **56**, 340 (1939).
- [15] <https://github.com/tensorflow/tensorflow>.
- [16] D.P. Kingma and J. Ba, “Adam: A Method for Stochastic Optimization,” arXive, 1412.6980 (2014).
- [17] R. Venugopal, Z. Ren, S. Datta, M. Lundstrom, and D. Jovanovic, “Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches,” *J. Appl. Phys.*, **92**, 3730 (2002).
- [18] H. Takeda and N. Mori, “Mode-Coupling Effects in Non-Equilibrium Green’s Function Device Simulation,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44**, 2664 (2005).
- [19] J.Z. Huang, W.C. Chew, J. Peng, C.-Y. Yam, L.J. Jiang, and G.-H. Chen, “Model Order Reduction for Multiband Quantum Transport Simulations and its Application to p-Type Junctionless Transistors,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **60**, 2111 (2013).
- [20] J.Z. Huang, L. Zhang, W.C. Chew, C.-Y. Yam, L.J. Jiang, G.-H. Chen, and M. Chan, “Model Order Reduction for Quantum Transport Simulation of Band-To-Band Tunneling Devices,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **61**, 561 (2014).
- [21] D. Mamaluy, M. Sabathil, and P. Vogl, “Efficient method for the calculation of ballistic quantum transport,” *J. Appl. Phys.*, **93**, 4628 (2003).
- [22] D. Mamaluy, D. Vasileska, M. Sabathil, T. Zibold, and P. Vogl, “Contact block reduction method for ballistic transport and carrier densities of open nanostructures,” *Phys. Rev. B*, **71**, 245321 (2005).
- [23] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Scattering basis representation in ballistic transport simulations of nanowire transistors,” *Math. Comput. Modell.*, **58**, 312 (2013).
- [24] Y.-C. Chang, “Complex band structures of zinc-blende materials,” *Phys. Rev. B*, **25**, 605 (1982).

[25] Ch. Schnittler and M. Kirilov, “Two-Band Models for the Complex Band Structure of III-V Semiconductors,” *Phys. Status Solidi B*, **173**, K19 (1992).

[26] X. Guan, D. Kim, K.C. Saraswat, and H.-S.P. Wong, “Complex Band Structures: From Parabolic to Elliptic Approximation,” *IEEE Electron Device Lett.*, **32**, 1296 (2011).

[27] L. Mathieu and K. Gerhard, “Simulation of nanowire tunneling transistors: From the wentzel kramers brillouin approximation to full-band phonon-assisted tunneling,” *J. Appl. Phys.*, **107**, 084507 (2010).

[28] C. Jacoboni, *Theory of Electron Transport in Semiconductors*, Springer (2010).

[29] 竹田 裕, “非平衡グリーン関数法を用いた極微細デバイスの量子輸送解析に関する研究,” 博士学位論文, 大阪大学 (2005).

[30] 三成 英樹, “原子論的手法に基づく量子輸送デバイスシミュレーション技術に関する研究,” 博士学位論文, 大阪大学 (2010).

[31] 橋本 風渡, “2次元材料結合系の電子状態および量子輸送解析に関する研究,” 博士学位論文, 大阪大学 (2020).

[32] P.A. Khomyakov, G. Brocks, V. Karpan, M. Zwierzycki, and P.J. Kelly, “Conductance calculations for quantum wires and interfaces: Mode matching and Green’s functions,” *Phys. Rev. B*, **72**, 035450 (2005).

[33] R. Lake, G. Klimeck, R.C. Bowen, and D. Jovanovic, “Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices,” *J. Appl. Phys.*, **81**, 7845 (1997).

[34] A. Svizhenko, M.P. Anantram, T.R. Govindan, B. Biegel, and R. Venugopal, “Two-dimensional quantum mechanical modeling of nanotransistors,” *J. Appl. Phys.*, **91**, 2343 (2002).

[35] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, “Empirical  $spds^*$  tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters,” *Phys. Rev. B*, **57**, 6493 (1998).

[36] M. Luisier, A. Schenk, W. Fichtner, and G. Klimeck, “Atomistic simulation of nanowires in the  $sp^3d^5s^*$  tight-binding formalism: From boundary conditions to strain calculations,” *Phys. Rev. B*, **74**, 205323 (2006).

[37] C. Eckart, “The penetration of a potential barrier by electrons,” *Phys. Rev.*, **35**, 1303 (1930).

[38] C. Zener and R.H. Fowler, “A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics,” *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **145**, 523 (1934).



## 第4章

# 半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱

### 4.1 はじめに

半導体ナノシート構造は、平面型 MOSFET や FinFET などの従来型トランジスタの微細化限界を打破する構造として期待されている [1, 2]。トランジスタの微細化において、ゲート制御性の向上は不可欠であり、そのための有力な手法としてチャネルの薄膜化が挙げられる。しかし、チャネルの薄膜化を進めるにつれて、半導体/酸化膜界面位置の乱れに起因するラフネス散乱強度が強くなり、それにともなうキャリア移動度の低下が懸念される [3–6]。また、極低温下で動作する CMOS 回路が量子コンピュータの制御回路として近年注目を集めている [7]。このような極低温下においては、フォノン数の減少により、ラフネス散乱が支配的な散乱過程となると考えられる。これらの理由から、ラフネス散乱がキャリア輸送に及ぼす影響を定量的に理解することが重要である。

これまで、摂動論と有効質量近似の枠組みのもと、摂動の行列要素を計算する手法が数多く検討されてきた [8–19]。Prange-Nee モデル [20] や一般化 Prange-Nee モデル [15] は、界面位置の変動に対して行列要素を線形化することで計算を簡略化している。これらは計算の簡便さもあり、モンテカルロデバイスシミュレーションなどと組み合わせて現在でも広く用いられている [21–24]。しかし、本来ラフネス散乱は界面位置変動に対して非線形な現象であり、線形化したモデルではその効果を正確に捉えることができないと指摘されている [25–28]。そのため、線形モデルを改良した非線形モデルが提案されている [25–28]。このように、摂動行列要素の正確なモデル化は依然として重要な課題である。

摂動論に基づくアプローチの妥当性を検討するためには、摂動論に依存しない信頼性の高いラフネス散乱の理論計算が必要である。そこで本研究では、摂動論によらない無秩序な 1 次元系の散乱理論に基づいた、半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱の数値解析手法を開発した。本章では、開発した手法の妥当性と有効性を検討した結果について説明する。

## 4.2 無秩序な1次元系の散乱理論

本節では、量子輸送シミュレーションの結果として得られる透過確率から、平均自由行程を抽出するために、本研究で開発した手法について説明する。開発した手法は、無秩序な1次元系の散乱理論に基づき、統計的な手続きにより平均自由行程を求めることができる。

### 4.2.1 メゾスコピック領域

古典物理学は日常的なマクロスケールの世界を記述する。一方、量子力学は原子や分子程度の大きさのミクロスケールの世界を記述する。伝統的には、半導体デバイス内の電子は半古典的な描像に従うものとして理解されてきた。しかし、現在では、この半古典的な描像を適用できないようなデバイスが実際に作製可能となっている。そのようなデバイスは、原子や分子のスケールよりも大きく、一方、半古典的な描像が適用できるスケールよりも小さい。このようなミクロ領域とマクロ領域との間の領域は、メゾスコピック領域と呼ばれる。

メゾスコピック領域では、系のスケールに応じて様々な輸送現象が表れる[29]。例えば、チャネル長が平均自由行程よりも十分短い場合、電極から注入されたキャリアはチャネル内を散乱されることなく通過する。このような輸送様式は弾道輸送と呼ばれる。また、着目している領域が位相緩和長よりも短い場合、量子干渉効果と呼ばれる電子の波としての性質がデバイス特性に現れる。

位相緩和はフォノン散乱などの非弾性散乱によって引き起こされるため、室温では量子干渉の効果を観測することは難しい。一方、ラフネス散乱や不純物散乱などの弾性散乱では位相緩和が起こらないと考えられるため、フォノン散乱が少ない低温下では量子干渉の効果が観測される。

実験とは異なり、シミュレーションでは解析したい散乱過程を選択的に考慮することができる。通常、キャリアにエネルギー変化を生じさせる非弾性散乱を考慮するには、異なるエネルギー間の相互作用を取り入れる必要があり、計算は複雑で計算量も多い[30]。一方、弾性散乱のみを考慮する場合、キャリアはエネルギー変化をともなわないと、計算は簡便で計算量も少ない。本章の量子輸送シミュレーションでは、非弾性散乱を含めることなくラフネス散乱のみを考慮する。そのため、キャリアは可干渉性を保ったまま、すなわち、コヒーレントに輸送すると仮定する。

### 4.2.2 アンダーソン局在

オームの法則によると、抵抗はチャネル長の増加に対して線形に増加する。この法則は、平均自由行程よりも位相緩和長が短い場合によく成り立つ。しかし、平均自由行程よりも位相緩和長が長い場合には、量子干渉効果のため、オームの法則が成り立たないことがある。例えば、チャネル長が局在長と呼ばれる長さを超えると、コンダクタンスは急激に低下することが知られている。

無秩序な系において、電子が量子干渉効果により局在化する現象はアンダーソン局在と呼ばれ、1958年にF.W. Andersonによって提唱された[31]。アンダーソン局在の解析には、グリーン関数、波動方程式、ランダム行列理論など、様々な理論的アプローチが用いられてきた[32-34]。後述す

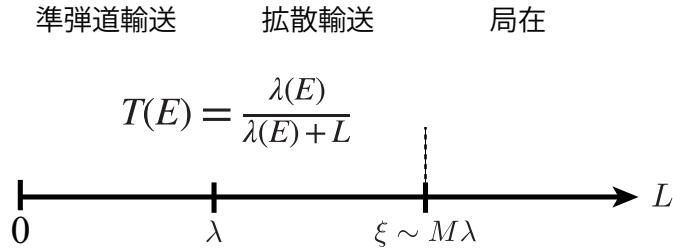


図 4.1: チャネル長  $L$  によるキャリア輸送領域の変化.  $\lambda$  は平均自由行程,  $\xi$  は局在長,  $M$  は輸送モード数を表す.

るようだ, アンダーソン局在の存在により, 位相緩和過程を考慮しないコヒーレントな量子輸送計算から平均自由行程や移動度などの輸送特性を抽出することは難しい.

散乱過程が電子輸送へ与える影響は, 緩和時間あるいは平均自由行程で特徴付けられ, それらは電子のエネルギー  $E$  の関数として表される. アンダーソン局在の影響が無視できる準弾道から拡散輸送領域において (図 4.1 参照), エネルギー  $E$  の電子が長さ  $L$  のチャネル領域を透過する確率  $T(E)$  は,

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{\lambda(E) + L} \quad (4.1)$$

と表される [35–38]. ここで,  $\lambda$  は後方散乱の平均自由行程であり, 輸送の平均自由行程  $\ell$  とは系の次元に応じた定数倍だけ異なる (1次元系の場合は  $\lambda = 2\ell$  [39], 付録 B 参照).

従来の数値計算手法では, 適当なバンド構造や散乱過程を仮定した系において, 透過確率  $T(E)$  のチャネル長  $L$  依存性を数値計算し, その結果を式 (4.1) にフィッティングすることで平均自由行程を抽出する [35–38]. 拡散輸送領域では,  $T(E)^{-1}$  は  $L$  に比例する (オームの法則) ため, 式 (4.1) を適用することができる. しかし, チャネル長  $L$  が局在長  $\xi$  を超えて局在領域に入ると,  $T(E)^{-1}$  は指数関数的に増加するため, 式 (4.1) は適用できなくなる [29, 31, 40–42].

局在長  $\xi$  は輸送に関与するモード数  $M$  を用いて  $\xi \sim M\lambda$  と見積もられる. そのため, チャネル断面が広く  $M$  が大きい場合や, 散乱が弱く  $\lambda$  が長い場合は, 局在長  $\xi$  が長くなり, 幅広いチャネル長の範囲 ( $L < M\lambda \sim \xi$ ) で式 (4.1) を適用できる (図 4.1 参照).

しかし, 極薄膜ナノシート構造では, 量子閉じ込め効果が強くなるため, モード数  $M$  は数個程度と少なくなり, さらに散乱強度が増加することから  $\lambda$  も短くなる. したがって, 局在長  $\xi$  が短くなるため, 式 (4.1) を適用できる  $L$  の範囲が制限され, 従来手法に基づいて  $\lambda$  を高精度に抽出することは困難になる.

これらの問題は, 透過確率  $T(E)$  の計算のさいにフォノン散乱などの非弾性散乱を導入することで回避できるものの, 計算量が大幅に増加する. さらに, ラフネス散乱に起因する平均自由行程のみを抽出するには, マティーセン則などの仮定が追加で必要であるという課題も残る [43].

以上の背景のもと本研究では, 単一モード ( $M = 1$ ) 半導体ナノシートについて, ラフネス散乱のみを考慮したコヒーレントな量子輸送シミュレーションの結果から, ラフネス散乱で決まる平均自由行程を抽出する手法を開発した [44]. 本開発手法は式 (4.1) を拡張したものであり,  $L < \xi$  の領域のみならず, 式 (4.1) では考慮できない  $L > \xi$  の領域にも適用可能であることを示す.

### 4.2.3 無次元抵抗 $\rho$ の分布関数

单一モードの1次元系を考える。キャリア輸送はコヒーレントで、非弾性散乱がないと仮定する。この仮定は、散乱過程としてラフネス散乱のみを考える場合は正しい。無次元化した抵抗  $\rho(E)$  は透過率  $T(E)$  の逆数で与えられる [45]。

$$\rho(E) = \frac{1}{T(E)} \quad (4.2)$$

煩雑さを避けるため、以降では引数のエネルギー  $E$  を省略して、 $\rho = 1/T$  と表す。チャネル長  $L$  が 0 の極限で  $T \rightarrow 1$  となることから、その極限で  $\rho \rightarrow 1$  となる。

後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  を用いて無次元化したチャネル長を  $s = L/\lambda$  とする。無次元化したチャネル長が  $s$  である無秩序な1次元系の集団について、 $\rho$  の分布関数  $F$  は、つぎの式で与えられる [42]。

$$F(\rho, s) = \frac{2}{(\pi s^3)^{1/2}} \int_{\operatorname{acosh} \sqrt{\rho}}^{\infty} \frac{x \exp[-(x^2/s + s/4)]}{(\cosh^2 x - \rho)^{1/2}} dx \quad (4.3)$$

ここで、 $s$  は分布関数  $F$  のパラメータである。 $F(\rho, s)$  は、つぎのように規格化されている。

$$\int_1^{\infty} F(\rho, s) d\rho = 1 \quad (4.4)$$

また、無次元抵抗の対数  $z = \log \rho$  に関する分布関数  $f(z, s)$  は、

$$\int_1^{\infty} F(\rho, s) d\rho = \int_0^{\infty} F(e^z, s) \frac{d\rho}{dz} dz = \int_0^{\infty} F(e^z, s) e^z dz \quad (4.5)$$

より、つぎの式で与えられる。

$$f(z, s) = F(e^z, s) e^z \quad (4.6)$$

さらに、無次元抵抗  $\rho$  およびその対数  $z = \log \rho$  の平均は、解析的に求められ、

$$\langle \rho \rangle = \int_1^{\infty} \rho F(\rho, s) d\rho = \frac{1}{2} (e^{2s} + 1) \quad (4.7)$$

$$\langle \log \rho \rangle = \int_1^{\infty} \log \rho F(\rho, s) d\rho = s = \frac{L}{\lambda} \quad (4.8)$$

となる。

$s \rightarrow 0$  の極限で、 $F(\rho, s)$  は、

$$F(\rho, s) \rightarrow \delta(\rho - 1) \quad (4.9)$$

となる。この極限では、電子は全く散乱されることなくチャネルを透過する。一方、 $\log \rho \rightarrow \infty$  の極限では、

$$F(\rho, s) \rightarrow F_{\infty}(\rho, s) = \frac{\alpha}{(\pi \rho s)^{1/2}} \frac{\Gamma^2(\alpha + \frac{1}{2})}{\Gamma(2\alpha + 1)} \exp[-(\alpha^2 + \frac{1}{4})s] \quad (4.10)$$

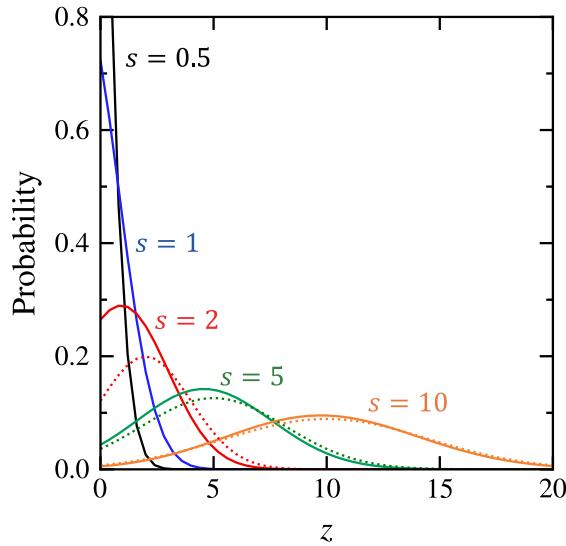


図 4.2: 無次元化したチャネル長  $s = L/\lambda = 0.5, 1, 2, 5, 10$  の 1 次元系の集団における分布関数  $f(z, s)$  . 点線は近似式  $f_\infty(z, s)$  .

となる . ここで ,  $\alpha = \log \rho / 2s$  とおいた . さらに ,  $f_\infty(z, s) = F_\infty(e^z, s) e^z$  は以下のように平均値が  $s$  , 標準偏差が  $\sqrt{2s}$  の正規分布に近似できる .

$$f_\infty(z, s) = \frac{1}{2(\pi s)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{(z - s)^2}{4s} \right] \quad (4.11)$$

したがって ,  $\log \rho$  の相対的なゆらぎ幅 (= 標準偏差 / 平均値) は  $(2/s)^{1/2}$  となり , 無次元化したチャネル長  $s$  の増加にともなって , 相対的なゆらぎ幅は小さくなる .

以上のように , 無次元化したチャネル長が  $s$  である無秩序な 1 次元系の集団において , 無次元化した抵抗  $\rho$  ではなく , その対数  $z = \log \rho$  の方が統計的性質が優れている [45] . そのため , 本論文では  $\rho$  ではなく  $\log \rho$  に着目する .

図 4.2 に  $\log \rho$  の分布  $f(z, s)$  の例を示す . 無次元化したチャネル長  $s = 0.5, 1, 2, 5, 10$  として , 式 (4.6) から計算した結果を実線でプロットした . また ,  $s = 2, 5, 10$  の場合について , 近似式  $f_\infty(z, s)$  を点線でプロットした .  $s$  が大きい場合 , 式 (4.11) の正規分布で分布  $f(z, s)$  をよく近似できていることがわかる .

#### 4.2.4 量子輸送計算の結果から平均自由行程を抽出する方法

無次元化したチャネル長が  $s$  の無秩序な 1 次元系の集団において , 無次元抵抗  $\rho$  の分布は式 (4.3) で与えられる . また , チャネル長  $L$  , 後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  ,  $\log \rho$  の平均には , 式 (4.8) より ,

$$\lambda = \frac{L}{\langle \log \rho \rangle} \quad (4.12)$$

なる関係がある . ラフネスが存在するナノシート構造を無秩序な 1 次元系とみなすことで , 以下のように量子輸送計算の結果から平均自由行程を抽出できる .

はじめに、巨視的には同一の構造でありながら、微視的には異なる多数のサンプルについて、透過確率  $T$  を計算する。つぎに、その計算結果から  $\log \rho (= -\log T)$  の試料平均  $\langle \log \rho \rangle$  を求める。 $L$  の値は既知であるため、式(4.12)より、後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  を計算できる。

この手法は、式(4.1)に基づく従来手法の拡張と考えられる。なぜなら、 $L/\lambda \rightarrow 0$  の極限で式(4.1)は、 $\log(T^{-1}) = \log(1 + L/\lambda) = L/\lambda$  となり、式(4.12)と一致するからである。

後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  から輸送の平均自由行程  $\ell$  への換算は、付録Bで示すように、つきの式を用いる。

$$\ell = \frac{\lambda}{2} \quad (4.13)$$

## 4.3 シミュレーション結果

4.2節では、コヒーレントな量子輸送シミュレーションの結果から、ラフネス散乱に起因する平均自由行程を抽出する方法を述べた。本節では、この手法をラフネスをもつナノシート構造に用いた結果を述べる。

### 4.3.1 ラフネスパターンの生成

ラフネス散乱を量子輸送計算へ取り入れるために、実空間上でデバイスの表面に凸凹を設定した(図4.5参照)。実際のデバイスにおいて、ラフネスパターンは定常でランダムに生じると考えられる。したがって、ラフネスパターンはその自己相関関数、あるいはそれをフーリエ変換したパワースペクトル密度で特徴づけられる。

自己相関関数の関数形として、ガウス型と指数関数型の2つがよく仮定される[9, 10]。位置  $\mathbf{r} = (x, y)$  における界面垂直方向の変位を  $\Delta(\mathbf{r})$ 、 $xy$  方向の試料の面積を  $A$  とすると、自己相関関数  $C_R(\mathbf{r})$  は、

$$C_R(\mathbf{r}) = \frac{1}{A} \int \Delta(\mathbf{r}') \Delta(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) d\mathbf{r}' \quad (4.14)$$

と定義され、

$$C_R(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Delta^2 \exp\left(-\frac{r^2}{\Lambda^2}\right) & (\text{ガウス型}) \end{cases} \quad (4.15)$$

$$C_R(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Delta^2 \exp\left(-\frac{\sqrt{2}r}{\Lambda}\right) & (\text{指数関数型}) \end{cases} \quad (4.16)$$

なる関数形が用いられる。ここで、 $\Delta$  は凸凹の界面と垂直方向の平均的な変位を、 $\Lambda$  は界面と平行な方向の凸凹の平均的な間隔を表すパラメータであり、それぞれ、ラフネス高さ、ラフネス相関長と呼ばれる。

ウィーナー・ヒンチンの定理より、パワースペクトル密度  $S_R(\mathbf{q}) = |\Delta(\mathbf{q})|^2/A$  は、自己相関関数のフーリエ変換と等しい。

$$S_R(\mathbf{q}) = \int C_R(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (4.17)$$

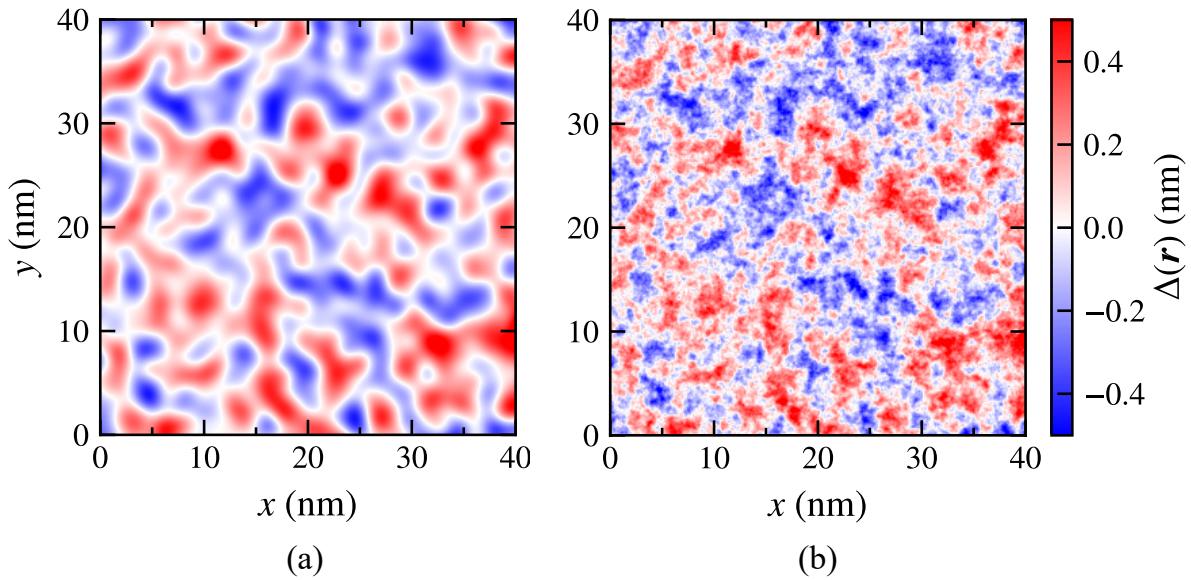


図 4.3: (a) ではガウス型 , (b) では指数関数型の自己相関関数をそれぞれ仮定し , 亂数から生成したラフネス  $\Delta(\mathbf{r})$  . ラフネス高さ  $\Delta = 0.2$  nm , ラフネス相関長  $\Lambda = 2.0$  nm とした .

したがって , ガウス型・指数関数型の自己相関関数を仮定した場合 ,

$$S_R(\mathbf{q}) = \begin{cases} \pi \Delta^2 \Lambda^2 \exp\left(-\frac{q^2 \Lambda^2}{4}\right) & \text{(ガウス型)} \\ \pi \Delta^2 \Lambda^2 \exp\left(1 + \frac{q^2 \Lambda^2}{2}\right)^{-3/2} & \text{(指数関数型)} \end{cases} \quad (4.18)$$

$$(4.19)$$

となる .

パワースペクトル密度の定義より , 適当な位相因子  $e^{i\nu(\mathbf{q})}$  を用いて ,

$$\Delta(\mathbf{q}) = \sqrt{A} \sqrt{S_R(\mathbf{q})} e^{i\nu(\mathbf{q})} \quad (4.20)$$

と表せる . これより , 位相因子を乱数から適当に決定し ,  $\Delta(\mathbf{q})$  を逆フーリエ変換することで , 実空間上でのラフネスパターン  $\Delta(\mathbf{r})$  をランダムに生成できる .

図 4.3 に乱数から生成したラフネスパターンの例を示す . 図 4.3(a) ではガウス型 , (b) では指数関数型の自己相関関数を仮定した . ラフネス高さを  $\Delta = 0.2$  nm , ラフネス相関長を  $\Lambda = 2.0$  nm とした . 図 4.3 より , 指数関数型のラフネスパターンは , ガウス型のラフネスパターンよりも , 短波長成分を多く含んでいることがわかる . 実際 , 図 4.4 からわかるように , 指数関数型のパワースペクトル密度 (赤線) は , ガウス型のパワースペクトル密度 (青線) よりも , 短波長領域での減衰がゆるやかである .

### 4.3.2 計算モデル

4.2.4 節で説明した手法の妥当性と有効性を検証するために , 等方的な有効質量近似のもと , ラフネスをもつ単一モード半導体ナノシートについて数値計算を行った . 本手法は , より現実的なバン

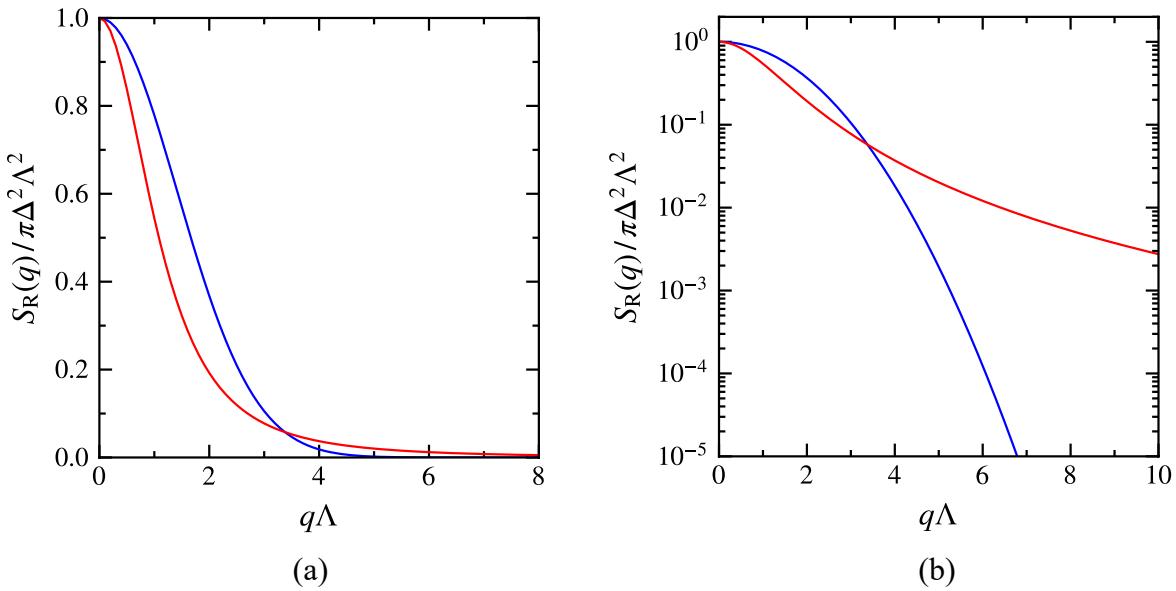


図 4.4: パワースペクトル密度  $S_R(q)$  . (a) は線形軸 , (b) は対数軸 . 青線はガウス型 , 赤線は指数関数型の自己相関関数をそれぞれ仮定した場合を表す .

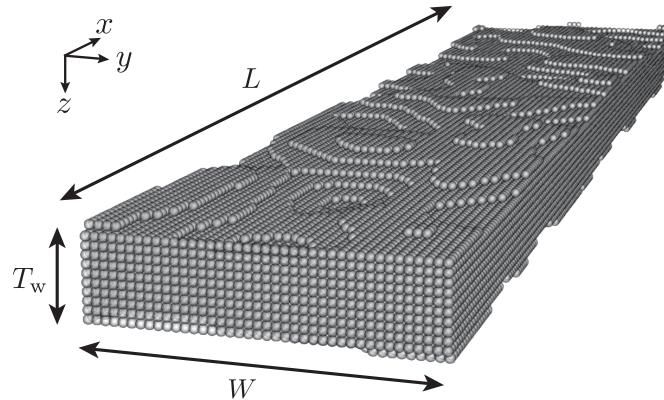


図 4.5: シミュレーションした半導体ナノシートの模式図 . チャネル長を  $L$  , チャネル幅を  $W$  , ラフネスのない場合のチャネル厚さを  $T_w$  とする . チャネル両端には半無限電極を取り付けた (図では省略) . 上下面にのみラフネスを設定した .

ド構造やデバイス構造を考慮可能であるが, 平均自由行程についてよく知られた摂動論に基づく解析結果 [17] との比較を行うために, 単純なバンド構造を想定した .

図 4.5 にシミュレーションした半導体ナノシートの模式図を示す . チャネル長を  $L$  , チャネル幅を  $W$  とし , ラフネスのない場合のチャネル厚さを  $T_w$  とする . チャネルの両端には ,  $W \times T_w$  の断面をもつ半無限電極を接続した (図には示されていない) . チャネルの上面と下面にそれぞれラフネス  $\Delta(\mathbf{r})$  ( $\mathbf{r} = (x, y)$ ) を設定した . そのさい , ラフネスパターンはガウス型の自己相関関数 ,

$$\langle \Delta(\mathbf{r})\Delta(\mathbf{r}') \rangle = \Delta^2 \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{\Lambda^2}\right) \quad (4.21)$$

を満たすように乱数を用いてランダムに生成した。ここで、 $\langle \cdots \rangle$  は試料平均 [46] であり、 $\Delta$  および  $\Lambda$  は、それぞれ、ラフネスの高さおよび相関長である。上下面のラフネスは無相関とした。

$y$  軸方向と  $z$  軸方向の運動は量子化されサブバンドを形成するが、本研究では室温の熱エネルギー  $E = kT = 25.58 \text{ meV}$  ( $T = 300 \text{ K}$ ) において、 $M = 1$  となるよう  $W, T_w$  の値を設定した。電子状態については、等方的な有効質量  $m^* = 0.2 m_0$  を仮定し、表面での波動関数が 0 となる境界条件を課した。

以上の系を  $z$  軸方向に  $0.1 \text{ nm}$ ,  $x$  軸および  $y$  軸方向に  $0.2 \text{ nm}$  の間隔で離散化し、有効質量方程式を強結合近似モデル [29] に変換した後、オープンソースの量子輸送シミュレータである Kwant [47] を用いて透過確率  $T(E)$  を計算した。そのさい、ある巨視的なパラメータの組  $\{L, W, T_w, \Delta, \Lambda\}$  に対して、 $N \sim 10,000$  個のラフネスパターンが異なるサンプルを用意し、 $N$  個の透過確率  $T_i(E)$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) をシミュレーションから求めた。その結果より、無次元化したチャネル長  $s (= L/\lambda)$  を、試料平均  $\hat{s} = \sum_i \log \rho_i / N = -\sum_i \log T_i / N$  から推定した。ここで、母集団の真のパラメータ  $s$  と有限のサンプルから推定したパラメータを区別するため、推定したパラメータは  $\hat{s}$  としている。

#### 4.3.3 量子輸送計算から得た $\log \rho$ の分布と理論分布との比較

無次元抵抗  $z = \log \rho$  の分布について調べた。 $E = kT = 25.58 \text{ meV}$  ( $T = 300 \text{ K}$ ),  $W = 10 \text{ nm}$ ,  $\Delta = 0.2 \text{ nm}$ ,  $\Lambda = 2.0 \text{ nm}$  の場合に、シミュレーションから求めた  $z$  ( $= \log \rho$ ) の分布と理論分布  $f(z, \hat{s})$  との比較を図 4.6 に示す。シミュレーションから得られた分布をヒストグラムで、理論分布を黒線で表した。チャネル長  $L$  を  $80, 100, 120 \text{ nm}$ , チャネル厚さ  $T_w$  を  $2.0, 3.7, 4.5 \text{ nm}$  と変化させた場合の結果を示す。

$T_w \geq 3.7 \text{ nm}$  程度の厚いナノシート [図 4.6(a)–(f)] では、シミュレーション結果と理論分布はよく一致していることがわかる。一方、 $T_w \leq 2.0 \text{ nm}$  程度の薄いナノシート [図 4.6(g)–(i)] では、シミュレーション結果と理論分布はわずかに異なり、シミュレーションした分布は理論分布  $f(z, \hat{s})$  に比べてわずかに大きな分散をもつことがわかる。この理由は、薄膜のような強散乱領域では、散乱に起因する自己エネルギーの実部により、分散関係が変化するからかもしれない。しかし、平均自由行程抽出に必要なパラメータである  $\hat{s}$  のチャネル長  $L$  依存性は、4.3.4 節で示すように、薄いナノシートであっても式 (4.12) と一致し、このわずかに大きな分散は  $\lambda$  の抽出に大きな影響を与えない。

#### 4.3.4 $\hat{s}$ のチャネル長依存性

シミュレーションから推定した  $\hat{s}$  のチャネル長  $L$  依存性を調べた。式 (4.12) より、

$$\hat{s} = \frac{L}{\lambda} \quad (4.22)$$

となる。平均自由行程  $\lambda$  はチャネル長  $L$  に依存しない物理量であると考えられる。そのため、式 (4.22) より、 $\hat{s}$ - $L$  グラフは原点を通る直線となると考えられる。これを実際にシミュレーション

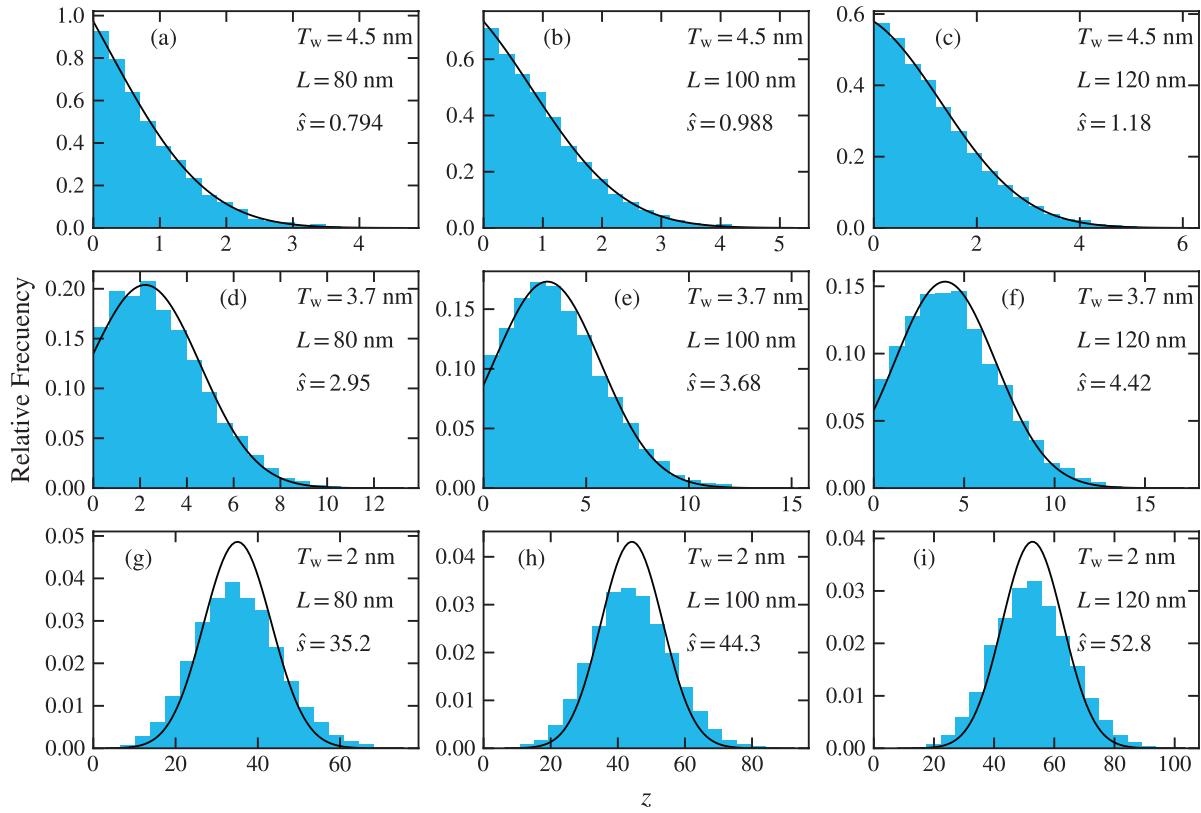


図 4.6: シミュレーションから求めた  $z$  ( $= \log \rho$ ) の分布 (ヒストグラム).  $W = 10 \text{ nm}$ ,  $\Delta = 0.2 \text{ nm}$ ,  $\Lambda = 2.0 \text{ nm}$ ,  $E = 25.58 \text{ meV}$  の場合. 上段 (a, b, c), 中段 (d, e, f), 下段 (g, h, i) は, それぞれ, チャネル厚さ  $T_w = 4.5, 3.7, 2.0 \text{ nm}$  の結果. 左列 (a, d, g), 中央列 (b, e, h), 右列 (c, f, i) は, それぞれ, チャネル長  $L = 80, 100, 120 \text{ nm}$  の結果. 黒線は  $N \sim 10,000$  個のサンプルから推定した  $\hat{s}$  ( $= -\sum_i \log T_i / N$ ) に基づく理論分布  $f(z, \hat{s})$ . 得られた  $\hat{s}$  の値は図中に示した.

結果から確認した.

図 4.7 に,  $T_w = 2.0 \text{ nm}$  の場合において, シミュレーションから推定した  $\hat{s}$  の  $L$  依存性を示す. 上段は両対数, 下段は原点付近における線形プロットである.  $\hat{s}$  が  $2 \sim 1,000 \text{ nm}$  と広い  $L$  の範囲で原点を通る直線に乗ることがわかる. 式 (4.22) より, この直線の傾きから, 平均自由行程  $\lambda$  を抽出できる. 平均自由行程は, あるチャネル長  $L$  の結果のみから抽出することもできるが, サンプル数が有限であることにともなうばらつきを抑制するため,  $L$  依存性の傾きから平均自由行程を抽出した.

シミュレーションから得た傾きより,  $\lambda = 2.2 \text{ nm}$  が得られた. したがって, このような極薄膜ナノシートの場合, 局在長は  $\xi \sim M\lambda = 2.2 \text{ nm}$  程度となり  $L < \xi$  の領域は極端に短くなるため, 従来の式 (4.1) に基づく手法では平均自由行程の抽出は困難である. 一方, 本開発手法では,  $L > \xi$  の領域から平均自由行程の抽出が可能であることがわかる.

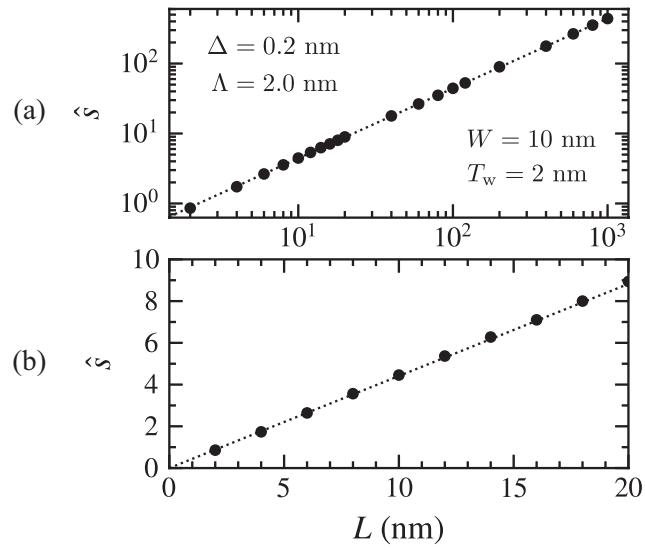


図 4.7: シミュレーションから推定した  $\hat{s}$  の  $L$  依存性 .  $W = 10$  nm ,  $T_w = 2$  nm ,  $\Delta = 0.2$  nm ,  $\Lambda = 2.0$  nm ,  $E = 25.58$  meV の場合 . (a) は広い領域にわたる両対数プロット , (b) は原点付近における線形プロット .

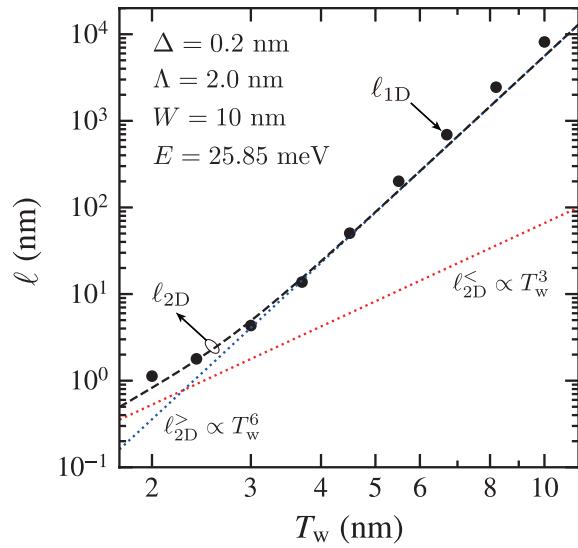


図 4.8: 輸送の平均自由行程のチャネル膜厚  $T_w$  依存性 . 黒点は , 本開発手法を用いて抽出した平均自由行程  $\ell_{1D}$  . 黒破線は , 自己無撞着ボルン近似を用いて計算した , 井戸幅  $T_w$  の無限量子井戸に閉じ込められた 2 次元電子ガスの平均自由行程  $\ell_{2D}$  . 点線はその漸近線  $\ell_{2D}^>$  .

### 4.3.5 平均自由行程の膜厚依存性

本開発手法を用いて、輸送の平均自由行程  $\ell_{1D}(E)$  ( $= \lambda(E)/2$ ) のチャネル厚さ  $T_w$  依存性を求めた結果について述べる。図4.8に、 $W = 10\text{ nm}$ ,  $\Delta = 0.2\text{ nm}$ ,  $\Lambda = 2.0\text{ nm}$ ,  $E = 25.58\text{ meV}$  の場合の結果を示す。黒丸は本開発手法から抽出した平均自由行程  $\ell_{1D}$  の  $T_w$  依存性を表す。 $T_w \gtrsim 5\text{ nm}$  程度とチャネルが厚い場合、 $\ell_{1D}$  は、よく知られた  $T_w^6$  に比例するという解析式 [17] と同様の依存性を示すことがわかる。

井戸幅  $T_w$  の無限量子井戸に閉じ込められた2次元電子ガス(2DEG)について、輸送の平均自由行程  $\ell_{2D}^>$  をボルン近似を用いて計算すると、つぎの式が得られる(付録C参照)。

$$\ell_{2D}^>(E) = v(E) \frac{m^* T_w^6}{2\pi^5 \hbar \Delta^2 \Lambda^2} [e^{-\eta} \{I_0(\eta) - I_1(\eta)\}]^{-1} \quad (4.23)$$

ここで、 $\eta = m^* E \Lambda^2 / \hbar^2$ ,  $v(E)$  はエネルギー  $E$  の電子の速さ ( $= \{2E/m^*\}^{1/2}$ ),  $I_n$  ( $n = 0, 1$ ) は第1種変形ベッセル関数 [48] を表す。参考のため、この  $\ell_{2D}^>$  を図4.8に青点線でプロットした<sup>\*1</sup>。

このようなチャネルが厚い場合に対して、 $T_w \lesssim 3\text{ nm}$  程度とチャネルが薄い場合、 $\ell_{1D}$  は、 $T_w^6$  よりも弱い依存性を示すことがわかる。これは、薄膜化にともなうラフネス散乱強度の増加により、エネルギー準位に不確定性が生じるためであると考えられる。このような効果は、衝突広がり [17, 49] として知られており、半古典的な電子輸送計算ではほとんど無視される。ボルン近似では散乱強度は十分に弱いと仮定されており、散乱前後のエネルギー保存則をデルタ関数を用いて記述する。しかし、 $T_w$  が薄くなるにつれてラフネス散乱強度は増加し、ボルン近似の散乱強度が十分に弱いという仮定が成り立たなくなる。そのため、薄膜領域において、 $\ell_{2D}^>$ (青点線)の依存性は  $\ell_{1D}$ (黒点)の依存性と大きく乖離したと考えられる。

散乱によるエネルギー準位の広がりの効果を取り入れる方法の一つとして、自己無撞着ボルン近似がある [50]。図4.8に、自己無撞着ボルン近似から計算した2DEGの平均自由行程  $\ell_{2D}$  を黒破線で示す(付録C参照)。また、 $T_w \rightarrow 0$  での漸近線、

$$\ell_{2D}^<(E) = v(E) \frac{m^* T_w^3}{\sqrt{2} 2\pi^2 \hbar \Delta} \quad (4.24)$$

を赤点線で合わせてプロットした。 $T_w \gtrsim 3\text{ nm}$  程度のチャネルが厚い範囲では、ボルン近似の結果  $\ell_{2D}^>$ (青点線)と自己無撞着ボルン近似の結果  $\ell_{2D}$ (黒破線)は一致していることがわかる。一方、チャネル膜厚が薄くなると、散乱強度が強くなりエネルギー準位の広がりの影響が大きくなるため、両者は異なる依存性を示すようになる。

本開発手法を用いて抽出した平均自由行程の  $T_w$  依存性は、自己無撞着ボルン近似の結果と同様の傾向を示すことがわかる。以上のように、最低次の摂動論に基づく解析が適さない場合でも、本開発手法を用いることにより、ラフネス散乱で決まる平均自由行程を抽出可能であることがわかる。

<sup>\*1</sup> 図4.8において、 $\ell_{1D}$  と  $\ell_{2D}^>$  は  $E$  や  $T_w$  などのパラメータに対して異なる依存性をもつ( $\ell_{2D}^>$  は定義より  $W$  依存性はない)。そのため、他の計算条件では  $\ell_{1D}$  と  $\ell_{2D}^>$  の絶対値は一致しない可能性がある点に注意。

なお，エネルギー準位の広がりによる効果が大きくなり， $T_w$  依存性が 6 乗から変化するチャネル厚さ  $T_w$  は，図 4.8 では 3 nm 程度であるが，用いる有効質量の値や異方性・非放物線性の効果などによって，この値は変化する．そのため，特定の材料のナノシートを考えるさいには，その材料のバンド構造をより詳細に記述できるモデルを導入してシミュレーションを実行する必要がある．

## 4.4 まとめ

本研究では，单一モードのナノシート構造における量子輸送シミュレーション結果から平均自由行程を高効率に抽出する手法を開発した．この手法は，無秩序な 1 次元系の散乱理論に基づき，統計的な手続きから平均自由行程を求めることができる．具体的な手順は以下のとおりである．

1. 乱数より生成した異なるラフネスパターンをもつナノシート構造を多数用意する．
2. 各ナノシート構造に対してコヒーレントな量子輸送シミュレーションを実行し，透過確率  $T$  を計算する．
3. 透過確率の逆数  $\rho = T^{-1}$  について試料平均  $\langle \log \rho \rangle$  を計算し， $\langle \log \rho \rangle$  とチャネル長  $L$  を用いて後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  を式 (4.12) により求める．
4. 後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  を輸送の平均自由行程  $\ell$  に換算する場合には式 (4.13) を用いる．

本開発手法は，従来手法がチャネル長  $L$  の短い領域でしか適用できなかった問題を克服し， $L$  の長さに依存せず適用可能である．また，アンダーソン局在の影響を取り除くために非弾性散乱を追加で考慮する必要がなく，高速な計算が可能である．さらに，電極領域とチャネル領域を明示的に分割する必要がある量子輸送シミュレーションから，電極領域に依存しないバルク的な物理量を計算することができる．

本開発手法の妥当性と有効性を検証するため，等方的な有効質量近似に基づき，ラフネスをもつ单一モードのナノシート構造のシミュレーションを行った．本開発手法を用いて，平均自由行程のナノシート厚さ  $T_w$  依存性を調べた結果， $T_w$  が厚い場合には  $T_w^6$  の依存性を示し，薄い場合には依存性が弱くなることがわかった．

つぎに， $T_w$  依存性が  $T_w^6$  から変化する理由を考察した．従来のボルン近似に基づく計算では，散乱強度は十分に弱いと仮定され，エネルギー保存則をデルタ関数で表す．しかし， $T_w$  が薄くなるとラフネス散乱強度が増加するため，この仮定は適用できなくなる．そこで，強散乱領域におけるエネルギー準位の広がりの影響を自己無撞着ボルン近似で解析したところ，薄い領域では平均自由行程の依存性が弱くなることが示された．この結果は，本開発手法による結果と整合しており，本手法がボルン近似のような単純な摂動論が成立しない領域でも適用可能な手法であることを示している．

本開発手法は，無次元抵抗の統計的性質のみに基づいている．そのため，自己無撞着ボルン近似などの手法とは異なり，ナノシートの幾何構造，ラフネスパターンを記述する統計モデル，および電子状態モデルによらず様々な系へ応用できると考えられる．

ただし，本研究で開発した統計的手法は，单一モード系の無次元抵抗分布 [式 (4.3)] に基づいて

いる。したがって、断面形状の大きいナノシートのような一般の多モード系に適用するためには、多モード系の無次元抵抗分布を記述する Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar 方程式 [51–53] などを活用した計算手法の開発が必要である。

## 参考文献

- [1] <https://www.imec-int.com/en/articles/smaller-better-faster-imec-presents-chip-scaling-roadmap> (2024).
- [2] S. Barraud, B. Previtali, C. Vizioz, J.M. Hartmann, J. Sturm, J. Lassarre, C. Perrot, Ph. Rodriguez, V. Loup, A. Magalhaes-Lucas, R. Kies, G. Romano, M. Cassé, N. Bernier, A. Jannaud, A. Grenier, and F. Andrieu, “7-Levels-Stacked Nanosheet GAA Transistors for High Performance Computing,” 2020 IEEE Symposium on VLSI Technology, 1 (2020).
- [3] K. Uchida, H. Watanabe, A. Kinoshita, J. Koga, T. Numata, and S. Takagi, “Experimental study on carrier transport mechanism in ultrathin-body SOI n- and p-MOSFETs with SOI thickness less than 5 nm,” 2002 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 47 (2002).
- [4] K. Uchida, J. Koga, and S. Takagi, “Experimental study on electron mobility in ultrathin-body silicon-on-insulator metal-oxide-semiconductor field-effect transistors,” J. Appl. Phys., **102**, 074510 (2007).
- [5] M. Schmidt, M.C. Lemme, H.D.B. Gottlob, F. Driussi, L. Selmi, and H. Kurz, “Mobility extraction in SOI MOSFETs with sub 1nm body thickness,” Solid-State Electron., **53**, 1246 (2009).
- [6] K.W. Jo, C.-M. Lim, W.K. Kim, K. Toprasertpong, M. Takenaka, and S. Takagi, “Strain and surface orientation engineering in extremely-thin body Ge and SiGe-on-insulator MOSFETs fabricated by Ge condensation,” 2019 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 29.1.1 (2019).
- [7] B. Patra, R.M. Incandela, J.P.G. van Dijk, H.A.R. Homulle, L. Song, M. Shahmohammadi, R.B. Staszewski, A. Vladimirescu, M. Babaie, F. Sebastian, and E. Charbon, “Cryo-CMOS Circuits and Systems for Quantum Computing Applications,” IEEE J. Solid-State Circuits, **53**, 309 (2018).
- [8] T. Ando, “Screening effect and quantum transport in a silicon inversion layer in strong magnetic-fields,” J. Phys. Soc. Jpn., **43**, 1616 (1977).
- [9] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern, “Electronic properties of two-dimensional systems,” Rev. Mod. Phys., **54**, 437 (1982).
- [10] S.M. Goodnick, D.K. Ferry, C.W. Wilmsen, Z. Liliental, D. Fathy, and O.L. Krivanek, “Surface roughness at the Si(100)-SiO<sub>2</sub> interface,” Phys. Rev. B, **32**, 8171 (1985).
- [11] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue, “Interface roughness

scattering in GaAs/AlAs quantum-wells,” *Appl. Phys. Lett.*, **51**, 1934 (1987).

[12] J. Motohisa and H. Sakaki, “Interface roughness scattering and electron mobility in quantum wires,” *Appl. Phys. Lett.*, **60**, 1315 (1992).

[13] D. Esseni, “On the modeling of surface roughness limited mobility in SOI MOSFETs and its correlation to the transistor effective field,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **51**, 394 (2004).

[14] T. Ishihara, K. Uchida, J. Koga, and S. Takagi, “Unified Roughness Scattering Model Incorporating Scattering Component Induced by Thickness Fluctuations in Silicon-on-Insulator Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistors,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **45**, 3125 (2006).

[15] S. Jin, M.V. Fischetti, and T.-W. Tang, “Modeling of surface-roughness scattering in ultrathin-body SOI MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **54**, 2191 (2007).

[16] S. Jin, M.V. Fischetti, and T.-W. Tang, “Modeling of electron mobility in gated silicon nanowires at room temperature: Surface roughness scattering, dielectric screening, and band nonparabolicity,” *J. Appl. Phys.*, **102**, 083715 (2007).

[17] D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, *Nanoscale MOS Transistors: Semi-Classical Transport and Applications*, Cambridge University Press (2011).

[18] I.M. Tienda-Luna, F.G. Ruiz, A. Godoy, B. Biel, and F. Gámiz, “Surface roughness scattering model for arbitrarily oriented silicon nanowires,” *J. Appl. Phys.*, **110**, 084514 (2011).

[19] C. Hamaguchi, *Basic Semiconductor Physics*, Springer (2023).

[20] R. Prange and T. Nee, “Quantum spectroscopy of low-field oscillations in surface impedance,” *Phys. Rev.*, **168**, 779 (1968).

[21] M. Lenzi, P. Palestri, E. Gnani, S. Reggiani, A. Gnudi, D. Esseni, L. Selmi, and G. Baccarani, “Investigation of the Transport Properties of Silicon Nanowires Using Deterministic and Monte Carlo Approaches to the Solution of the Boltzmann Transport Equation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **55**, 2086 (2008).

[22] C. Jacoboni, *Theory of Electron Transport in Semiconductors*, Springer (2010).

[23] H. Tsuchiya and Y. Kamakura, *Carrier Transport in Nanoscale MOS Transistors*, Wiley (2016).

[24] M.V. Fischetti and W.G. Vandenberghe, *Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures*, Springer (2016).

[25] D. Lizzit, D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, “A new formulation for surface roughness limited mobility in bulk and ultra-thin-body metal-oxide-semiconductor transistors,” *J. Appl. Phys.*, **116**, 223702 (2014).

[26] D. Lizzit, O. Badami, R. Specogna, and D. Esseni, “Improved surface-roughness scattering and mobility models for multi-gate FETs with arbitrary cross-section and biasing scheme,”

J. Appl. Phys., **121**, 245301 (2017).

[27] K. Sumita, K. Toprasertpong, M. Takenaka, and S. Takagi, “Interpretation of mobility universality against effective electric field of Si nMOSFETs based on nonlinear model of surface roughness scattering,” Appl. Phys. Express, **16**, 064001 (2023).

[28] K. Sumita, M.-S. Kang, K. Toprasertpong, M. Takenaka, and S. Takagi, “Formulation of Ground States for 2DEG at Rough Surfaces and Application to Nonlinear Model of Surface Roughness Scattering in nMOSFETs,” IEEE J. Electron Devices Soc., **11**, 216 (2023).

[29] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press (1995).

[30] S. Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor, Cambridge University Press (2005).

[31] P.W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” Phys. Rev., **109**, 1492 (1958).

[32] D.J. Thouless, “Electrons in disordered systems and the theory of localization,” Phys. Rep., **13**, 93 (1974).

[33] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan, “Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions,” Phys. Rev. Lett., **42**, 673 (1979).

[34] B. Kramer and A. MacKinnon, “Localization: theory and experiment,” Rep. Prog. Phys., **56**, 1469 (1993).

[35] S. Datta, F. Assad, and M. Lundstrom, “The silicon MOSFET from a transmission viewpoint,” Superlattices Microstruct., **23**, 771 (1998).

[36] M. Shur, “Low ballistic mobility in submicron HEMTs,” IEEE Electron Device Lett., **23**, 511 (2002).

[37] C. Buran, M.G. Pala, M. Bescond, M. Dubois, and M. Mouis, “Three-Dimensional Real-Space Simulation of Surface Roughness in Silicon Nanowire FETs,” IEEE Trans. Electron Devices, **56**, 2186 (2009).

[38] Y.-M. Niquet, V.-H. Nguyen, F. Triozon, I. Duchemin, O. Nier, and D. Rideau, “Quantum calculations of the carrier mobility: Methodology, Matthiessen’s rule, and comparison with semi-classical approaches,” J. Appl. Phys., **115**, 054512 (2014).

[39] C. Beenakker, “Random-matrix theory of quantum transport,” Rev. Mod. Phys., **69**, 731 (1997).

[40] R. Landauer, “Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices,” Philos. Mag., **21**, 863 (1970).

[41] P.W. Anderson, D.J. Thouless, E. Abrahams, and D.S. Fisher, “New method for a scaling theory of localization,” Phys. Rev. B, **22**, 3519 (1980).

[42] A.A. Abrikosov, “The paradox with the static conductivity of a one-dimensional metal,” Solid State Commun., **37**, 997 (1981).

[43] S. Kim, M. Luisier, A. Paul, T.B. Boykin, and G. Klimeck, “Full Three-Dimensional Quantum Transport Simulation of Atomistic Interface Roughness in Silicon Nanowire FETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **58**, 1371 (2011).

[44] J. Okada, H. Tanaka, and N. Mori, “Numerical calculation method for the mean free path of single-mode semiconductor nanosheets with surface roughness,” *Appl. Phys. Express*, **16**, 091003 (2023).

[45] C.A. Muller and D. Delande, *Disorder and interference: localization phenomena*, Oxford University Press (2011).

[46] Y. Matsumoto and Y. Uemura, “Scattering Mechanism and Low Temperature Mobility of MOS Inversion Layers,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **13**, 367 (1974).

[47] C.W. Groth, M. Wimmer, A.R. Akhmerov, and X. Waintal, “Kwant: a software package for quantum transport,” *New J. Phys.*, **16**, 063065 (2014).

[48] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas*, Dover (1965).

[49] J. Bude, K. Hess, and G.J. Iafrate, “Impact ionization in semiconductors: Effects of high electric fields and high scattering rates,” *Phys. Rev. B*, **45**, 10958 (1992).

[50] P.K. Basu, “Effect of interface roughness on excitonic linewidth in a quantum well: Golden-rule and self-consistent-Born-approximation calculations,” *Phys. Rev. B*, **44**, 8798 (1991).

[51] O.N. Dorokhov, “Transmission coefficient and the localization length of an electron in N bound disordered chains,” *JETP Lett.*, **36**, 318 (1982).

[52] P.A. Mello, P. Pereyra, and N. Kumar, “Macroscopic approach to multichannel disordered conductors,” *Ann. Phys.*, **181**, 290 (1988).

[53] G. Mil’nikov and N. Mori, “Universal conductance statistics in a backscattering model: Solving the Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar equation with  $\beta = 1, 2$  and  $4$ ,” *Phys. Rev. B*, **88**, 155406 (2013).



## 第5章

# 半導体ナノシートにおける電子移動度 の結晶方位依存性

### 5.1 はじめに

立方晶系に分類される Si のバルク結晶では、キャリア移動度は等方的である [1]。しかし、SOI (Silicon On Insulator) やナノシート構造のような量子閉じ込め構造をもつ微細なデバイスでは、移動度は輸送方向の結晶方位や基板面方位に依存して変化する [2, 3]。この結晶方位依存性を利用して、移動度を高め、デバイス性能を向上させることができると期待されている [4–7]。そのため、ナノシート構造をチャネルにもつデバイスの解析や設計に向けて、任意の結晶方位のチャネル構造を扱える物理モデルの開発が重要である [8]。

Si デバイスにおいて、有効質量近似に基づく標準的な電子輸送解析は、以下の手順で行われる。はじめに、輸送方向とそれに垂直な断面方向とに、シュレディンガー方程式を分離する [9, 10]。この分離によって、各電子が加速定理に基づく自由走行とフェルミの黄金則に基づく散乱とを繰り返すことで、電子系全体の振る舞いが決まるという描像に基づく半古典的な輸送シミュレーションが可能となる [11, 12]。このとき、加速定理に基づく自由走行では、非常に高い電界が印加された場合 [13–15] などの例外的な状況をのぞき、電子のバンド指数は不变であると仮定される [16, 17]。

以上のような従来の電子輸送解析手法には、結晶方位の取り扱いに関して不十分な点がある。任意の結晶方位を扱う場合、伝導帯谷のバンド構造を表現する逆有効質量テンソルの非対角成分が、非ゼロとなることがある。この場合には、自由走行時にサブバンド指数が変化する可能性がある [18]。しかし、この効果が、1次元電子ガスの輸送特性に与える影響を定量的に解析した報告はこれまでない。

そこで本研究では、逆有効質量テンソルの非対角成分に由来する自由走行時サブバンド間遷移の効果を、Krieger-Iafrate (KI) 方程式を用いて定量的に解析する。さらに、KI 方程式とモンテカルロシミュレーションとを組み合わせ、自由走行時サブバンド間遷移がドリフト速度に与える影響を定量的に調べる。最後に、(001) 基板、(110) 基板、(111) 基板上に作製したナノシートにおける電子移動度を、ナノシートの幾何構造やゲートバイアスなどの条件を変えて包括的にシミュレーションする。

## 5.2 任意結晶方位を考慮した有効質量方程式

任意結晶方位からなるナノシート構造を扱う場合、伝導帯谷のバンド構造を表現する逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロとなることがある。このような場合において、1次元的に量子閉じ込めを受けた電子状態を記述する方法を説明する[10]。また、後の節で議論する、閉じ込めを受けた有効質量  $m_{1D}$  および閉じ込めを無視したバルク的な有効質量  $m_{3D}$  をそれぞれ定義する。

### 5.2.1 逆有効質量テンソル

Si 伝導帯谷の分散関係は、

$$E = E_{v0} + \frac{\hbar^2}{2} [k_{t1} \ k_{t2} \ k_l] W_{ECS} [k_{t1} \ k_{t2} \ k_l]^T \quad (5.1)$$

$$W_{ECS} = \begin{bmatrix} 1/m_{t1} & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_{t2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_l \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

と表せる。ここで、 $m_{t1} = m_{t2}$  は短軸方向の有効質量、 $m_l$  は長軸方向の有効質量を表す。3つの座標軸はそれぞれ、等エネルギー面を表す回転楕円体の主軸方向にとり、谷底の波数を座標軸の原点とする[図5.1(b) 参照]。このとき、逆有効質量テンソルは対角表示される。この座標系を楕円体座標系(ECS: Ellipsoid Coordinate System)と呼び、ECSにおける逆有効質量テンソルを  $W_{ECS}$  とする[3]。一般に、座標軸を任意にとった場合、逆有効質量テンソルは非対角成分をもつ。

ECS から一般の座標系への変換は、ECS の基底を一般の座標系の基底に変換する行列  $R$ 、

$$[e_x \ e_y \ e_z] = [e_{k_{t1}} \ e_{k_{t2}} \ e_{k_l}] R \quad (5.3)$$

を用いて行う[19]。ここで、 $e_x, e_y, e_z$  は一般の座標系の基底ベクトル、 $e_{k_{t1}}, e_{k_{t2}}, e_{k_l}$  は ECS の基底ベクトルを表す。エネルギーはスカラーであることから、座標変換に対して不变であることに注意すると、式(5.1)は座標変換によって、

$$E = E_{v0} + \frac{\hbar^2}{2} [k_{t1} \ k_{t2} \ k_l] R R^T W_{ECS} R R^T [k_{t1} \ k_{t2} \ k_l]^T \quad (5.4)$$

となる。ここで、変換行列  $R$  として直交行列を仮定し、 $R^{-1} = R^T$  を用いた。式(5.4)より、新しい座標系での逆有効質量テンソル  $W$  は、

$$W = R^T W_{ECS} R \quad (5.5)$$

となり、波数の成分表示は、

$$\begin{bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{bmatrix} = R^T \begin{bmatrix} k_{t1} \\ k_{t2} \\ k_l \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

と変換される。式(5.5)より、 $W$  は対称テンソルであることがわかる。

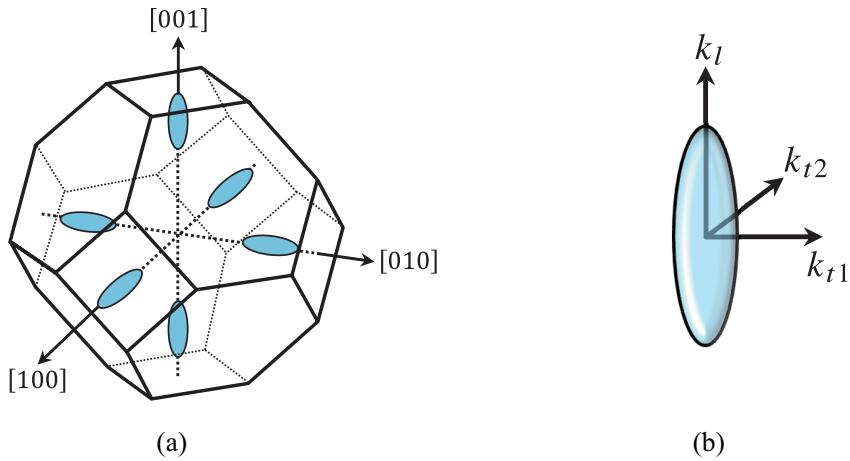


図 5.1: Si の伝導帯谷の等エネルギー面 . (a) 結晶座標系から見た等エネルギー面 . (b) 伝導帯端を波数ベクトルの原点とした場合の橢円体座標系から見た等エネルギー面 .

以上より, 回転橢円体で表される伝導帯谷の分散関係は, 一般の座標系において,

$$E(k_x, k_y, k_z) = E_{v0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} w_{ij} k_i k_j \quad (5.7)$$

と表される. ここで,  $w_{ij}$  は逆有効質量テンソルの  $i$  行  $j$  列成分である. また,  $(k_1, k_2, k_3) = (k_x, k_y, k_z)$  である. 2.4 節の手続きに従い, 波数を微分演算子に置きかえることで, 有効質量方程式は,

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} w_{ij} \hat{k}_i \hat{k}_j + U(x, y, z) + E_{v0} \right] \Phi(x, y, z) = E \Phi(x, y, z) \quad (5.8)$$

と与えられる. ここで,  $\hat{k}_i = -i(\partial/\partial x_i)$ ,  $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$  である.

### 5.2.2 基底の変換行列

ECS から結晶座標系 (CCS: Crystal Coordinate System) への座標変換を考える. CCS とは, 図 5.1(a) に示すように 3 つの座標軸がそれぞれ,  $[100]$  方向,  $[010]$  方向,  $[001]$  方向を向いた座標系である [3]. ECS から CCS への変換行列  $R_{E \rightarrow C}$  は, CCS の基底ベクトルをそれぞれ,  $e_{[100]}$ ,  $e_{[010]}$ ,  $e_{[001]}$  として,

$$[e_{[100]} \quad e_{[010]} \quad e_{[001]}] = [e_{k_{t1}} \quad e_{k_{t2}} \quad e_{k_l}] R_{E \rightarrow C} \quad (5.9)$$

と与えられる. 図 5.1 に示すように, Si の伝導帯谷は  $[100]$  方向,  $[\bar{1}00]$  方向,  $[010]$  方向,  $[0\bar{1}0]$  方向,  $[001]$  方向,  $[00\bar{1}]$  方向の合わせて 6 個存在する. 以降では略記のため,  $[\dots]$  方向の伝導帯谷を  $[\dots]$  谷と表す. 対称性より,  $[100]$  谷 ( $[010]$  谷,  $[001]$  谷) と  $[\bar{1}00]$  谷 ( $[0\bar{1}0]$  谷,  $[00\bar{1}]$  谷) は, どちらか片方だけを考慮すればよい.

つぎに、各谷の ECS から CCS への変換行列について、具体的な成分表示を考える。式(5.9)と図5.1(a)(b)より、[100] 谷の ECS から CCS への変換行列は、

$$R_{E \rightarrow C} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad ([100] \text{ 谷}) \quad (5.10)$$

となる。同様にして、[010] 谷の ECS から CCS への変換行列は、

$$R_{E \rightarrow C} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad ([010] \text{ 谷}) \quad (5.11)$$

となる。また、[001] 谷の ECS から CCS への変換行列は、

$$R_{E \rightarrow C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad ([001] \text{ 谷}) \quad (5.12)$$

となる。

CCS を一般の座標系へ変換する行列  $R_{C \rightarrow D}$  は、

$$[e_x \ e_y \ e_z] = [e_{[100]} \ e_{[010]} \ e_{[001]}] R_{C \rightarrow D} \quad (5.13)$$

と与えられる。具体例として、 $x$  軸方向、 $y$  軸方向、 $z$  軸方向がそれぞれ、[001] 方向、[110] 方向、[110] 方向を向いている座標系への変換行列を考える。式(5.13)より、

$$R_{C \rightarrow D} = \begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

となる。この変換行列は、係数の  $1/\sqrt{2}$  を無視すると、1列目の成分は [0 0 1]、2列目の成分は [1 -1 0]、3列目の成分は [1 1 0] であり、 $x$  軸、 $y$  軸、 $z$  軸がそれぞれ、[001] 方向、[110] 方向、[110] 方向を向いていることに対応する。係数の  $1/\sqrt{2}$  は、この変換行列が直交行列であるために必要である。

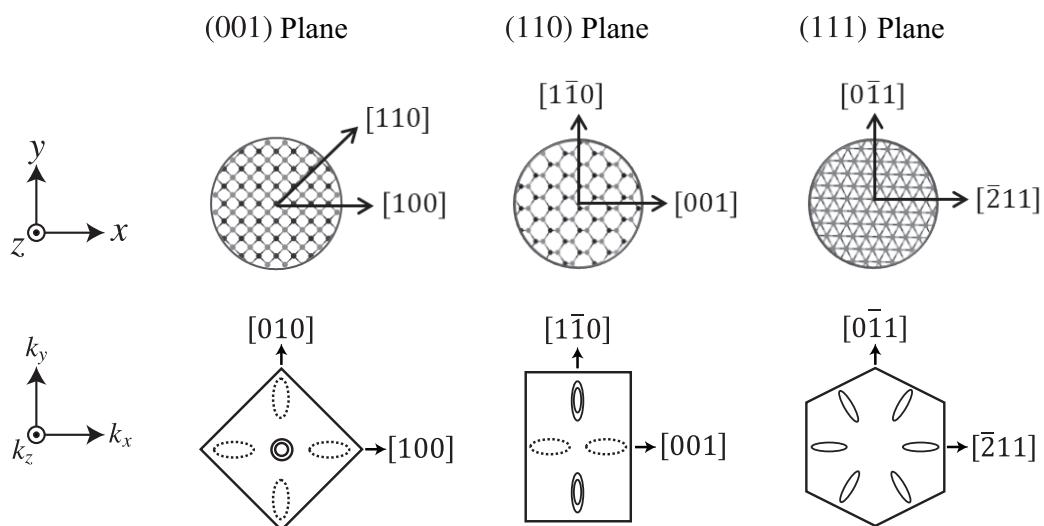
表5.1にCCSから本章で用いる代表的な座標系への変換行列をまとめた。それぞれの変換において $z$ 軸方向は、上段では[001]方向、中段では[110]方向、下段では[111]方向となる。ここで、それぞれの変換を(001)面、(110)面、(111)面への変換と呼ぶことにする。本章では、 $x$ 軸方向を輸送方向、 $y$ 軸方向をナノシート幅方向、 $z$ 軸方向をナノシート厚さ方向とする。

図5.2は、各面へ変換された座標系において、実空間上での原子配列と波数空間上での伝導帯谷の等エネルギー面とを、 $z$ 軸方向から見下ろした図を表す。式(5.3)、式(5.9)、式(5.13)より、ECSから一般の座標系への変換行列は、

$$R = R_{E \rightarrow C} R_{C \rightarrow D} \quad (5.15)$$

表 5.1: CCS から本論文で用いる代表的な座標系への変換行列 .

Plane	<i>x</i> -direction	<i>y</i> -direction	<i>z</i> -direction	$R_{C \rightarrow D}$
(001)	[100]	[010]	[001]	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
(110)	[001]	[1 $\bar{1}$ 0]	[110]	$\begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
(111)	[ $\bar{2}11$ ]	[0 $\bar{1}1$ ]	[111]	$\begin{bmatrix} -2/\sqrt{6} & 0 & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix}$

図 5.2: 表 5.1 における 3 つの面への変換と対応して, 実空間上での原子配列 (上段) と波数空間上での伝導帯谷の等エネルギー面 (下段) とを,  $z$  軸方向から見下ろした図 .

となる。さらに、図5.2において $z$ 軸方向の結晶方位を固定し、 $x$ 軸および $y$ 軸を $\theta$ だけ回転させるには、 $z$ 軸周りの回転行列 $R_z(\theta)$ を用いればよい。すなわち、

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

を用いて、

$$R = R_{E \rightarrow C} R_{C \rightarrow D} R_z(\theta) \quad (5.17)$$

とする。

### 5.2.3 1次元電子ガスの有効質量方程式

$x$ 軸方向には電界がなく、 $yz$ 平面内のポテンシャル $U(y, z)$ によって1次元的に閉じ込められた電子について考える。そのさい、一つの伝導帯谷に着目し、式(5.8)の有効質量方程式に基づいて電子状態を計算する。

$w_{12} = w_{13} = 0$ の場合

はじめに、 $w_{12} = w_{13} = 0$ の場合を考える。式(5.8)より、有効質量方程式は、

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( w_{11} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + w_{22} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2w_{23} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + w_{33} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(y, z) \right] \Phi(x, y, z) = E \Phi(x, y, z) \quad (5.18)$$

となる。ただし、 $E_{v0} = 0$ とした。ポテンシャル $U(y, z)$ は $x$ に依存しないため、波動関数は $x$ 軸方向を表す部分と、 $yz$ 面内を表す部分とに変数分離でき、

$$\Phi_{nk_x}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \zeta_n(y, z) \quad (5.19)$$

となる。エネルギーは、

$$E_{nk_x} = \epsilon_n + \frac{1}{2} \hbar^2 w_{11} k_x^2 \quad (5.20)$$

となる。ここで、 $n$ (=1, 2, 3, ...)はサブバンド指数、 $\epsilon_n$ はサブバンド準位、 $\zeta_n(y, z)$ は $yz$ 面内の2次元波動関数を表し、つぎの2次元の有効質量方程式に従う。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( w_{22} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2w_{23} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + w_{33} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(y, z) \right] \zeta_n(y, z) = \epsilon_n \zeta_n(y, z) \quad (5.21)$$

以上のように、 $w_{12} = w_{13} = 0$ の場合、電子状態は $x$ 方向部分と $yz$ 面内部分とに分離できる。

$w_{12} \neq 0$ または $w_{13} \neq 0$ の場合

一般に $w_{12} \neq 0$ または $w_{13} \neq 0$ の場合、有効質量方程式には微分演算子 $w_{12}(\partial^2/\partial x \partial y)$ または $w_{13}(\partial^2/\partial x \partial z)$ などの項が含まれる。そのため、上述したように電子状態を $x$ 方向と $yz$ 平面方向とに分離することはできない。しかし、M. Bescondらによって導入された波動関数を用いると、エネルギーについては $z$ 軸方向と $yz$ 面内方向とに分離できる[10]。

この方法では、波動関数として、

$$\Phi_{nk_x}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \phi_{nk_x}(y, z) \quad (5.22)$$

なる関数形を考える。このとき、エネルギーは、

$$\begin{aligned} E_{nk_x} &= \epsilon_n + \frac{1}{2} \hbar^2 w_{11} k_x^2 - \frac{1}{2} \hbar^2 (w_{12}\alpha + w_{13}\beta) k_x^2 \\ &= \epsilon_n + E_{3D}(k_x) - \frac{1}{2} \hbar^2 (w_{12}\alpha + w_{13}\beta) k_x^2 \\ &= \epsilon_n + E_{1D}(k_x) \end{aligned} \quad (5.23)$$

と与えられる [10]。ここで、

$$E_{3D}(k_x) = \frac{1}{2} \hbar^2 w_{11} k_x^2 \quad (5.24)$$

$$E_{1D}(k_x) = E_{3D}(k_x) - \frac{1}{2} \hbar^2 (w_{12}\alpha + w_{13}\beta) k_x^2 \quad (5.25)$$

と定義した。また、

$$\alpha = \frac{w_{12}w_{33} - w_{23}w_{13}}{w_{22}w_{33} - w_{23}^2}, \quad \beta = \frac{w_{13}w_{22} - w_{23}w_{12}}{w_{22}w_{33} - w_{23}^2} \quad (5.26)$$

である。 $\phi_{nk_x}(y, z)$  は面内の波動関数  $\zeta_n(y, z)$  を用いて、

$$\phi_{nk_x}(y, z) = e^{-ik_x(\alpha y + \beta z)} \zeta_n(y, z) \quad (5.27)$$

と与えられる。サブバンド準位  $\epsilon_n$ 、面内の波動関数  $\zeta_n(y, z)$  は、つぎの 2 次元の有効質量方程式に従う。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( w_{22} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2w_{23} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + w_{33} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(y, z) \right] \zeta_n(y, z) = \epsilon_n \zeta_n(y, z) \quad (5.28)$$

式 (5.21) と式 (5.28) とを比べると、サブバンド準位  $\epsilon_n$  と面内の波動関数  $\zeta_n(y, z)$  は、 $w_{12} = w_{13} = 0$  の場合と、 $w_{12} \neq 0$  または  $w_{13} \neq 0$  の場合とで共通していることがわかる。一方、式 (5.19)、式 (5.22)、式 (5.27) を比べると、波動関数は位相因子  $\exp(-ik_x(\alpha y + \beta z))$  だけ異なることがわかる。また、式 (5.20)、式 (5.23) を比べると、エネルギーは  $\hbar^2 (w_{12}\alpha + w_{13}\beta) k_x^2 / 2$  だけ異なることがわかる。

$w_{12} \neq 0$  または  $w_{13} \neq 0$  に由来する有効質量の増加

式 (5.23) より、閉じ込めがない場合の有効質量  $m_{3D}$ 、1 次元的に閉じ込められた場合の有効質量  $m_{1D}$  をそれぞれ、つぎのように定義する。

$$\frac{1}{m_{3D}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{3D}(k_x)}{\partial k_x^2} = w_{11} \quad (5.29)$$

$$\frac{1}{m_{1D}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{1D}(k_x)}{\partial k_x^2} = \frac{1}{m_{3D}} - (w_{12}\alpha + w_{13}\beta) \quad (5.30)$$

逆有効質量テンソル  $W$  が正定値であると仮定すると、 $w_{12} \neq 0$  または  $w_{13} \neq 0$  のとき、

$$w_{12}\alpha + w_{13}\beta > 0 \quad (5.31)$$

となることが証明できる<sup>1</sup>。Siの伝導帯谷の逆有効質量テンソルは正定値であるため、式(5.31)を式(5.30)に用いると、 $w_{12} \neq 0$ または $w_{13} \neq 0$ のとき、 $m_{1D} > m_{3D}$ となることがわかる。すなわち、逆有効質量テンソルの非対角成分 $w_{12}$ 、 $w_{13}$ によって $x$ 軸方向の有効質量は、バルクの有効質量 $m_{3D}$ から必ず重くなる。

以上の結果は、 $yz$ 面内の閉じ込めポテンシャルとして幅が十分広い量子井戸を考えて、輸送方向( $x$ 軸方向)の有効質量 $m_{1D}$ が、閉じ込めがない場合の有効質量 $m_{3D}$ と異なることを表す。これは、量子井戸幅を十分に広げた極限が閉じ込めがない場合であることを考えると、不自然な結果と言える。次節で説明するようにこの問題は、 $w_{12}\alpha + w_{13}\beta \neq 0$ の場合には電界による加速時にサブバンド間遷移が起こるため有効質量の増加が相殺され、解決すると考えられる。しかし、加速時は通常サブバンド指数が変化しないと仮定されており、この場合の移動度の計算結果は実際よりも低くなると考えられる。

#### 5.2.4 具体例

(110)面における[001]谷の電子について考える。輸送方向( $x$ 軸方向)を、図5.2の場合から $-\pi/4$ 回転させる。このとき、変換行列 $R$ は、

$$R = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{R_{E \rightarrow C}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{R_{C \rightarrow D}} \underbrace{\begin{bmatrix} \cos(-\pi/4) & -\sin(-\pi/4) & 0 \\ \sin(-\pi/4) & \cos(-\pi/4) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{R_z(\theta)} \quad (5.32)$$

となり、逆有効質量テンソルは、式(5.5)より、

$$W = R^T W_{ECS} R = \begin{bmatrix} \frac{1}{2m_t} + \frac{1}{2m_l} & -\frac{1}{2m_t} + \frac{1}{2m_l} & 0 \\ -\frac{1}{2m_t} + \frac{1}{2m_l} & \frac{1}{2m_t} + \frac{1}{2m_l} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{bmatrix} \quad (5.33)$$

となる。本研究では、 $m_t = 0.190m_0$ 、 $m_l = 0.916m_0$ とした[20]。

<sup>1</sup>  $W$ の正定値性より、 $W$ から1行目と1列目を取り除いた $2 \times 2$ の主小行列の行列式は正である。

$$\begin{vmatrix} w_{22} & w_{23} \\ w_{32} & w_{33} \end{vmatrix} = w_{22}w_{33} - w_{23}^2 > 0$$

$W$ の正定値性より、 $w_{12} \neq 0$ または $w_{13} \neq 0$ のとき、つぎの不等式が成り立つ。

$$[0 \quad -w_{13} \quad w_{12}] W [0 \quad -w_{13} \quad w_{12}]^T = w_{12}w_{33}^2 + w_{13}w_{22}^2 - 2w_{23}w_{12}w_{13} > 0$$

したがって、

$$w_{12}\alpha + w_{13}\beta = \frac{w_{12}w_{33}^2 + w_{13}w_{22}^2 - 2w_{23}w_{12}w_{13}}{w_{22}w_{33} - w_{23}^2} > 0$$

となり、式(5.31)が証明された。

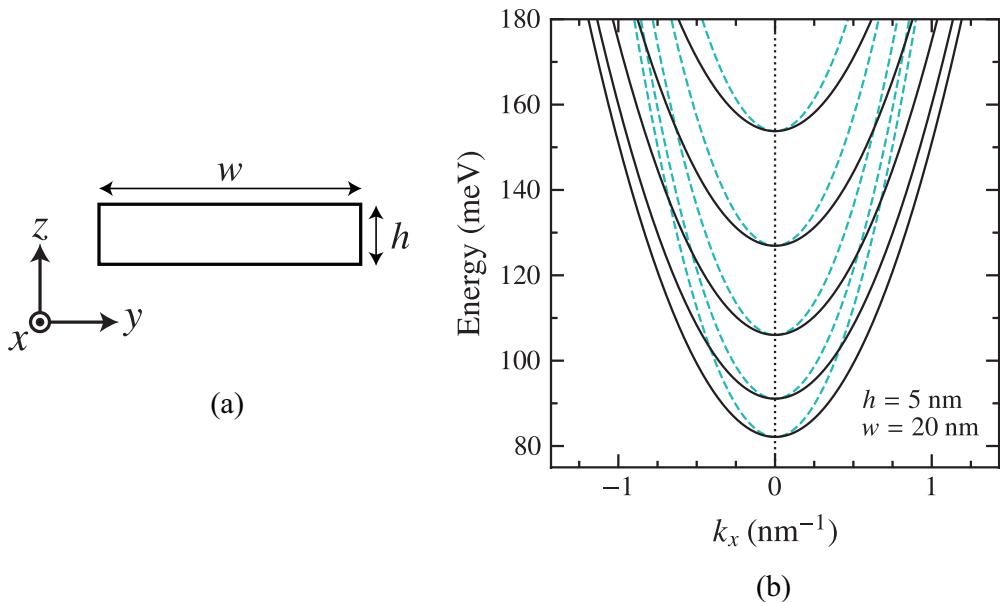


図 5.3: (a) ナノシートの断面の模式図 . (b) (110) 面における [001] 谷の電子のサブバンド構造 .  $E_{1D}(k_x)$  を黒実線 ,  $E_{3D}(k_x)$  を水色破線で示す . ナノシートの断面構造は  $h = 5 \text{ nm}$  ,  $w = 20 \text{ nm}$  とした .

ナノシートの断面構造として, 幅  $w$ , 厚さ  $h$  の矩形を考える. 電子密度が低い場合, 閉じ込め方向のポテンシャルは空間的に一様であると考えられる. そのため, 図 5.3(a) のように,  $yz$  面内の閉じ込めポテンシャルとして井戸幅がそれぞれ,  $w$ ,  $h$  の無限量子井戸型ポテンシャルを考える. このとき, サブバンド構造の計算結果を, 図 5.3(b) に示す. 黒実線は  $E_{1D}(k_x)$  で, 水色破線は  $E_{3D}(k_x)$  である. 逆有効質量テンソルの非対角成分  $w_{12}$  により,  $x$  方向の有効質量が増加していることがわかる.

### 5.3 逆有効質量テンソルに非対角成分がある場合の電子加速

高電界が印加された場合などの例外的な状況をのぞき, 通常電子が加速されるさい, 電子のサブバンド指数は変化しないと仮定される. しかし, 2DEG において, 逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロの場合, 電子の加速時にサブバンド指数が確率的に変化することが指摘されている [18]. 本節では, 1DEG において, 加速時のサブバンド指数変化を KI 方程式を用いて解析した結果を述べる.

#### 5.3.1 1 次元電子ガスにおける Krieger-Lafrate 方程式

2.5.2 節では, 3 次元結晶における KI 方程式を導出した. 本節では, ある一つの谷に有効質量近似を適用し, それに由来するサブバンドを考え, 1 次元系における KI 方程式の表式を示す.

式(2.106)と式(2.100)とを1次元的な波数  $k_x$  に対して書き下すと、

$$\frac{da_n(t)}{dt} = -\frac{eF_x}{i\hbar} \sum_{n'} a_{n'}(t) X_{n,n'}(k_x(t)) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_{nk_x(t')} - E_{n'k_x(t')}) dt' \right] \quad (5.34)$$

$$X_{n,n'}(k_x(t)) = -i \int d\mathbf{r} u_{n,k_x(t)}^*(\mathbf{r}, 0) \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n',k_x}(r, 0) \Big|_{k_x=k_x(t)} \quad (5.35)$$

となる。ここで、式(5.22)と式(5.27)より、包絡関数近似のもとブロッホ関数の周期関数部分は、

$$u_{n,k_x}(\mathbf{r}, 0) = \frac{\zeta_n(y, z)}{\sqrt{L}} e^{-ik_x(\alpha y + \beta z)} \quad (5.36)$$

と表せる。時間に依存する波数  $k_x(t)$  は、

$$k_x(t) = k_x(0) - \frac{eF_x}{\hbar} t \quad (5.37)$$

となる。式(5.36)を式(5.35)に代入すると、

$$X_{n,n'}(k_x(t)) = - \iint dy dz \zeta_n^*(y, z) (\alpha y + \beta z) \zeta_{n'}(y, z) = - \langle \zeta_n | \alpha y + \beta z | \zeta_{n'} \rangle \quad (5.38)$$

が得られる。式(5.23)より、

$$E_{nk_x(t')} - E_{n'k_x(t')} = \epsilon_n - \epsilon_{n'} \quad (5.39)$$

となり、エネルギーの差は時間に依存せず、サブバンド準位の差で決まる。式(5.38)と式(5.39)とを式(5.34)に代入すると、1次元系におけるKI方程式は、以下のようにまとめられる。

$$\frac{da_n(t)}{dt} = -i \sum_{n'} \Omega_{nn'} e^{i\omega_{nn'} t} a_{n'}(t) \quad (5.40)$$

$$\Omega_{nn'} = \frac{eF_x}{\hbar} \langle \zeta_n | \alpha y + \beta z | \zeta_{n'} \rangle \quad (5.41)$$

$$\omega_{nn'} = \frac{\epsilon_n - \epsilon_{n'}}{\hbar} \quad (5.42)$$

時刻  $t$  に電子を  $n$  番目のサブバンドに見出す確率  $P_n(t)$  は、

$$P_n(t) = |a_n(t)|^2 \quad (5.43)$$

と与えられる。全確率は保存されるため、

$$\sum_n P_n(t) = \sum_n |a_n(t)|^2 = 1 \quad (5.44)$$

である。

以上より、 $\Omega_{nn'}$  が非ゼロの場合、すなわち、 $w_{12} \neq 0$  または  $w_{13} \neq 0$  の場合、KI方程式に従つて、 $a_n(t)$  あるいは  $P_n(t)$  は時間変化する。つまり、逆有効質量テンソルの非対角成分に起因して、自由走行時にサブバンド間遷移が生じる。その遷移確率は式(5.40)から計算することができる。

### 5.3.2 平均的な分散関係

$t = 0$  のとき, 電子が初期状態  $(n_0, k_0)$  にあったとする. すなわち,

$$a_n(0) = \delta_{n,n_0} \quad (5.45)$$

とする. これを初期条件として KI 方程式を数値的に解くことで,  $a_n(t)$  の時間発展を計算できる. 平均的な分散関係をつぎのように定義する.

$$\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t)) = \sum_n |a_n(t)|^2 E_{n k_x(t)} \quad (5.46)$$

ここで,  $E_{n k_x}$  は式 (5.23) で定義したエネルギーである. また,  $k_x(t)$  は時間に依存する波数であり, つぎの式に従う.

$$k_x(t) = k_0 - \frac{eF_x}{\hbar}t \quad (5.47)$$

まず, サブバンド間遷移を考慮しない場合において, 平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  の表式を示す. これは,  $|a_n(t)|^2$  が時間変化しないため, 後述するように容易に示すことができる.

一方, サブバンド間遷移を考慮する場合には, 平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  の解析的な表式を一般に示すことはできない. しかし, 本節で導出するように, 加速はじめからの経過時間が短い範囲, すなわち,  $t \rightarrow 0$  の極限で  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  が漸近する式を解析的に示すことができる.

サブバンド間遷移を考慮しない場合の  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$

サブバンド間遷移を考慮しない場合を考える. この場合, 電子は初期時刻のサブバンド  $n_0$  に留まり続ける. すなわち,  $a_n(t)$  は時間変化しないため,

$$\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t)) = E_{n_0 k_x(t)} = \epsilon_{n_0} + E_{1D}(k_x(t)) = \epsilon_{n_0} + \frac{\hbar^2 k_x^2(t)}{2m_{1D}} \quad (5.48)$$

となる. この式から, 速度の時間発展の表式は,

$$v_{k_0}(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))}{\partial k} = -\frac{eF_x}{m_{1D}}t + \frac{\hbar k_0}{m_{1D}} \quad (5.49)$$

となる. この式を時間で微分すると, 速度の時間変化率は  $\dot{v}_{k_0} = -eF_x/m_{1D}$  となることがわかる. すなわち, サブバンド間遷移を考慮しない場合, 電子は有効質量  $m_{1D}$  をもつ粒子として加速される. つまり, 電子は  $E_{1D}(k_x)$  に沿って自由走行する.

サブバンド間遷移を考慮した場合の  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$

KI 方程式に基づいてサブバンド間遷移を考慮する場合を考える.  $t = 0$  に加速されはじめた電子について,  $t$  が十分に短い加速の初期期間では,  $a_n(t)$  はつぎのように近似できると考えられる.

$$\mathbf{a}(t) \approx \mathbf{a}(0) - i\Omega \mathbf{a}(0)t \quad (5.50)$$

ここで,  $\mathbf{a}(t) = (a_1(t), a_2(t), \dots)^T$ ,  $\Omega$  を  $n$  行  $n'$  列成分が  $\Omega_{nn'}$  で与えられる行列とした.  $a_n(0) = \delta_{n,n_0}$  を用いると, 式(5.50)より,

$$a_n(t) = \begin{cases} -i\Omega_{nn_0}t & (n \neq n_0) \\ 1 - \sum_{n' \neq n_0} |a_{n'(t)}|^2 & (n = n_0) \end{cases} \quad (5.51)$$

となる. この式を, 式(5.46)に代入すると,

$$\begin{aligned} \bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t)) &\approx \sum_{n \neq n_0} |\Omega_{nn_0}t|^2 [E_{nk_x(t)} - E_{n_0 k_x(t)}] + E_{n_0 k_x(t)} \\ &= \left| \frac{eF_x t}{\hbar} \right|^2 \sum_{n \neq n_0} |\langle \zeta_n | \alpha y + \beta z | \zeta_{n_0} \rangle|^2 [\epsilon_n - \epsilon_{n_0}] + E_{n_0 k_x(t)} \\ &= \left| \frac{eF_x t}{\hbar} \right|^2 \frac{1}{2} \hbar^2 (\alpha w_{12} + \beta w_{13}) + E_{n_0 k_x(t)} \end{aligned} \quad (5.52)$$

となる. 最後の式変形では, 総和則 [21] より,

$$\sum_n |\langle \zeta_n | \alpha y + \beta z | \zeta_{n_0} \rangle|^2 [\epsilon_n - \epsilon_{n_0}] = \frac{1}{2} \hbar^2 (\alpha w_{12} + \beta w_{13}) \quad (5.53)$$

となることを用いた. 式(5.52)を整理すると, 時刻  $t = 0$  に初期状態  $(n_0, k_0)$  から出発した電子に関する平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  は, 経過時間  $t$  が十分に短い加速の初期期間において, つぎのよう に表される.

$$\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t)) \rightarrow \bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t)) = \frac{\hbar^2}{2m_{3D}} (k_x(t) - k_0)^2 + \frac{\hbar^2 k_0}{m_{1D}} (k_x(t) - k_0) + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{1D}} + \epsilon_{n_0} \quad (5.54)$$

$$= E_{3D}(\delta k_x(t)) + \delta k_x(t) \frac{\partial E_{n_0 k_x}}{\partial k_x} \Big|_{k_x=k_0} + E_{n_0 k_0} \quad (5.55)$$

ここで,  $\delta k_x(t) = k_x(t) - k_0 = -eF_x t / \hbar$  とした. また,  $m_{3D}$  と  $m_{1D}$  はそれぞれ, 式(5.29)と 式(5.30)によって定義された  $x$  軸方向の有効質量である. 式(5.54)より, 加速の初期期間における速度の時間発展は,

$$v_{k_0}^{\text{init}}(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))}{\partial k} = -\frac{eF_x}{m_{3D}} t + \frac{\hbar k_0}{m_{1D}} \quad (5.56)$$

となる. この式を時間で微分すると, 速度の時間変化率は  $\dot{v}_{k_0}^{\text{init}}(t) = -eF_x / m_{3D}$  となることがわかる. すなわち, 加速の初期期間では, 電子は閉じ込めの影響がない場合の有効質量  $m_{3D}$  をもつ粒子として加速される.

以上より, 逆有効質量テンソルの非対角成分に由来する自由走行時サブバンド間遷移を考慮することで, 電子の加速に関与する有効質量は, 加速の初期期間において  $m_{1D}$  から  $m_{3D}$  に変化すると 言える.

### 5.3.3 $|a_n(t)|^2$ 時間発展のシミュレーション結果

前節では, 式(5.46)によって平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  を定義した. また, 電子が加速されはじめ てから最初の一定期間における平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  は式(5.54)で与えられる  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}$  となるこ

とを示した。さらに、自由走行時サブバンド間遷移を考慮することで、加速の有効質量が  $m_{1D}$  から  $m_{3D}$  へ変化することを述べた。

しかし、このように  $\bar{E}_{n_0 k_0} \rightarrow \bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}$  となる  $t$  の範囲を解析的に求めることは困難である。また、この加速の初期期間以降において、 $\bar{E}_{n_0 k_0}$  がどのように時間発展するかを解析的に調べることはできない。そこで本節では、KI 方程式をルンゲ・クッタ法を用いて数値的に解くことで、 $a_n(t)$  の時間発展を求め、平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  をシミュレーションした結果を述べる。

(110) 面における [001] 谷の電子について考える。5.2.4 節と同様に、輸送方向 ( $x$  軸方向) を図 5.2 の場合から  $-\pi/4$  回転させた系を考える。このとき、逆有効質量テンソルは式 (5.33) となり、 $w_{12} \neq 0$  のため加速時にサブバンド間遷移が起こる。 $xy$  面内の閉じ込めポテンシャルは無限量子井戸型ポテンシャルとし、 $z$  軸方向の井戸幅を  $h$ 、 $y$  軸方向の井戸幅を  $w$  とした。

図 5.4(a)–(f) は、時刻  $t = 0$  に初期状態 ( $n_0 = 1, k_0 = 0$ ) であった電子を、 $x$  軸方向の電界  $F_x$  で加速しはじめ、その後、電子を  $n$  番目のサブバンドに見出す確率  $P_n(t) = |a_n(t)|^2$  の時間発展を表す。サブバンド指数ごとに  $P_n(t)$  を異なる色の実線でプロットし、線の近くに  $n$  の値を付した。例えば、黒実線は  $P_1(t)$ 、青実線は  $P_2(t)$ 、赤実線は  $P_3(t)$ 、…を表す。初期条件より、 $P_n(0) = |a_n(0)|^2 = \delta_{1,n}$  である。 $z$  軸方向の井戸幅  $h$  は、図 5.4(a)–(f) で共通して、 $h = 5 \text{ nm}$  とした。 $y$  軸方向の井戸幅  $w$  は、上段 (a, b) では  $w = 20 \text{ nm}$ 、中段 (c, d) では  $w = 40 \text{ nm}$ 、下段 (e, f) では  $w = 60 \text{ nm}$  とした。電界  $F_x$  は、左列 (a, c, e) では  $F_x = -5 \text{ kV/cm}$ 、右列 (b, d, f) では  $F_x = -10 \text{ kV/cm}$  とした。

図 5.4(a)–(f) に示す  $P_n(t)$  の時間発展と並行して、図 5.4(a')–(f') に、式 (5.46) から計算した平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  を実線でプロットした。また、サブバンド構造  $E_{nk_x} (= E_{1D}(k_x) + \epsilon_n)$  を点線で、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  を破線で示した<sup>\*2</sup>。ここで、横軸には波数  $k_x$  (図の下部) と時刻  $t$  (図の上部) の両方を併記した。

はじめに、自由走行時サブバンド間遷移の井戸幅  $w$  依存性について考える。 $y$  軸方向の井戸幅  $w$  が  $20, 40, 60 \text{ nm}$  と増加するにつれて、電子の存在確率  $P_n(t)$  は、より  $n$  の大きいサブバンドまで広がっていることがわかる。この振る舞いは、対応する分散関係の図より、井戸幅  $w$  が増加するにつれてサブバンド準位のエネルギー間隔が狭くなることに由来する。また、平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  (実線) は、経過時間  $t$  が小さい場合、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  (破線) とよく一致していることがわかる。さらに、井戸幅  $w$  の増加にともなって、 $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  が  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  とよく一致する時間は、長くなることがわかる。

このように、加速の初期期間において、逆有効質量非対角成分に由来するサブバンド間遷移により、閉じ込めに由来する  $x$  軸方向の有効質量増加を相殺するように、電子はよりエネルギーの高いサブバンドに遷移する。その結果、加速の初期期間では、加速時の有効質量は  $m_{1D}$  から  $m_{3D}$  へ変化する。

つぎに、自由走行時サブバンド間遷移の電界  $F_x$  依存性について考える。電界が大きいほどより大きな波数まで、 $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  (実線) が  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  (破線) とよく一致していることがわかる。しかし、これらがよく一致する時間については注意が必要である。波数  $k_x$  と時刻  $t$  には、今の場合、

<sup>\*2</sup> 今の場合、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t)) = E_{3D}(k_x) + \epsilon_1$

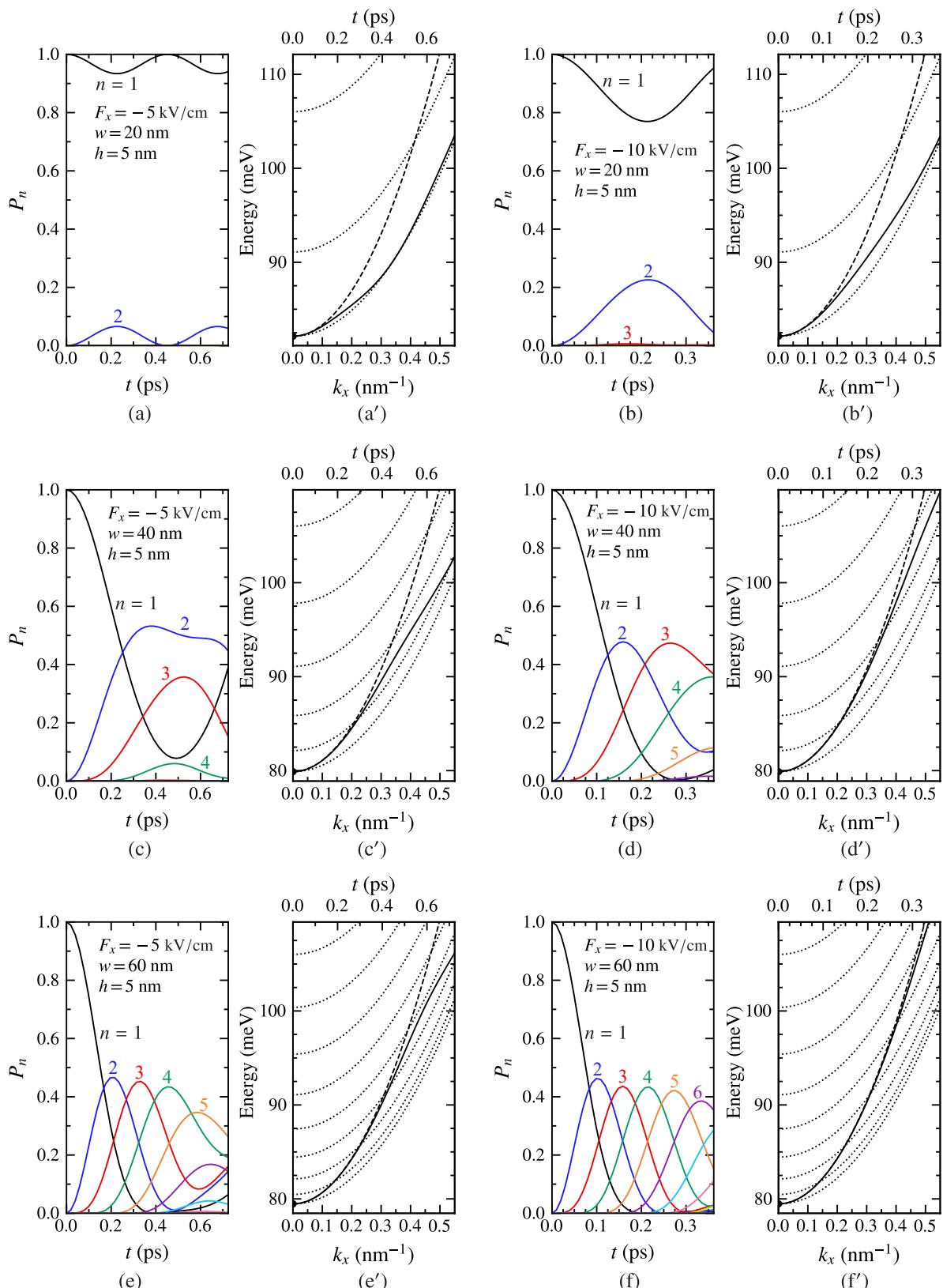


図 5.4: 時刻  $t = 0$  に初期状態 ( $n_0 = 1, k_0 = 0$ ) であった電子について、(a)–(f) は KI 方程式を数値的に解き求めた  $P_n(t)$  の時間発展を表す。( $a'$ )–( $f'$ ) には、平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  を実線で、サブバンド構造  $E_{n k_x}$  を点線で、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  を破線で示す。横軸には波数  $k_x$  (図の下部) と時刻  $t$  (図の上部) の両方を併記した。井戸幅  $w$ ,  $h$  および電界  $F_x$  は図中に示した。逆有効質量テンソルは式 (5.33) を用いた。

$k_x = -eF_x t/\hbar$  という関係がある。すなわち、電子は同じ時間加速されても、 $F_x$  が小さい場合は  $k_x$  变化が小さく、 $F_x$  が大きい場合は  $k_x$  变化が大きくなる。つまり、ある一定量  $k_x$  を変化させるのに必要な経過時間は、 $F_x$  が大きいほど短くなる。このことに注意して、図 5.4(a'-f') の時間軸(上側の横軸)を確認すると、平均的な分散関係が近似式によく一致する時間は、 $F_x = -5 \text{ kV/cm}$  と  $F_x = -10 \text{ kV/cm}$  とを比べる限り明確な差はないことがわかる。

自由走行時サブバンド間遷移の電界依存性を詳しく解析するために、 $w = 40 \text{ nm}$ ,  $h = 5 \text{ nm}$  として同様の計算を行い、 $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  をシミュレーションした。図 5.5(a) に、初期状態を  $(n_0 = 1, k_0 = 0)$  として KI 方程式を数値的に解いて求めた  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  を実線で、サブバンド構造  $E_{n k_x}$  を点線で、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x)$  を破線で示す。ただし、エネルギーの原点を  $n = 1$  のサブバンド端として図示した。このとき、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x) = \hbar^2 k_x^2 / 2m_{3D}$ ,  $n = 1$  のサブバンドは  $E_{1, k_x} = \hbar^2 k_x^2 / 2m_{1D}$  となる。 $F_x = -1, -10, -50 \text{ kV/cm}$  とした場合の平均的な分散関係をそれぞれ、緑実線、赤実線、青実線で示す。電界の絶対値が大きくなるにつれて、より大きな波数  $k_x$  まで、 $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  と  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  とがよく一致していることがわかる。また、 $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  は、まず  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  に追従したあと、もとのサブバンド  $E_{1, k_x}$ (点線)に戻ることがわかる。この様子を詳しく見るため、図 5.5(a) を、両対数プロットした結果を図 5.5(b) に示す。ここで、サブバンドは  $n = 1$  のものだけを図示した。この図 5.5(b) より、加速しはじめは  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x)$  に沿って加速され、その後  $E_{1, k_x}$  に沿って加速されることがわかる。

図 5.5(a)(b) は、横軸を波数  $k_x$  で図示した結果であった。この横軸を、 $k_x(t) = -eF_x t/\hbar$  を用いて、時刻  $t$  に変換した結果を図 5.5(c)(d) に示す。図 5.5(c) は線形プロット、図 5.5(d) は両対数プロットである。緑線、赤線、青線はそれぞれ  $F_x = -1, -10, -50 \text{ kV/cm}$  の場合の結果である。点線は  $n = 1$  のサブバンド、実線はシミュレーションした平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$ 、破線は  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  を表す。加速の有効質量が  $m_{1D}$  から  $m_{3D}$  へと切り替わる時刻は、電界に対しておよそ  $|F_x|^{-1/2}$  の依存性を示すことがわかる。

つぎに、初期状態  $(n_0, k_0)$  を変化させて、平均的な分散関係をシミュレーションした結果について述べる。図 5.6 は、 $w = 100 \text{ nm}$ ,  $h = 20 \text{ nm}$ ,  $F_x = -1 \text{ kV/cm}$  とした場合において、シミュレーションした  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x)$  を実線、サブバンド構造  $E_{n k_x}$  を点線、 $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x)$  を破線でそれぞれ示す。赤線は初期状態  $(n = 1, k_x = 0)$ 、青線は初期状態  $(n = 5, k_x = 0.1 \text{ nm}^{-1})$ 、緑線は初期状態  $(n = 0, k_x = -0.2 \text{ nm}^{-1})$  とした場合の結果である。図より加速しはじめは、 $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  と  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  とがよく一致していることがわかる。その後、電子は初期状態のサブバンド  $E_{n_0 k_x}$  に沿って加速することがわかる。

以上の結果を、有効質量の時間変化という観点から、図 5.7 に模式的に示す。図 5.7(a) は、自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合、電子は有効質量  $m_{1D}$  で加速されることを表す。一方、図 5.7(b) は自由走行時サブバンド間遷移を考慮すると、加速しはじめのある一定期間は平均的に有効質量  $m_{3D}$  で加速し、その後、元のサブバンドに戻り有効質量  $m_{1D}$  で加速されることを表す。ここで、図 5.7(b) に示すように、両者を分ける時間を  $\tau_c$  とおく。ただし、 $m_{3D}$  から  $m_{1D}$  への変化は時刻  $\tau_c$  で瞬時に起こるわけではない。

図 5.4 の結果より、井戸幅  $w$  が増加するにつれて  $\tau_c$  も増加する。一方、図 5.5 の結果より、 $\tau_c$  は

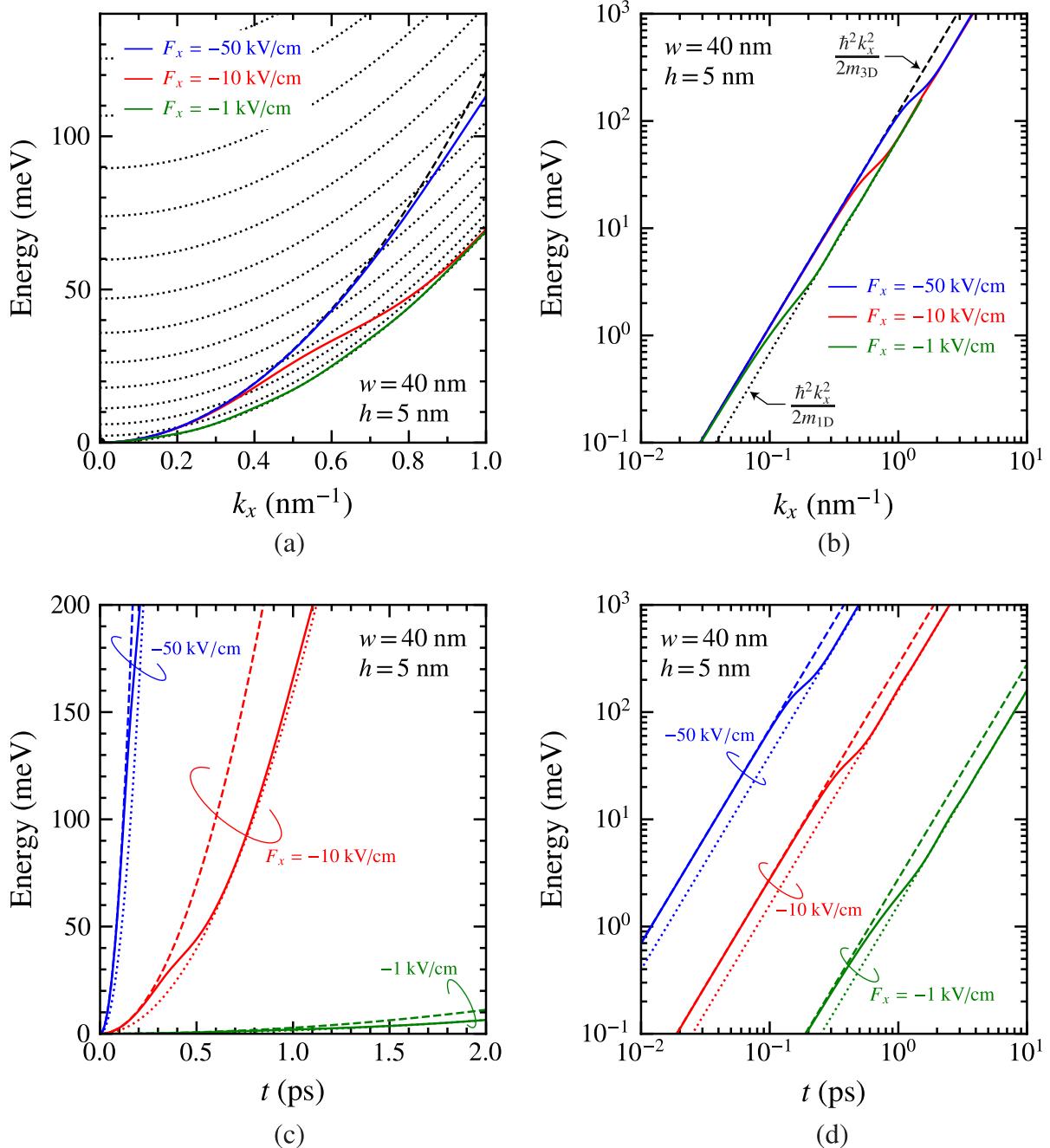


図 5.5: 時刻  $t = 0$  に初期状態 ( $n_0 = 1, k_0 = 0$ ) であった電子について, 平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x(t))$  を実線で, サブバンド構造  $E_{nk_x}$  を点線で,  $\bar{E}_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x(t))$  を破線で示す. 縦軸の原点を  $n = 1$  のサブバンド端とした. 井戸幅は  $w = 40 \text{ nm}, h = 5 \text{ nm}$  とした.  $F_x = -50, -10, -1 \text{ kV/cm}$  の場合の結果をそれぞれ, 青線, 赤線, 緑線でプロットした. (a)(b) では横軸を波数  $k_x$  とした. 一方, (c)(d) では横軸を波数から,  $k_x(t) = -eF_x t/\hbar$  を用いて時間に変換した結果を示す. (c)(d) には,  $n = 1$  のサブバンド構造のみを点線で示した. (b) は (a) の両対数プロット, (d) は (c) の両対数プロットである. 逆有効質量テンソルは式 (5.33) を用いた.

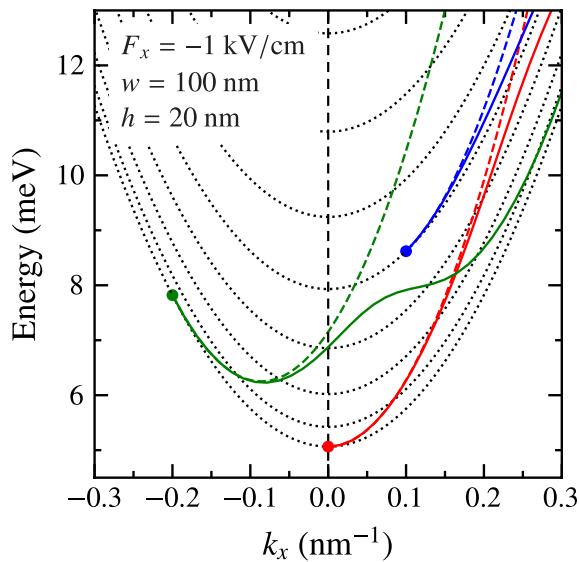


図 5.6: 電子の初期状態を  $(n_0 = 0, k_0 = 0)$ ,  $(n_0 = 5, k_0 = 0.1 \text{ nm}^{-1})$ ,  $(n_0 = 1, k_0 = -0.2 \text{ nm}^{-1})$  とした場合における平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}(k_x)$  をそれぞれ赤線, 青線, 緑線で示す. 対応する  $E_{n_0 k_0}^{\text{init}}(k_x)$  をそれぞれ赤破線, 青破線, 緑破線で示す. 点線は, サブバンド構造  $E_{n k_x}$  を表す. 井戸幅を  $w = 100 \text{ nm}$ ,  $h = 20 \text{ nm}$ , 電界を  $F_x = -1 \text{ kV/cm}$  とした. 逆有効質量テンソルは式 (5.33) を用いた.

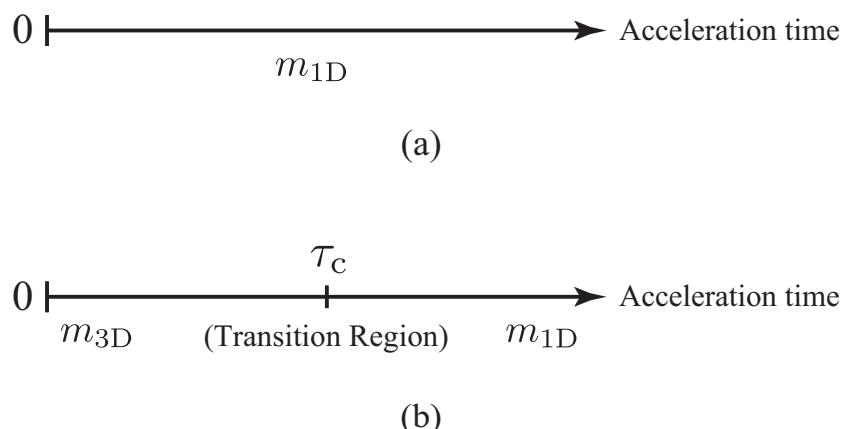


図 5.7: 加速時間による加速時有効質量の変化の模式図. (a) 自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合. 電子は加速しありからつねに  $m_{1D}$  で加速される. (b) 自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合. 電子は加速しありからおよそ  $\tau_c$  まで有効質量  $m_{3D}$  で加速され, その後  $m_{1D}$  で加速される.

電界に対しておよそ  $\tau_c \propto |F_x|^{-1/2}$  の依存性がある。

式(5.31)より, Si の伝導帯谷では必ず  $m_{3D} < m_{1D}$  である。したがって, 自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合, ドリフト速度は実際よりも低く計算される。このことについて, つきの極端な2つの例を考察する。

はじめに, すべての電子の自由走行時間が  $\tau_c$  よりも長い場合を考える。このとき, 自由走行時サブバンド間遷移を考慮してもしなくとも, すべての電子の加速時有効質量は  $m_{1D}$  となる。そのため, 自由走行時サブバンド間遷移を考慮してもしなくともドリフト速度は変わらない。すなわち,

$$v_{KI} = v_o \quad (5.57)$$

となる。ここで, 自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合のドリフト速度を  $v_o$ , 自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合のドリフト速度を  $v_{KI}$  とした。

つぎに, すべての電子の自由走行時間が  $\tau_c$  よりも短い場合を考える。このとき, 自由走行時サブバンド間遷移を考慮すると, すべての電子の加速時有効質量は  $m_{3D}$  となる。そのため,  $m_{3D} < m_{1D}$  に注意すると, 自由走行時サブバンド間遷移を考慮する場合, これを無視した場合に比べてドリフト速度は大きくなる。より正確には,

$$v_{KI} = v_o \times \frac{m_{1D}}{m_{3D}} \quad (5.58)$$

となる。

以上の2つの極端な例とは異なり, 実際には,  $\tau_c$  よりも自由走行時間が長い電子もあれば, 短い電子も存在する。したがって, つきの不等式が成り立つと考えられる。

$$v_o \leq v_{KI} \leq v_o \times \frac{m_{1D}}{m_{3D}} \quad (5.59)$$

電子の自由走行時間は, 量子緩和時間  $\tau_{nk_x}^q$  (あるいはその逆数である散乱確率) で決まる。そのため,  $v_{KI}$  の実際の値は,  $\tau_c$  と  $\tau_{nk_x}^q$  の兼ね合いで決まる。

## 5.4 自由走行時サブバンド間遷移を考慮したモンテカルロシミュレーション

前節では, 加速はじめから  $\tau_c$  までに散乱される電子の割合が多いほど, 自由走行時サブバンド間遷移の効果が大きくなることを定性的に説明した。本節では, 標準的な一粒子モンテカルロシミュレーションとKI方程式とを組み合わせ, 自由走行時サブバンド間遷移が輸送特性に与える影響を定量的に調べた結果を述べる。

### 5.4.1 フォノン散乱

本研究では, フォノン散乱過程として音響フォノン散乱および無極性光学フォノン散乱を考慮した[3, 11, 12, 22]。まず, 図5.8に示すように, 6つの伝導帯谷それぞれに  $v = 1, 2, \dots, 6$  とラベルを割り当てた。つぎに, 輸送方向( $x$ 軸方向)と基板面方位( $z$ 軸方向)の結晶方位を決め, 式(5.17)

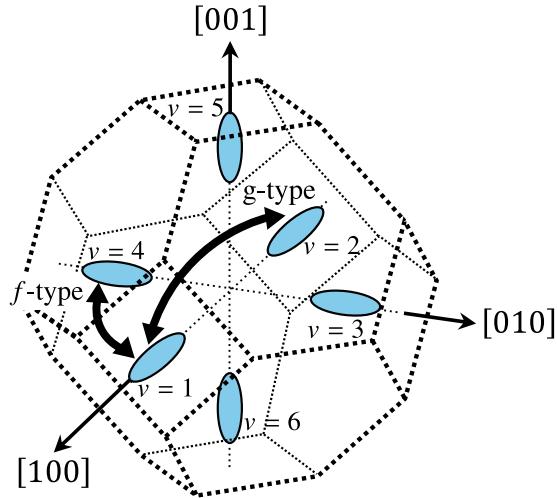


図 5.8: Si 伝導帯端における g-type および f-type フォノン谷間散乱過程 .

表 5.2: 本研究で用いたフォノン散乱のパラメータ .

$m$	Symbol	$\hbar\omega_p$ (meV)	$\Delta E_m$ (meV)	$D_{ac}$ (eV)	$D_p$ (eV/cm)	Transition Type
1	AP-abs	0	0	13		Intra-valley
2	AP-emi	0	0	13		Intra-valley
3	$f$ -TA-abs	19	+19		$3 \times 10^7$	$f$ -type
4	$f$ -TA-emi	19	-19		$3 \times 10^7$	$f$ -type
5	$f$ -LA-abs	47	+47		$2 \times 10^8$	$f$ -type
6	$f$ -LA-emi	47	-47		$2 \times 10^8$	$f$ -type
7	$f$ -TO-abs	59	+59		$2 \times 10^8$	$f$ -type
8	$f$ -TO-emi	59	-59		$2 \times 10^8$	$f$ -type
9	$g$ -TA-abs	12	+12		$5 \times 10^7$	$g$ -type
10	$g$ -TA-emi	12	-12		$5 \times 10^7$	$g$ -type
11	$g$ -LA-abs	19	+19		$8 \times 10^7$	$g$ -type
12	$g$ -LA-emi	19	-19		$8 \times 10^7$	$g$ -type
13	$g$ -LO-abs	62	+62		$1.1 \times 10^9$	$g$ -type
14	$g$ -LO-emi	62	-62		$1.1 \times 10^9$	$g$ -type

を用いて  $v$  で指定される各谷の逆有効質量テンソルを求めた . 各伝導帯谷に有効質量近似を適用し , 波動関数を式 (5.22) , エネルギーを式 (5.23) とした . 2 次元面内の有効質量方程式 [式 (5.28)] を , 有限差分法を用いて数値的に解くことで , 面内の波動関数  $\zeta_{v,n}(y, z)$  およびサブバンド準位  $\epsilon_{v,n}$  を求めた . ここで , 添字  $v$  は谷を区別するために付した .

以上より , 固有状態は谷を指定する添字  $v$  , サブバンド指数  $n$  , 波数  $k_x$  を用いて  $(v, n, k_x)$  と指定される . また , その固有状態のエネルギーを  $E_{v,n,k_x}$  と表す .

表5.2は、本研究で考慮したフォノン散乱過程を表す。散乱過程を区別するため、各散乱過程にラベル  $m$  ( $= 1, 2, \dots, 14$ ) を割り当てた。奇数番目の散乱過程はフォノン吸収過程、偶数番目の散乱過程はフォノン放出過程を表す。各散乱過程に関与するフォノンのエネルギーを  $\hbar\omega_p$  とした。 $m = 1, 2$  は音響フォノンによる同一谷内散乱であり、 $m = 3, 4, \dots, 14$  は谷間散乱である。谷間散乱には、 $f$ 型か  $g$ 型かを付した[22]。 $D_{ac}$  は音響フォノンの変形ポテンシャル、 $D_p$  は光学フォノンの変形ポテンシャルである。

$m$ 番目の散乱過程に起因して電子が状態  $(v, n, k_x)$  から状態  $(v', n', k'_x)$  へ遷移する遷移確率は、フェルミの黄金則より、つぎのように表される[3, 11, 12, 22]。

$$S_{v,n;v',n'}^{(m)}(k_x, k'_x) = \frac{1}{L} Z_{v,v'}^{(m)} C_m F_{v',n'}^{v,n} \delta(E_{v,n,k_x} - E_{v',n',k'_x} + \Delta E_m) \quad (5.60)$$

ここで、形状因子  $F_{v',n'}^{v,n}$  は、つぎの式で与えられる。

$$F_{v',n'}^{v,n} = \iint |\zeta_{v,n}(y, z) \zeta_{v',n'}(y, z)|^2 dy dz \quad (5.61)$$

$C_m$  は電子とフォノンとの相互作用の強さを表し、

$$C_m = \begin{cases} \frac{\pi k_B T D_{ac}^2}{\rho \hbar v_s^2} & (m = 1, 2) \\ \frac{\pi D_p^2}{\omega_p \rho} n_{\text{ph}}(\hbar\omega_p) & (m = 3, 5, 7, 9, 11, 13) \\ \frac{\pi D_p^2}{\omega_p \rho} [n_{\text{ph}}(\hbar\omega_p) + 1] & (m = 4, 6, 8, 10, 12, 14) \end{cases} \quad (5.62)$$

となる。ここで、 $n_{\text{ph}}(\hbar\omega_p)$  は、フォノン系が温度  $T$  の熱平衡状態のとき、エネルギーが  $\hbar\omega_p$  であるフォノンの数の期待値であり、ボース分布関数に従う。

$$n_{\text{ph}}(\hbar\omega_p) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_p/k_B T} - 1} \quad (5.63)$$

$\rho$  は結晶の密度、 $v_s$  は音速を表す。本研究では、 $\rho = 2329 \text{ kg/m}^3$ 、 $v_s = 9040 \text{ m/s}$  とした[20]。最後に、散乱過程の選択則を表す  $Z_{v,v'}^{(m)}$  の具体的な表式を示す。 $v$  行  $v'$  列の成分を  $Z_{v,v'}^{(m)}$  とする行列を  $Z^{(m)}$  とすると、 $m = 1, 2$  のとき（すなわち、散乱が同一谷内散乱のとき）、

$$Z^{(m)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (m = 1, 2) \quad (5.64)$$

となり、 $m = 3, 4, 5, 6, 7, 8$  のとき（すなわち、散乱が  $f$ 型の谷間散乱のとき）、

$$Z^{(m)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (m = 3, 4, 5, 6, 7, 8) \quad (5.65)$$

となり， $m = 9, 10, 11, 12, 13, 14$  のとき（すなわち，散乱が g 型の谷間散乱のとき），

$$Z^{(m)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (m = 9, 10, 11, 12, 13, 14) \quad (5.66)$$

となる。 $v$  から  $v'$  への散乱が可能なとき， $v'$  から  $v$  への散乱も可能であるため， $Z^{(m)}$  は対称行列となる。

電子が状態  $(v, n, k_x)$  のとき，散乱確率  $W_{v,n,k_x}$  は，

$$\begin{aligned} W_{v,n,k_x} &= \sum_m \sum_{v'} \sum_{n'} \sum_{k'_x} S_{v,n;v',n'}^{(m)}(k_x, k'_x) \\ &= \sum_m \sum_{v'} \sum_{n'} Z_{v,v'}^{(m)} C_m F_{v',n'}^{v,n} g_{v',n'}(E_{v,n,k_x} + \Delta E_m) \end{aligned} \quad (5.67)$$

となる。ここで， $v'$  番目の伝導帯谷における  $n'$  番目のサブバンドの状態密度を，

$$g_{v',n'}(E) = \frac{1}{L} \sum_{k'_x} \delta(E - E_{v',n',k'_x}) = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m_{1D}^{v'}}{2(E - \epsilon_{v',n'})}} \Theta(E - \epsilon_{v',n'}) \quad (5.68)$$

とおいた。 $\Theta(\cdot)$  はヘヴィサイドの階段関数である。 $m_{1D}^{v'}$  は， $v'$  番目の伝導帯谷における輸送方向の有効質量であり，式 (5.30) で定義される。

式 (5.67) の右辺は， $v, n, E_{v,n,k_x}$  で指定される。そのため， $E_{v,n,k_x}$  をあらためて  $E$  とおくと， $v$  番目の伝導帯谷の  $n$  番目のサブバンドに属しエネルギー  $E$  の電子の散乱確率は，

$$W_{v,n}(E) = \sum_m \sum_{v'} \sum_{n'} Z_{v,v'}^{(m)} C_m F_{v',n'}^{v,n} g_{v',n'}(E + \Delta E_m) \quad (5.69)$$

と表せる。ただし，この式を  $E$  の関数として見ると，厳密には  $E > \epsilon_{v,n}$  の範囲でのみ定義される。

式 (5.68) より，散乱確率は，終状態のエネルギー  $E + \Delta E_m$  がサブバンド端のエネルギー  $\epsilon_{v',n'}$  と一致するとき正の無限大に発散する。このように散乱確率が高い場合には，2.6.2 節で述べたようにフェルミの黄金則が成り立たない。したがって，本節のように，式 (5.60) 用いて散乱確率を計算できない。実際には，高散乱領域では状態密度が幅を持ち，散乱確率は有限の値に留まる。本研究では，図 5.9 に示すように，解析的に放物線で表されるサブバンド構造を，サブバンド端から  $\Delta E$  の等間隔で離散化し，途中を直線で補完したものをモンテカルロシミュレーションで用いた。この離散化したサブバンド構造を用いた場合，解析的にサブバンド構造を表現した場合とは異なり，サブバンド端で状態密度が発散しない。

#### 5.4.2 自由走行を修正したモンテカルロシミュレーションのアルゴリズム

本研究では，フォノン散乱による遷移確率として式 (5.60) を用い，一粒子モンテカルロシミュレーションを行った。散乱確率は，式 (5.67) あるいは式 (5.69) となる。ここで，以下のように自己散乱を導入した。

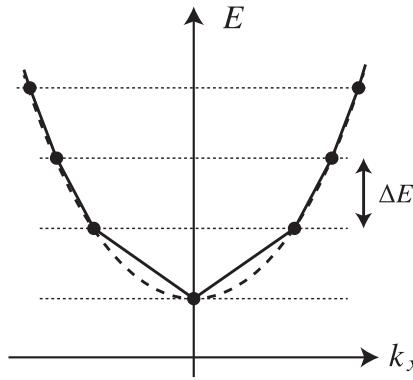


図 5.9: 解析的な放物線バンド構造をエネルギー幅  $\Delta E$  で離散化し、その間を線形補完した模式図。本研究のモンテカルロシミュレーションでは、 $\Delta E = 0.1$  meV とした。

まず、最大散乱確率  $\Gamma$  をつぎのように定める。

$$\Gamma = \max_{v,n,k_x} W_{v,n,k_x} \quad (5.70)$$

電子が状態  $(v, n, k_x)$  のとき、自己散乱の散乱確率  $W_{v,n,k_x}^{\text{self}}$  を、つぎのように定義する。

$$W_{v,n,k_x}^{\text{self}} = \Gamma - W_{v,n,k_x} \quad (5.71)$$

時刻  $t = -0$  に散乱され、時刻  $t = +0$  に状態  $(v_0, n_0, k_0)$  に遷移してきた電子が、一定電界  $F_x$  で加速されるとする。時間に依存する波数  $k_x(t)$  は、

$$k_x(t) = k_0 - \frac{eF_x}{\hbar}t \quad (5.72)$$

となる。このとき、自己散乱も含めたすべての散乱過程を考慮した散乱確率は、

$$W_{v_0,n_0,k_x(t)}^{\text{tot}} = W_{v_0,n_0,k_x(t)} + W_{v_0,n_0,k_x(t)}^{\text{self}} = \Gamma \quad (5.73)$$

となる。

$t = +0$  のとき状態  $(v_0, n_0, k_0)$  にいる電子について、自由走行時のサブバンド指数変化は KI 方程式を数値的に解くことで求まる。具体的には、 $t = +0$  における初期条件を、

$$a_n(+0) = \delta_{n,n_0} \quad (5.74)$$

として式 (5.40) をルンゲ・クッタ法を用いて数値的に解くことで、 $a_n(t)$  を求めることができる。この  $a_n(t)$  を用いて、サブバンド指数にわたる平均的な散乱確率をつぎの式で計算する。

$$\langle W_{v_0,n_0,k_x(t)}^{\text{tot}} \rangle = \sum_n |a_n(t)|^2 \left( W_{v_0,n_0,k_x(t)} + W_{v_0,n_0,k_x(t)}^{\text{self}} \right) = \langle W_{v_0,n_0,k_x(t)} \rangle + \langle W_{v_0,n_0,k_x(t)}^{\text{self}} \rangle \quad (5.75)$$

ここで、

$$\langle W_{v_0,n_0,k_x(t)} \rangle = \sum_n |a_n(t)|^2 W_{v_0,n_0,k_x(t)} \quad (5.76)$$

$$\langle W_{v_0, n_0, k_x(t)}^{\text{self}} \rangle = \sum_n |a_n(t)|^2 W_{v_0, n, k_x(t)}^{\text{self}} \quad (5.77)$$

とおいた。式(5.44), 式(5.73)より, 式(5.75)は,

$$\langle W_{v_0, n_0, k_x(t)}^{\text{tot}} \rangle = \langle W_{v_0, n_0, k_x(t)} \rangle + \langle W_{v_0, n_0, k_x(t)}^{\text{self}} \rangle = \Gamma \quad (5.78)$$

となる。したがって, 自由走行時間  $t_{\text{FF}}$  は, 区間  $(0, 1)$  の一様分布からサンプリングした乱数  $r$  を用いて,

$$t_{\text{FF}} = \frac{-\log r}{\Gamma} \quad (5.79)$$

と与えられる [23, 24]。

自由走行時間  $t_{\text{FF}}$  経過後において, 自己散乱ではない真の散乱が起こる確率は,  $\langle W_{v_0, n_0, k_x(t)} \rangle / \Gamma$  である。一方, 自己散乱が起こる確率は  $\langle W_{v_0, n_0, k_x(t)}^{\text{self}} \rangle / \Gamma = 1 - \langle W_{v_0, n_0, k_x(t)} \rangle / \Gamma$  である。真の散乱が起こるか自己散乱が起こるかは, 乱数を用いて確率的に決定する。

自己散乱が選ばれた場合, 再び式(5.79)から  $t_{\text{FF}}$  を決定し, 自由走行を継続する。そのさい, KI 方程式は, 1つ前の  $t = -0$  で起こった散乱過程によって決まった初期条件 [式(5.74)] を継続し, 続きから時間発展させる。結局のところ, 自己散乱では何も起こらない。

真の散乱が選ばれた場合, まず散乱の始状態を  $|a_n(t)|^2$  の重みに基づいて確率的に決定する。すなわち, 散乱直前に電子がサブバンド指数  $n_i$  にある確率を  $|a_{n_i}(t)|^2$  とし,  $n_i$  を乱数を用いて決定する。サブバンド指数を決めた後は電子が状態  $(v_0, n_i, k_x(t))$  にあるとし, フォノン散乱の遷移確率を用いた標準的な散乱の終状態決定アルゴリズム [3, 11, 12, 22] から, 散乱の終状態  $(v_f, n_f, k_f)$  を決定する。

最後に, ドリフト速度の計算方法を述べる。ある1回の自由走行にともなう電子のエネルギー変化を  $\Delta E_{\text{FF}}$  とする。自由走行終了時の電子のエネルギーは,  $|a_n(t)|^2$  に基づきサブバンド指数を確定させたときのエネルギーとする。すなわち, 上述した記法を用いると,

$$\Delta E_{\text{FF}} = E_{v_0, n_i, k_x(t)} - E_{v_0, n_0, k_0} \quad (5.80)$$

となる。電子の速度を  $v(t)$  と表すと, エネルギー保存則より,

$$\Delta E_{\text{FF}} = - \int_{\text{FF}} v(t) e F_x dt \quad (5.81)$$

と表せると考えられる。ここで, 右辺の積分の範囲は, ある1回の自由走行である。シミュレーション時間を  $t_{\text{tot}}$  とし, その間に起こった1回の自由走行にともなうエネルギー変化  $\Delta E_{\text{FF}}$  をすべて足した値を  $\Delta E_{\text{FF}}^{\text{tot}}$  とすると, つきの式が成り立つ。

$$\Delta E_{\text{FF}}^{\text{tot}} = - \int_0^{t_{\text{tot}}} v(t) e F_x dt \quad (5.82)$$

この式から, ドリフト速度は,

$$v = \frac{1}{t_{\text{tot}}} \int_0^{t_{\text{tot}}} v(t) dt = \frac{\Delta E_{\text{FF}}^{\text{tot}}}{-e F_x t_{\text{tot}}} \quad (5.83)$$

と求めることができる。

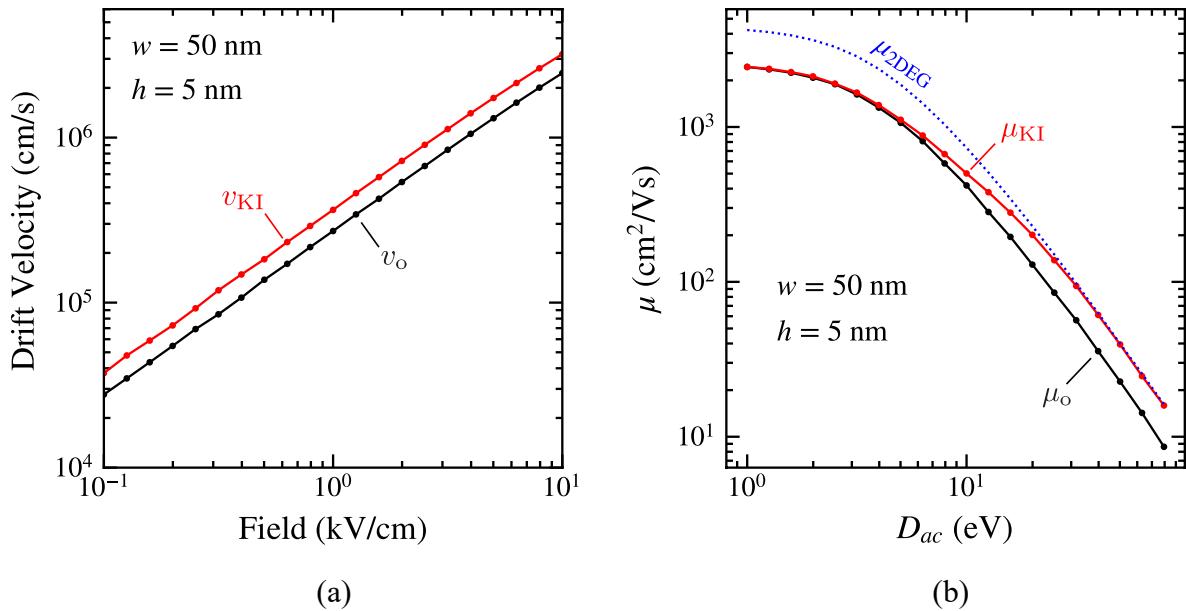


図 5.10: (110) 面における [001] 谷の電子について考え, 表 5.2 の  $m = 1, 2, 13, 14$  の 4 つの散乱過程のみを考慮した場合のモンテカルロシミュレーション結果.  $y$  軸方向の井戸幅は  $w = 50$  nm,  $z$  軸方向の井戸幅は  $h = 5$  nm とした. (a) ドリフト速度の電界依存性. 黒線は自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合のドリフト速度  $v_o$ , 赤線は KI 方程式を数値的に解きサブバンド間遷移を考慮した場合のドリフト速度  $v_{KI}$ . (b) 移動度の変形ポテンシャル  $D_{ac}$  依存性. 黒線は自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_o$ , 赤線は KI 方程式を数値的に解き自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  を表す. 青線は,  $h = 5$  nm の  $z$  軸方向の無限量子井戸に閉じ込められた 2 次元電子ガス (2DEG) を仮定したモンテカルロシミュレーションから求めた移動度  $\mu_{2DEG}$  を表す. 移動度は,  $F_x = 0.5$  kV/cm におけるドリフト速度を電界で割ることで算出した.

### 5.4.3 輸送特性のシミュレーション結果

#### 2 つの伝導帯谷を考慮した場合

(110) 面における [001] 谷の電子について考え, 輸送方向 ( $x$  軸方向) を, 図 5.2 から  $-\pi/4$  回転させた場合を考える. この状況において, 表 5.2 の  $m = 1, 2, 13, 14$  の 4 つの散乱過程のみを考慮した場合のシミュレーション結果である図 5.10 および図 5.11 について考察する.  $m = 1, 2$  の散乱過程は同一谷内散乱,  $m = 13, 14$  の散乱過程は g-type の谷間散乱のため, 電子は [001] 谷あるいは [001] 谷にのみ存在しうる.  $xy$  面内の閉じ込めポテンシャルは, 無限量子井戸型ポテンシャルとし,  $z$  軸方向の井戸幅を  $h$ ,  $y$  軸方向の井戸幅を  $w$  とした.

図 5.10(a) はモンテカルロシミュレーションから得たドリフト速度の電界依存性である. 黒線は自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合のドリフト速度  $v_o$ , 赤線は KI 方程式を数値的に解きサブバンド間遷移を考慮した場合のドリフト速度  $v_{KI}$  表す. 井戸幅は  $w = 50$  nm,  $h = 5$  nm とした. サブバンド間遷移を考慮すると, 考慮しない場合に比べて電界に依存しない定数倍だけドリフト速度が大きくなることがわかる. すなわち,  $v_{KI}/v_o$  は 1 以上でかつ電界に依存しない.

したがって、サブバンド間遷移を無視した場合と同様に、サブバンド間遷移を考慮した場合においても移動度を定義できる。本研究においてモンテカルロシミュレーションから求めた移動度は、 $F_x = 0.5 \text{ kV/cm}$  におけるドリフト速度を求め、それを電界で割ることによって算出した。すなわち、自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_o$  と、自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  をそれぞれ、つぎの式で計算した。

$$\mu_o = \frac{v_o}{F_x}, \quad \mu_{KI} = \frac{v_{KI}}{F_x} \quad (5.84)$$

図 5.10(b) は移動度の変形ポテンシャル  $D_{ac}$  依存性である。通常、 $D_{ac}$  は音響フォノン散乱の散乱強度を決める定数である。ここでは、 $t < \tau_c$  で散乱される電子の割合の変化に対して  $v_{KI}/v_o$  がどのように変化するかを調べるために、 $D_{ac}$  を変化させてシミュレーションを行った。黒線は自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_o$ 、赤線は KI 方程式を数値的に解き自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  を表す。青線は、 $h = 5 \text{ nm}$  の  $z$  軸方向の無限量子井戸に閉じ込められた 2 次元電子ガス (2DEG) を仮定したモンテカルロシミュレーションから求めた移動度  $\mu_{2DEG}$  を表す<sup>3</sup>。 $\mu_{2DEG}$  は  $\mu_o$  を  $m_{1D}/m_{3D}$  倍した値とよく一致した。

変形ポテンシャル  $D_{ac}$  の増加にともなって散乱確率が増加するため、いずれの場合も移動度は低下していくことがわかる。一方、 $D_{ac}$  が小さい場合  $\mu_{KI}$  は  $\mu_o$  に漸近し、 $D_{ac}$  が大きい場合  $\mu_{KI}$  は  $\mu_{2DEG}$  に漸近することがわかる。

散乱確率が小さい場合、 $\tau_c < t$  で散乱される電子の割合が多くなる。これに対して散乱確率が大きい場合、 $t < \tau_c$  で散乱される電子の割合が多くなる。 $\tau_c$  の前後で加速時有効質量が軽い  $m_{3D}$  から重い  $m_{1D}$  へ切り替わることから、 $D_{ac}$  が小さい場合  $\mu_{KI}$  は  $\mu_o$  に漸近し、 $D_{ac}$  が大きい場合  $\mu_{KI}$  は  $\mu_{2DEG}$  に漸近したと考えられる。このシミュレーション結果は、5.3.3 節で定性的に述べた式 (5.59) と整合していることがわかる。

図 5.11 は、 $z$  軸方向の井戸幅が  $h = 5 \text{ nm}$  または  $h = 3 \text{ nm}$  の場合における、移動度の  $y$  軸方向の井戸幅  $w$  依存性を表す。実線は、自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_o$  を表し、破線は、自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  を表す。点線は、 $z$  軸方向の無限量子井戸に閉じ込められた 2DEG を仮定したモンテカルロシミュレーションから求めた移動度  $\mu_{2DEG}$  を表す。

まず、 $\mu_o$  は、 $w = 20 \text{ nm}$  程度で  $\mu_{2DEG}$  よりも低い値で飽和することがわかる。この結果は、 $x$  軸と  $y$  軸方向に閉じ込められた 1DEG に基づくシミュレーションにおいて、 $y$  軸方向の閉じ込め幅  $w$  を無限に広げた極限が、 $z$  軸方向に閉じ込められた 2DEG の結果と一致しないという不自然な結果である。

一方、 $\mu_{KI}$  は、 $w$  が小さい場合には  $\mu_{KI}/\mu_o = 1$  であるが、 $w$  が大きくなるにつれて  $\mu_{2DEG}$  に漸近することがわかる。この理由は、5.3.3 節で示したように、 $w$  が大きくなるにつれて  $\tau_c$  が長くなるためである。

$w$  が小さいときは  $\tau_c$  が短くなるため、 $\tau_c < t$  で散乱される電子の割合が多くなる。これに対して

<sup>3</sup> 今の場合、 $w_{13} = 0$  であるため、 $z$  軸方向に閉じ込められた 2DEG では自由走行時サブバンド間遷移は生じない。そのため、ここでは、標準的な 2DEG のモンテカルロシミュレーション [3] を行った。

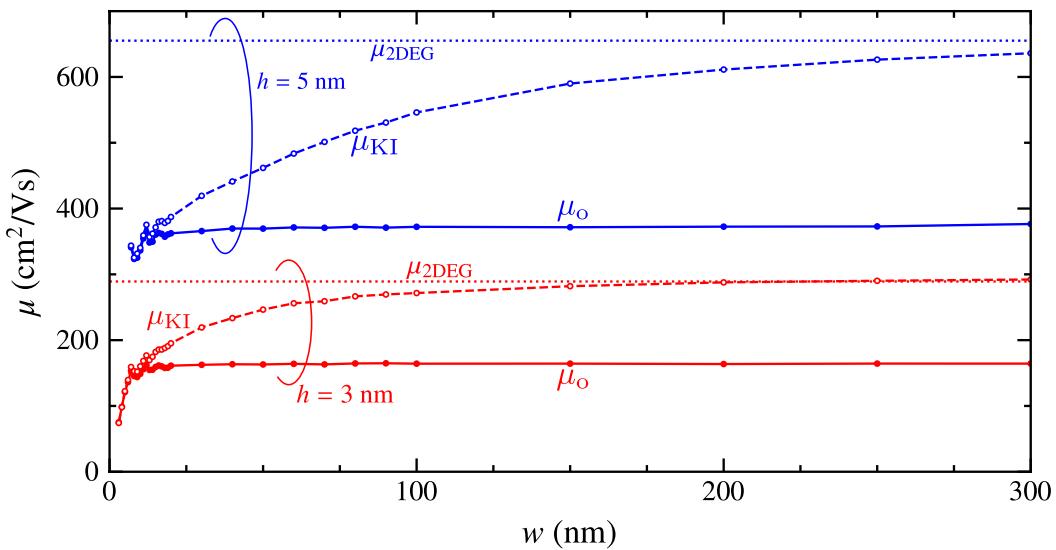


図 5.11:  $z$  軸方向の井戸幅が  $h = 5$  nm または  $h = 3$  nm の場合における、移動度の  $y$  軸方向の井戸幅  $w$  依存性。 $(110)$  面における  $[001]$  谷の電子について考え、表 5.2 の  $m = 1, 2, 13, 14$  の 4 つの散乱過程のみを考慮した。実線は、自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_0$  を表す。破線は、KI 方程式を数値的に解き自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  を表す。点線は、 $z$  軸方向の無限量子井戸に閉じ込められた 2DEG を仮定したモンテカルロミュレーションから求めた移動度  $\mu_{2DEG}$  を表す。移動度は、 $F_x = 0.5$  kV/cm におけるドリフト速度を電界で割ることで算出した。

$w$  が大きいときは  $\tau_c$  が長くなるため、 $t < \tau_c$  で散乱される電子の割合が多くなる。 $\tau_c$  の前後で加速時有効質量が軽い  $m_{3D}$  から重い  $m_{1D}$  へ切り替わることから、 $w$  が小さい場合には  $\mu_{KI}/\mu_0 = 1$  となり、 $w$  が大きくなるにつれて  $\mu_{KI}$  は  $\mu_{2DEG}$  に漸近したと考えられる。

以上のように、 $x$  軸と  $y$  軸方向に閉じ込められた 1DEG に基づくシミュレーションにおいて、 $y$  軸方向の閉じ込め幅  $w$  を無限に広げた極限が、 $z$  軸方向に閉じ込められた 2DEG の結果と一致するという自然な結果は、自由走行時サブバンド間遷移を考慮することで達成できることがわかる。

### 6 つの伝導帯谷を考慮した場合

6 つの伝導帯谷すべてを考慮した場合のシミュレーション結果について述べる。散乱過程は、表 5.2 の  $m = 1, 2, \dots, 13, 14$  の 14 個を考慮した。図 5.12 において、 $h = 5$  nm とした場合における、移動度の  $w$  依存性を示す。丸印は自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_0$ 、三角印は自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  をそれぞれ表す。今の場合、 $z$  軸方向の井戸幅が狭いため、 $w_{13}$  に由来する自由走行時サブバンド間遷移の影響は無視できる。一方、 $y$  軸方向の井戸幅が広くなるにつれて、 $w_{12}$  に由来する自由走行時サブバンド間遷移の影響が表れる。

図 5.12(a,b,c) はそれぞれ、 $z$  軸に垂直な面の面方位が  $(001)$ ,  $(110)$ ,  $(111)$  の場合の結果である。図 5.12(a) において、赤線、青線の輸送方向はそれぞれ、 $[100]$ ,  $[110]$  である。図 5.12(b) において、赤線、青線、緑線の輸送方向はそれぞれ、 $[001]$ ,  $[1\bar{1}0]$ ,  $[1\bar{1}1]$  である。図 5.12(c) において、赤線、青線の輸送方向はそれぞれ、 $[\bar{2}11]$ ,  $[0\bar{1}1]$  である。図 5.12 の各線には、 $x$  軸方向 (輸送方向) の

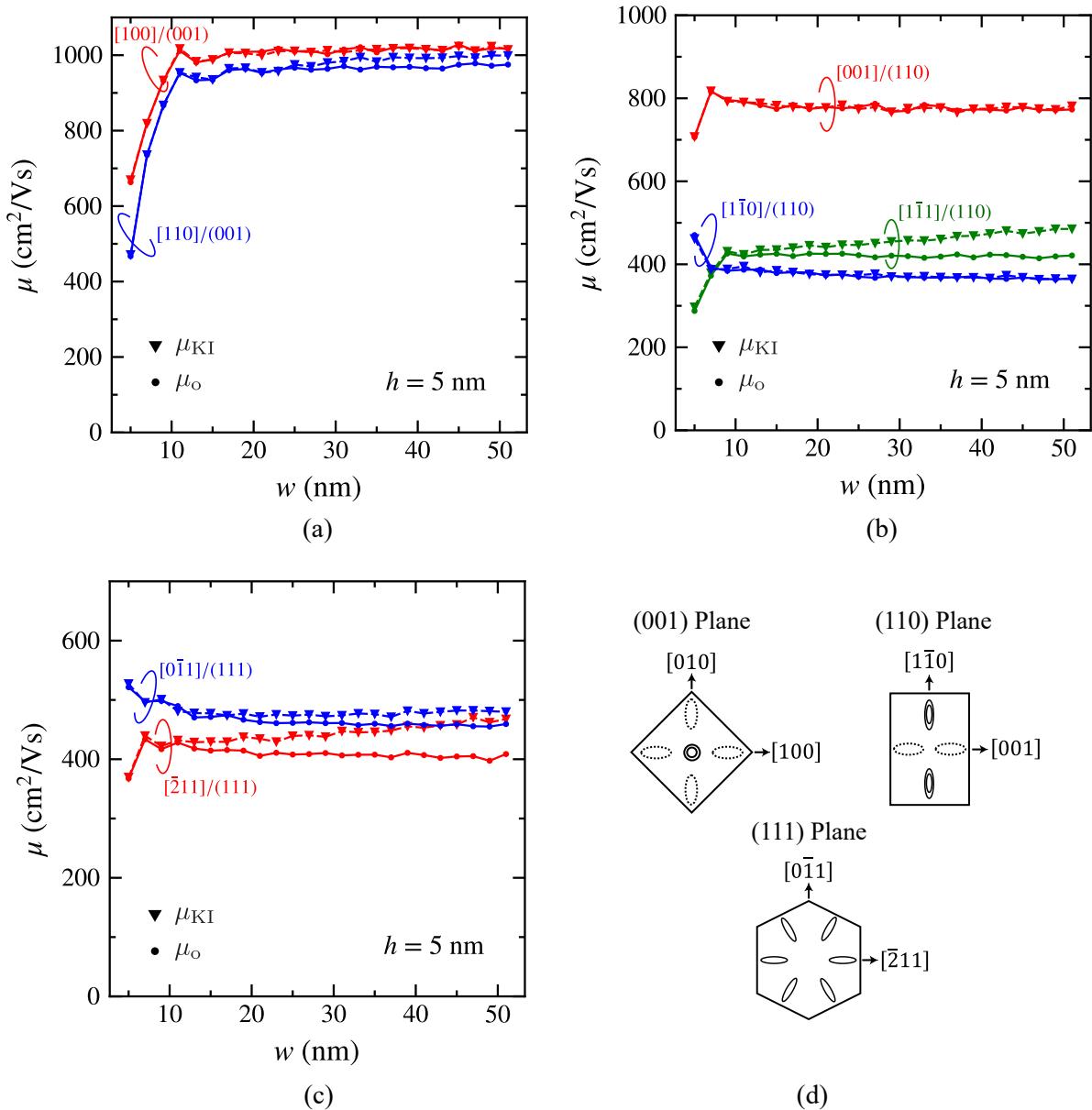


図 5.12: 6 つの伝導帯谷を考慮したモンテカルロシミュレーションから求めた移動度の  $y$  軸方向の井戸幅  $w$  依存性。散乱過程として、表 5.2 の  $m = 1, 2, \dots, 13, 14$  の 14 個を考慮した。(a)(b)(c) 丸印は自由走行時サブバンド間遷移を無視した場合の移動度  $\mu_o$ 、三角印は自由走行時サブバンド間遷移を考慮した場合の移動度  $\mu_{KI}$  をそれぞれ表す。 $h = 5 \text{ nm}$  とした。図中に、 $x$  軸方向(輸送方向)の結晶方位を  $[\dots]$ 、 $z$  軸方向の結晶方位を  $(\dots)$  として、 $[\dots]/(\dots)$  と付した。移動度は、 $F_x = 0.5 \text{ kV/cm}$  におけるドリフト速度を電界で割ることで算出した。(d) は図 5.2 と同じ図である。

結晶方位を  $[\dots]$  ,  $z$  軸方向の結晶方位を  $(\dots)$  として ,  $[\dots]/(\dots)$  と付した .

まず ,  $(001)$  面上のナノシートについて考える .  $[100]/(001)$  では , すべての伝導帯谷において  $w_{12} = w_{13} = 0$  である . したがって , 自由走行時サブバンド間遷移は起こらないため ,  $v_{KI}/v_o = 1$  である . 一方 ,  $[110]/(001)$  では ,  $[010]$  谷と  $[100]$  谷が  $w_{12} \neq 0$  であるため , 自由走行時サブバンド間遷移が起こり ,  $w$  が大きくなるにつれて  $v_{KI}/v_o$  は大きくなる . つぎに ,  $(110)$  面上のナノシートについて考える .  $[001]/(110)$  と  $[1\bar{1}0]/(110)$  では , すべての伝導帯谷において  $w_{12} = 0$  である . そのため ,  $w$  を大きくしても ,  $v_{KI}/v_o = 1$  である . 一方 ,  $[1\bar{1}1]/(110)$  では , すべての伝導帯谷において  $w_{12} \neq 0$  である . そのため ,  $w$  が大きくなるにつれて ,  $v_{KI}/v_o$  は大きくなる . 同様に ,  $[211]/(111)$  と  $[0\bar{1}1]/(111)$  でも ,  $w$  が大きくなるにつれて ,  $v_{KI}/v_o$  は大きくなる .

以上の結果をまとめると ,  $z$  軸方向の閉じ込め幅  $h$  が狭く  $w_{13}$  に由来する自由走行時サブバンド間遷移が無視できる場合 ,  $w_{12}$  に由来する自由走行時サブバンド間遷移の効果は ,

1.  $(001)$  面上のナノシート構造では .  $[100]/(001)$  の場合無視できる .
2.  $(110)$  面上のナノシート構造では ,  $[001]/(110)$  または  $[1\bar{1}0]/(110)$  の場合無視できる .
3.  $(111)$  面上のナノシート構造では無視できない .

となる . ただし , 図 5.12 より , いずれの結晶方位でも  $w$  が小さい場合には , 自由走行時サブバンド間遷移の効果  $v_{KI}/v_o$  は比較的小さいと言える .

## 5.5 緩和時間近似に基づく電子移動度のシミュレーション

前節では , 任意の結晶方位からなるナノシート構造において , 自由走行時サブバンド間遷移が輸送特性に与える影響を定量的に調べた . その結果 , デバイス構造によっては自由走行時サブバンド間遷移を無視できることを明らかにした . 幸いにも , 応用上関心のあるデバイス構造では , 自由走行時サブバンド間遷移を無視できる場合が多い . そのため , 本節では , 自由走行時サブバンド間遷移を無視し , 様々な結晶方位のナノシート構造の電子移動度を計算した結果を述べる .

電子状態計算では , シュレディンガー方程式とポアソン方程式との自己無撞着計算を行った . 輸送計算では , フォノン散乱に加えて , ラフネス散乱を考慮した . 移動度は緩和時間近似を用いて計算した .

### 5.5.1 久保-Greenwood 公式

2.7.1 節より , 1 次元電子ガスのボルツマン輸送方程式は ,

$$-\frac{\partial f_n(k)}{\partial k} \cdot \frac{eF}{\hbar} = S_n^{\text{in}}(k) - S_n^{\text{out}}(k) \quad (5.85)$$

となる . ここで , 分布関数  $f$  は  $x$  軸方向に依存せず一様であり , かつ , 時間にも依存しないと仮定した . 略記のため , 伝導帯谷を指定する添字とサブバンド指数をまとめて  $n$  と表している . また ,  $x$  軸方向の波数を  $k$  ,  $x$  軸方向の電界を  $F$  と表す .

電界が小さく分布関数  $f$  が熱平衡分布  $f_0$  と大きく変わらない場合、式 (5.85) は、

$$-\frac{\partial f_n(k)}{\partial k} \cdot \frac{eF}{\hbar} = -\frac{\delta f_n(k)}{\tau_{nk}} \quad (5.86)$$

と表せると考えられる [3, 20, 25]。ここで、分布関数の熱平衡分布からのずれを  $\delta f_n(k) = f_n(k) - f_0(E_{nk})$  とおいた。 $f_0(E)$  はフェルミ分布関数である。 $\tau_{nk}$  は運動量緩和時間であり、具体的な表式は後で述べる。電界が小さいという仮定のもと、式 (5.86) の左辺は、

$$-\frac{\partial f_n(k)}{\partial k} \cdot \frac{eF}{\hbar} = -\frac{\partial f_0(E_{nk})}{\partial E} \frac{\partial E_{nk}}{\partial k} \frac{eF}{\hbar} - \frac{\partial(\delta f_n(k))}{\partial k} \cdot \frac{eF}{\hbar} \approx -v_{nk} eF \frac{\partial f_0(E_{nk})}{\partial E} \quad (5.87)$$

と近似できる [3, 20, 25]。ここで、 $v_{nk} = \hbar^{-1} \partial E_{nk} / \partial k$  とおいた。式 (5.87) を式 (5.86) に代入すると、つぎの式が得られる。

$$\delta f_n(k) = \tau_{nk} v_{nk} eF \frac{\partial f_0(E_{nk})}{\partial E} \quad (5.88)$$

したがって、サブバンド指数が  $n$  である電子に由来する電流は、

$$J_n = \frac{-en_{\text{sp}}}{L} \sum_k v_{nk} f_n(k) = \frac{-en_{\text{sp}}}{L} \sum_k v_{nk} \delta f_n(k) = \frac{-en_{\text{sp}}}{L} \sum_k \tau_{nk} v_{nk}^2 eF \frac{\partial f_0(E_{nk})}{\partial E} \quad (5.89)$$

と与えられる。ここで、 $v_{nk}$  が  $k$  に関して奇関数的であることより  $\sum_k v_{nk} f_0(k) = 0$  となることを用いた。式 (5.89) より、サブバンド指数が  $n$  である電子に由来する移動度は、つぎの式で求められる。

$$\mu_n = \frac{J_n}{-eF N_n} = \frac{-en_{\text{sp}}}{N_n L} \sum_k \tau_{nk} v_{nk}^2 \left( -\frac{\partial f_0(E_{nk})}{\partial E} \right) \quad (5.90)$$

ここで、サブバンド指数が  $n$  である電子に由来する線電子密度  $N_n$  は、つぎの式で与えられる。

$$N_n = \frac{1}{L} \sum_k f_0(E_{nk}) = \int n_{\text{sp}} g_n(E) f_0(E) dE \quad (5.91)$$

後述するように、運動量緩和時間の  $k$  依存性は、エネルギー  $E_{nk}$  を通してのみ入っているため、 $\tau_{nk} = \tau_n(E_{nk})$  と表せる。また、 $v_{nk}^2 = 2(E_{nk} - \epsilon_n) / m_{1\text{D}}^n$  と表せる。これらを式 (5.90) に代入すると、

$$\begin{aligned} \mu_n &= \frac{-en_{\text{sp}}}{N_n L} \sum_k \tau_n(E_{nk}) \frac{2(E_{nk} - \epsilon_n)}{m_{1\text{D}}^n} \left( -\frac{\partial f_0(E_{nk})}{\partial E} \right) \\ &= \frac{-en_{\text{sp}}}{N_n L} \sum_k \int dE \delta(E - E_{nk}) \tau_n(E) \frac{2(E - \epsilon_n)}{m_{1\text{D}}^n} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) \\ &= \frac{-en_{\text{sp}}}{N_n} \int g_n(E) \tau_n(E) \frac{2(E - \epsilon_n)}{m_{1\text{D}}^n} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE \end{aligned} \quad (5.92)$$

となる<sup>\*4</sup>。すべてのサブバンドの電子を考慮した場合の移動度は、すべてのサブバンドの電子に由

<sup>\*4</sup> 式 (5.92) を、つぎの表式まで変形した式がよく引用される。

$$\mu_n = \frac{-e}{m_{1\text{D}}^n} \frac{\int \tau_n(E) (E - \epsilon_n)^{1/2} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE}{\int (E - \epsilon_n)^{1/2} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE}$$

来るする電流  $J$  を、すべてのサブバンドの電子に由来する線電子密度  $N$  で割れば求まる。

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{J}{-eFN} = \frac{\sum_n -eN_n\mu_n F}{-eFN} = \sum_n \frac{N_n}{N} \mu_n \\ &= \frac{-en_{\text{sp}}}{N} \int dE \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) \sum_n g_n(E) \tau_n(E) \frac{2(E - \epsilon_n)}{m_{1D}^n}\end{aligned}\quad (5.93)$$

ここで、すべてのサブバンドの電子に由来する線電子密度  $N$  は、つぎの式で与えられる。

$$N = \sum_n N_n \quad (5.94)$$

式 (5.92) および式 (5.93) は久保-Greenwood 公式として知られている [3]。

なお、 $f_0(E)$  の導関数を  $-1$  倍した関数は、つぎのように表せる<sup>5</sup>。

$$-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} = \frac{1}{k_B T} f_0(E) (1 - f_0(E)) = \frac{1}{4k_B T \cosh^2 [(E - E_F)/2k_B T]} \quad (5.95)$$

この関数は、全エネルギー範囲で積分すると  $1$  になる。

$$\int \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE = 1 \quad (5.96)$$

$E$  が  $E_F$  よりも十分に大きい範囲で、つぎのように近似できる。

$$-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \approx \frac{1}{k_B T} f_0(E) \approx \frac{e^{E_F/k_B T}}{k_B T} e^{-E/k_B T} \quad (5.97)$$

$T \rightarrow 0$  の極限で、

$$-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} = \delta(E - E_F) \quad (5.98)$$

となる。

### 5.5.2 運動量緩和時間

式 (5.85) の右辺を、遷移確率を用いて表すと、

$$S_n^{\text{in}}(k) - S_n^{\text{out}}(k) = [1 - f_n(k)] \sum_{n'k'} S_{n',n}(k',k) f_{n'}(k') - f_n(k) \sum_{n'k'} S_{n,n'}(k,k') [1 - f_{n'}(k')] \quad (5.99)$$

となる。この式に、 $f_n(k) = f_0(k) + \delta f_n(k)$  および  $f_{n'}(k') = f_0(k') + \delta f_{n'}(k')$  を代入し、 $\delta f_n(k)$  および  $\delta f_{n'}(k')$  に関して 1 次の項のみを残すと、

$$S_n^{\text{in}}(k) - S_n^{\text{out}}(k) = -\delta f_n(k) \sum_{n'k'} S_{n,n'}(k,k') \frac{1 - f_0(E_{n'k'})}{1 - f_0(E_{nk})} \left[ 1 - \frac{\delta f_{n'}(k')}{\delta f_n(k)} \frac{f_0(E_{nk})}{f_0(E_{n'k'})} \frac{1 - f_0(E_{nk})}{1 - f_0(E_{n'k'})} \right] \quad (5.100)$$

$\tau_n(E)$  がエネルギーに依存しない場合、

$$\mu_n = \frac{-e\tau_n}{m_{1D}^n}$$

となる。

<sup>5</sup>  $-\partial f_0(E)/\partial E$  あるいは  $-k_B T \partial f_0(E)/\partial E$  は熱的広がり関数 (Thermal Broadening Function) と呼ばれる [26, 27]。

となる。ここで、つぎの詳細平衡の原理を用いて、 $S_{n',n}(k',k)$  を  $S_{n,n'}(k,k')$  で表した。

$$S_{n,n'}(k,k')f_0(E_{nk})[1-f_0(E_{n'k'})]=S_{n',n}(k',k)f_0(E_{n'k'})[1-f_0(E_{nk})] \quad (5.101)$$

式(5.88)より、

$$\frac{\delta f_{n'}(k')}{\delta f_n(k)} \frac{f_0(E_{nk})}{f_0(E_{n'k'})} \frac{1-f_0(E_{nk})}{1-f_0(E_{n'k'})} = \frac{\tau_{n'k'}}{\tau_{nk}} \frac{v_{n'k'}}{v_{nk}} \quad (5.102)$$

となり、これを式(5.100)に代入すると、つぎの式が得られる。

$$S_n^{\text{in}}(k) - S_n^{\text{out}}(k) = -\delta f_n(k) \sum_{n'k'} S_{n,n'}(k,k') \frac{1-f_0(E_{n'k'})}{1-f_0(E_{nk})} \left[ 1 - \frac{\tau_{n'k'}}{\tau_{nk}} \frac{v_{n'k'}}{v_{nk}} \right] \quad (5.103)$$

この式と  $S_n^{\text{in}}(k) - S_n^{\text{out}}(k) = -\delta f_n(k)/\tau_{nk}$  とを比較すると、

$$\frac{1}{\tau_{nk}} = \sum_{n'k'} S_{n,n'}(k,k') \frac{1-f_0(E_{n'k'})}{1-f_0(E_{nk})} \left[ 1 - \frac{\tau_{n'k'}}{\tau_{nk}} \frac{v_{n'k'}}{v_{nk}} \right] \quad (5.104)$$

となる。これが、運動量緩和時間  $\tau_{nk}$  を決定する方程式である。

互いに相関のない散乱過程が  $N_S$  個ある場合を考える。このとき、式(5.104)の  $S_{n,n'}(k,k')$  には、すべての散乱過程  $s (= 1, 2, \dots, N_S)$  に由来する遷移確率の総和を用いる必要がある。

$$S_{n,n'}(k,k') = \sum_s S_{n,n'}^{(s)}(k,k') \quad (5.105)$$

しかし、緩和時間近似に基づいて移動度を計算する場合、各散乱過程  $s$  の運動量緩和時間  $\tau_{nk}^{(s)}$  を個別に計算することが多い。すなわち、式(5.104)の  $S_{n,n'}(k,k')$  に  $S_{n,n'}^{(s)}(k,k')$  を代入し、計算した運動量緩和時間を  $\tau_{nk}^{(s)}$  とする。そして、この個別に計算した運動量緩和時間  $\tau_{nk}^{(s)}$  を用いて、式(5.92)または式(5.93)から移動度を計算し、これを各散乱過程  $s$  に由来する移動度とする。

緩和時間近似では、すべての散乱過程を考慮した運動量緩和時間  $\tau_{nk}$  を、つぎのように近似的に表す。

$$\frac{1}{\tau_{nk}} = \sum_s \frac{1}{\tau_{nk}^{(s)}} \quad (5.106)$$

式(5.106)で計算される運動量緩和時間は、はじめに異なる散乱過程の遷移確率を合計した後、式(5.104)を用いて計算した運動量緩和時間とは一般に異なる。ただし、考慮する散乱過程が、弹性散乱または等方散乱のみである場合、両者の運動量緩和時間は等しくなる[3]。

ある散乱過程  $s$  が等方散乱の場合、運動量緩和時間  $\tau_{nk}^{(s)}$  は、

$$\frac{1}{\tau_{nk}^{(s)}} = \sum_{n'k'} S_{n,n'}^{(s)}(k,k') \left[ \frac{1-f_0(E_{n'k'})}{1-f_0(E_{nk})} \right] \quad (5.107)$$

と計算できる[3, 28]。したがって、フォノン散乱に起因する運動量緩和時間は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{vnk}^{(\text{ph})}} &= \sum_m \sum_{v'} \sum_{n'} \sum_{k'} S_{v,n;v',n'}^{(m)}(k,k') \left[ \frac{1-f_0(E_{v'n'k'})}{1-f_0(E_{vnk})} \right] \\ &= \sum_m \sum_{v'} \sum_{n'} Z_{v,v'}^{(m)} C_m F_{v',n'}^{v,n} g_{v',n'}(E_{vnk} + \Delta E_m) \left[ \frac{1-f_0(E_{vnk} + \Delta E_m)}{1-f_0(E_{vnk})} \right] \end{aligned} \quad (5.108)$$

となる。ここで、谷を指定するラベル  $v$  とその谷に由来するサブバンドを指定するサブバンド指数  $n$  を陽に表して状態を指定した。式(5.108)より、運動量緩和時間の  $k$  依存性は、エネルギーを通してのみ入っているため、

$$\frac{1}{\tau_{vn}^{(\text{ph})}(E)} = \sum_m \sum_{v'} \sum_{n'} Z_{v,v'}^{(m)} C_m F_{v',n'}^{v,n} g_{v',n'}(E + \Delta E_m) \left[ \frac{1 - f_0(E + \Delta E_m)}{1 - f_0(E)} \right] \quad (5.109)$$

と表せる。これを式(5.93)に代入すると、フォノン散乱制限移動度を計算することができる。

### 5.5.3 ラフネス散乱

ラフネス散乱では、同一谷内遷移のみが起こるとした。また、4つの界面のラフネスパターンが無相関であると仮定した。そのため、各界面に起因する遷移確率は、各界面ごとに個別に計算できる。以下では、左側界面 [図5.13(b) 参照] のラフネスによる遷移確率の表式について述べる。他の3つの界面に起因する遷移確率も同様に計算できる。

左側界面のラフネスに起因して、電子が状態  $(v, n, k)$  から状態  $(v, n', k')$  に遷移する遷移確率は、

$$S_{v,n,n'}^{(\text{SR})}(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{v,n,n'}(q)|^2 \delta(E_{vn'k'} - E_{vnk}) \quad (5.110)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} \right|^2 \frac{1}{L} S_{\text{R}}(q) \delta(E_{vn'k'} - E_{vnk}) \quad (5.111)$$

となる [29]。ここで、 $q = k' - k$  とおいた。 $\Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})}$  は一般化 Prange-Nee 項である。

$$\begin{aligned} \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} = & -\frac{\hbar^2}{w} \int_0^h dz \int_0^w dy \zeta_{v,n}(y, z) w_{yy}^v \frac{\partial^2 \zeta_{v,n'}(y, z)}{\partial y^2} \\ & - \frac{\hbar^2}{w} \int_0^h dz \int_0^w dy \zeta_{v,n}(y, z) w_{yz}^v \frac{\partial^2 \zeta_{v,n'}(y, z)}{\partial y \partial z} \\ & + \int_0^h dz \int_0^w dy \zeta_{v,n}(y, z) \left(1 - \frac{y}{w}\right) e F_y \zeta_{v,n'}(y, z) \\ & + (\epsilon_{v,n} - \epsilon_{v,n'}) \int_0^h dz \int_0^w dy \zeta_{v,n}(y, z) \left(1 - \frac{y}{w}\right) \frac{\partial \zeta_{v,n'}(y, z)}{\partial y} \end{aligned} \quad (5.112)$$

$S_{\text{R}}(q)$  は、ラフネスの1次元パワースペクトル密度である。本研究では、自己相関関数が指数関数型のラフネスを仮定した。このとき、パワースペクトル密度は、

$$S_{\text{R}}(q) = \frac{2\sqrt{2}\Delta^2\Lambda}{q^2\Lambda^2 + 2} \quad (5.113)$$

となる [30]。 $\Delta$  と  $\Lambda$  はラフネスを特徴づけるパラメータであり、それぞれ、ラフネス高さとラフネス相関長である。本研究では、ラフネス散乱の行列要素として式(5.112)の一般化 Prange-Nee 項のみを考慮し、界面変動にともなう電荷密度、分極電荷、鏡像電荷変化の効果 [31, 32] は無視した。

つぎに、ラフネス散乱に起因する運動量緩和時間の計算方法を述べる。式(5.111)を式(5.104)

に代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{vnk}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{L} \sum_{n'k'} \left| \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} \right|^2 S_{\text{R}}(q) \left[ 1 - \frac{\tau_{vn'k'}}{\tau_{vnk}} \frac{k'}{k} \right] \delta(E_{vn'k'} - E_{vnk}) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{n'} \left| \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} \right|^2 \sum_{s=\pm 1} \int_0^\infty dk' S_{\text{R}}(q) \left[ 1 - \frac{\tau_{vn',sk'}}{\tau_{vnk}} \frac{sk'}{k} \right] \delta \left( \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_{1\text{D}}^v} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{1\text{D}}^v} + \epsilon_{n'} - \epsilon_n \right) \end{aligned} \quad (5.114)$$

となる。ラフネス散乱は弾性散乱であるため、詳細平衡の原理から、運動量緩和時間は  $k$  の大きさにのみ依存する。谷  $v$  のサブバンド  $n$  に属しエネルギーが  $E$  の電子の波数の大きさを  $k_{vn}(E) = \sqrt{2m_{1\text{D}}^v(E - \epsilon_{vn})}/\hbar$  とおくと、式 (5.114) は、

$$\frac{1}{\tau_{vn}(E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n'} \frac{g_{vn'}(E)}{2} \left| \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} \right|^2 \sum_{s=\pm 1} S_{\text{R}}(q) \left[ 1 - \frac{\tau_{vn'}(E)}{\tau_{vn}(E)} \frac{sk_{vn'}(E)}{k_{vn}(E)} \right] \quad (5.115)$$

となる。両辺に  $\tau_{vn}(E)k_{vn}(E)$  を乗じ整理すると、つぎの  $\tau_{vn}(E)$  に関する連立方程式を得る [33]。

$$k_{vn}(E) = A_n^v(E) \tau_{vn}(E) - \sum_{n'} B_{nn'}^v(E) \tau_{vn'}(E) \quad (5.116)$$

$$A_n^v(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n'} \frac{g_{vn'}(E)}{2} \left| \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} \right|^2 \sum_{s=\pm 1} S_{\text{R}}(sk_{vn'}(E) - k_{vn}(E)) k_{vn}(E) \quad (5.117)$$

$$B_{nn'}^v(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{g_{vn'}(E)}{2} \left| \Gamma_{v,n,n'}^{(\text{SR})} \right|^2 \sum_{s=\pm 1} S_{\text{R}}(sk_{vn'}(E) - k_{vn}(E)) sk_{vn'}(E) \quad (5.118)$$

式 (5.116) を数値的に解くことで、遷移確率から運動量緩和時間  $\tau_{vn}(E)$  が計算できる。

最後に、ラフネス散乱の遮蔽効果の計算方法について述べる。乱雑位相近似 (RPA: Random Phase Approximation) によると、遮蔽効果を考慮していないラフネス散乱行列要素  $M_{v,n,n'}(q)$  と、遮蔽効果を考慮したラフネス散乱行列要素  $M_{v,n,n'}^{(\text{scr})}(q)$  には、つぎの関係がある。

$$M_{v,m,m'}(q) = \sum_{w,n,n'} \epsilon_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q) M_{w,n,n'}^{(\text{scr})}(q) \quad (5.119)$$

ここで、 $\epsilon_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q)$  は誘電関数テンソル (TDF: Tensorial Dielectric Function) であり、

$$\epsilon_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q) = \delta_{w,v} \delta_{n,m} \delta_{n',m'} + \frac{e^2}{2\pi\epsilon_{\text{Si}}} F_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q) \Pi_{w,n,n'}(q) \quad (5.120)$$

と与えられる [28, 34]。本来、Si 領域、酸化膜領域、ゲート金属領域でそれぞれ誘電率は異なるが、本研究では、全領域が Si の誘電率をもつ一様な環境にあると仮定して、遮蔽効果を計算した。 $F_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q)$  は遮蔽の形状因子と呼ばれ、つぎの式で与えられる。

$$\begin{aligned} F_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q) &= \int dy_0 \int dz_0 \int dy \int dz K_0(|q| \sqrt{(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}) \\ &\quad \times \zeta_{w,n}(y_0, z_0) \zeta_{w,n'}(y_0, z_0) \zeta_{v,m}(y, z) \zeta_{v,m'}(y, z) \end{aligned} \quad (5.121)$$

ここで,  $K_0(\cdot)$  は第2種変形ベッセル関数である.  $\Pi_{w,n,n'}(q)$  は分極因子と呼ばれ, つきの式で与えられる.

$$\Pi_{w,n,n'}(q) = -\frac{1}{L} \sum_k \frac{f_{w,n',k+q} - f_{w,n,k}}{E_{w,n',k+q} - E_{w,n,k}} \approx -\frac{1}{L} \sum_k \frac{f_0(E_{w,n',k+q}) - f_0(E_{w,n,k})}{E_{w,n',k+q} - E_{w,n,k}} \quad (5.122)$$

ここで, 低電界では分布関数の熱平衡分布からのずれは小さいと考えられるため,  $f_{w,n',k+q} \approx f_0(E_{w,n',k+q})$ ,  $f_{w,n,k} \approx f_0(E_{w,n,k})$  と近似した<sup>6</sup>.

#### 5.5.4 自己無撞着シュレディンガー・ポアソン法

2次元シュレディンガー方程式 [式 (5.28)] を, 再度以下に示す.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left( w_{22} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2w_{23} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + w_{33} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(y, z) \right] \zeta_n(y, z) = \epsilon_n \zeta_n(y, z) \quad (5.123)$$

ポテンシャルエネルギー  $U(y, z)$  を,

$$U(y, z) = -e\phi(y, z) - [\chi(y, z) - \chi_{\text{Si}}] \quad (5.124)$$

と定義する.  $\chi(y, z)$  は位置に依存する電子親和力である. Si 領域内では,  $U(y, z) = -e\phi(y, z)$ , 酸化膜領域では,  $U(y, z) = -e\phi(y, z) - (\chi_{\text{ox}} - \chi_{\text{Si}})$  となる. ここで,  $\chi_{\text{Si}}$  は Si の電子親和力,  $\chi_{\text{ox}}$  は酸化膜の電子親和力を表す.

$\phi(y, z)$  は静電ポテンシャルであり, つきの2次元ポアソン方程式を満たす.

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla) \phi = -\rho(y, z) \quad (5.125)$$

$$\rho(y, z) = e [p(y, z) - n(y, z) + N_{\text{D}}(y, z) - N_{\text{A}}(y, z)] \quad (5.126)$$

ここで,  $\epsilon$  は位置に依存する誘電率である.  $N_{\text{D}}(y, z)$  および  $N_{\text{A}}(y, z)$  はイオン化不純物密度を表す. 本研究では, ノンドープのデバイスを想定し,  $N_{\text{D}}(y, z) = 0$ ,  $N_{\text{A}}(y, z) = 0$  とした. また,  $n$  型反転層での電子輸送計算を行うため,  $p(y, z) = 0$  とした. したがって, 電荷密度は,

$$\begin{aligned} \rho(y, z) &= -e n(y, z) = -e \sum_{nk} |\Phi_{nk}(y, z)|^2 f_0(E_{nk}) \\ &= -e \sum_{nk} \frac{1}{L} |\zeta_n(y, z)|^2 f_0(E_{nk}) \\ &= -e \sum_n |\zeta_n(y, z)|^2 \int n_{\text{sp}} g_n(E) f_0(E) dE \\ &= -e \sum_n |\zeta_n(y, z)|^2 N_n \end{aligned} \quad (5.127)$$

となる. ここで, 総和はすべての谷のすべてのサブバンドに対してとる. また,  $N_n$  は, 式 (5.91) で定義したサブバンド指数が  $n$  であるすべての電子に由来する線電子密度である.

<sup>6</sup>  $n = n'$  かつ長波長極限において, 式 (5.122) は, つきの表式で表される.

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Pi_{w,n,n}(q) = \int n_{\text{sp}} g_n(E) \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE = \frac{\partial}{\partial E_{\text{F}}} \int n_{\text{sp}} g_n(E) f_0(E) dE = \frac{\partial N_n}{\partial E_{\text{F}}}$$

このように, 電子密度をフェルミ準位で微分した量は熱力学状態密度と呼ばれる [35].

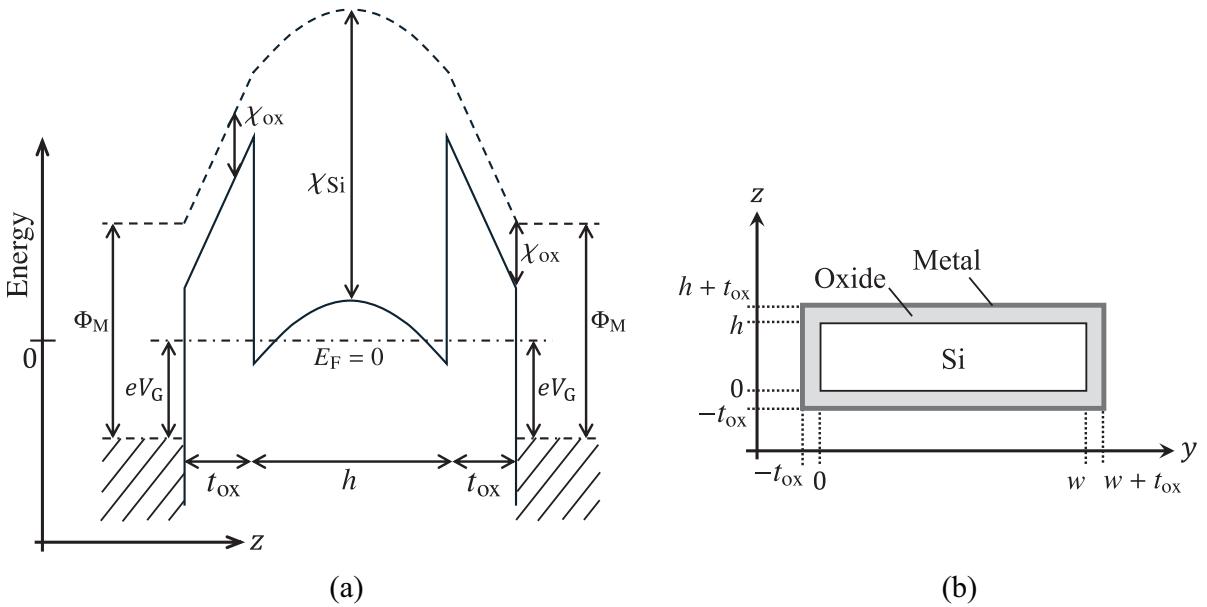


図 5.13: (a) ナノシート構造における  $z$  軸方向のバンドダイアグラム.  $\chi_{\text{ox}}$  と  $\chi_{\text{Si}}$  は酸化膜と Si の電子親和力,  $\Phi_M$  はゲート金属の仕事関数を表す.  $E_F = 0$  は Si チャネル内部のフェルミ準位, あるいはある  $x$  における  $yz$  面内の擬フェルミ準位を表す. (b)  $x$  軸方向を輸送方向,  $y$  軸方向をナノシート幅方向,  $z$  軸方向をナノシート厚さ方向とする矩形断面ナノシート構造.  $h$ ,  $w$ ,  $t_{\text{ox}}$  はナノシート厚さ, ナノシート幅, 酸化膜厚を表す.

つぎに, 2 次元ポアソン方程式の境界条件について考える. 図 5.13(a) に示すように, デバイス領域内のフェルミエネルギーを  $E_F = 0$  とする. ゲート電圧印加は,  $E_F = 0$  に対してゲート電極内のフェルミエネルギーを  $eV_G$  だけシフトさせる. したがって, 図 5.13(a) より<sup>7</sup>, 金属/酸化膜界面における (わずかに酸化膜側の) ポテンシャルエネルギー  $U_G$  は,

$$U_G = -eV_G + \Phi_M - \chi_{\text{ox}} \quad (5.128)$$

となる. ここで,  $\Phi_M$  はゲート金属の仕事関数である. 式 (5.124) より,  $U_G$  を静電ポテンシャル  $\phi_G = U_G/(-e)$  に書き換えると,

$$\phi_G = V_G - \frac{\Phi_M - \chi_{\text{Si}}}{e} \quad (5.129)$$

となる. この式からわかるように,  $\Phi_M - \chi_{\text{Si}}$  は  $V_G$  に対して  $\phi_G$  をシフトさせる以外に, 系に影響を与えない. 本研究では簡単のため,  $\Phi_M = \chi_{\text{Si}}$  と仮定した. そのため, 図 5.13(b) に示すように, Si 領域を取り囲む金属/酸化膜界面に対して  $\phi = V_G$  とする第 1 種境界条件を課し, 2 次元ポアソン方程式を解くことで静電ポテンシャル  $\phi(y, z)$  が求まる. 本研究では, 有限要素法を用いて 2 次元ポアソン方程式を数値的に解いた [36].

最後に, シュレディンガー方程式とポアソン方程式の自己無撞着計算法について概説する [3, 37]. シュレディンガー方程式とポアソン方程式を同時に満たす電荷密度  $\rho(y, z)$  および静電ポテンシ

<sup>7</sup> 図 5.13(a)において  $E_F = 0$  を表す一点鎖線から,  $eV_G$  だけ下がり,  $\Phi_M$  だけ上がり,  $\chi_{\text{ox}}$  だけ下がると  $U_G$  に到達する.

ル  $\phi(y, z)$  を決定する計算は、自己無撞着計算と呼ばれる。ポアソン方程式の右辺に現れる電荷密度  $n(y, z)$  は、サブバンド準位  $\epsilon_n$  および波動関数  $\zeta_n(y, z)$  を含む式から計算されるため、ポアソン方程式を解くにはシュレディンガー方程式を解く必要がある。一方、シュレディンガー方程式には、ポテンシャルエネルギー  $U(y, z)$  として静電ポテンシャル  $\phi(y, z)$  が含まれるため、シュレディンガー方程式を解くにはポアソン方程式を解く必要がある。このように、互いに依存する方程式を解くための基本的な手順は以下のとおりである。

はじめに、適当な電荷密度  $\rho^{(0)}(y, z)$  を仮定し、これをもとにポアソン方程式を解いて静電ポテンシャル  $\phi^{(0)}(y, z)$  を得る。つぎに、 $\phi^{(0)}(y, z)$  からポテンシャルエネルギー  $U^{(0)}(y, z)$  を計算し、シュレディンガー方程式を解いてサブバンド準位と波動関数を求める。その後、得られたサブバンド準位と波動関数を用いて新たな電荷密度  $\rho^{(1)}(y, z)$  を計算する。通常、 $\rho^{(0)}(y, z)$  と  $\rho^{(1)}(y, z)$  は一致しないため、収束条件が満たされるまで、シュレディンガー方程式とポアソン方程式を繰り返し解く必要がある。本研究では、電位  $\phi(y, z)$  に対してつぎの式が満たされたとき、自己無撞着計算が収束したとみなした。

$$\max_{y, z} |\phi^{(i+1)}(y, z) - \phi^{(i)}(y, z)| < \epsilon_a \quad (5.130)$$

ここで、 $\epsilon_a$  は許容誤差を表す。本研究では  $\epsilon_a = 0.25 \text{ mV}$  とした。

自己無撞着計算を効率的に収束させるため、数学的および物理的考察に基づいた様々なスキームが用いられる。例えば、非線形方程式を反復的に解く手法として、単純混合法や拡張 Anderson 法、あるいは Broyden 法などが用いられる [38]。また、ポアソン方程式を電位変化に対して線形化した線形化ポアソン方程式や、Predictor-Corrector 法 [39] なども用いられる。

### 5.5.5 シミュレーション結果

はじめに、ナノシート構造の電子状態を 2DEG として近似的に扱うのではなく、1DEG として適切に扱うことの重要性を示す。図 5.14(a) は、[100]/(001) ナノシート構造のラフネス散乱制限移動度  $\mu_{\text{SR}}$  を、ラフネスの相関長  $\Lambda$  の関数として示したものである。ここで、 $[\dots]$  は輸送方向の結晶方位を表し、 $(\dots)$  は基板面方位を表す。電子密度が十分低く電子系は非縮退の古典的なガスであると仮定した。そのため、自己無撞着計算の結果デバイス内のポテンシャルは平らであり、すなわち、垂直電界はゼロである。1DEG の結果と 2DEG の結果とを比較するため、ラフネスはナノシート構造の上下面にのみ存在するとし、側面のラフネス散乱を無視した。 $h = 3 \text{ nm}$  とし、 $w = 10 \text{ nm}$  の結果を丸印で、 $w = 20 \text{ nm}$  の結果をバツ印で示す。比較のため、 $h = 3 \text{ nm}$  の 2DEG に基づいて計算したラフネス散乱制限移動度を点線で示した。

電子状態を 2DEG として近似的に扱うと、 $\mu_{\text{SR}}$  は  $\Lambda$  の増加に対して単調減少することがわかる。一方、電子状態を 1DEG として適切に扱うと  $w$  が小さくなるにつれて  $\mu_{\text{SR}}$  が増加し、 $\Lambda$  が長い領域で  $\mu_{\text{SR}}$  が増加に転じることがわかる。この理由は、図 5.14(b) に示すように、1DEG と 2DEG では散乱前後で許される波数変化が本質的に異なること、さらに、ラフネスのパワースペクトル密度が波数変化の大きさ  $|q|$  に対して急激に減少することからつぎのように説明できる [40, 41]。

強い量子閉じ込め効果によりサブバンド間隔が十分に広い 1DEG において、運動量緩和を引き

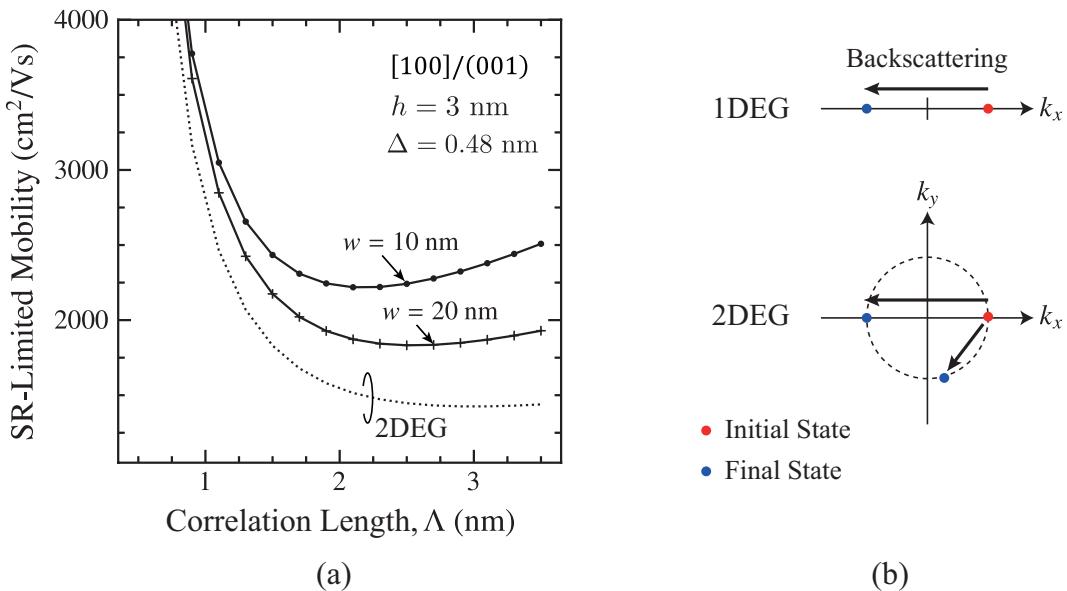


図 5.14: (a) ラフネス散乱制限移動度  $\mu_{\text{SR}}$  のラフネス相関長  $\Lambda$  依存性 . 電子密度は十分低く電子系は非縮退の古典的なガスであると仮定した . 電子状態を 1DEG として適切に扱った結果と 2DEG に近似した結果とを比較するために , ラフネスはナノシート構造の上下面にのみ存在するし , 側面のラフネス散乱を無視した . (b) 1DEG と 2DEG において , 次元性に由来する可能な散乱過程の違いの模式図 .

起こす散乱過程は , 図 5.14(b) に模式的に示すように , 後方散乱 (Backscattering) のみである . 始状態の波数を  $k_{\text{init}}$  とすると , 後方散乱にともなう波数変化は  $q = -2k_{\text{init}}$  となる . そのため , この遷移が起こる確率は , ラフネスのパワースペクトル密度  $S_{\text{R}}(-2k_{\text{init}})$  に比例し , ラフネス相関長  $\Lambda$  が大きくなるにつれて急激に低下する . 以上の理由から , 1DEG では  $\Lambda$  が大きい範囲において ,  $\Lambda$  の増加にともないラフネス散乱確率が低下し ,  $\mu_{\text{SR}}$  は増加する .

実際には ,  $w$  が大きくなるにつれてサブバンド間隔が狭くなり , 純粋な 1 次元系ではなくなる . その場合 , サブバンド指数変化をともなう波数変化の小さな散乱過程も可能となるため ,  $w$  が大きくなるにつれて電子状態の 1 次元性による散乱確率の低下の効果は小さくなる .

このような振る舞いを示す 1DEG に対して 2DEG では , 図 5.14(b) に示すように , 後方散乱のみならず , 点線で丸く示す等エネルギー線上すべてに散乱可能である . このような小さな波数変化をともなう遷移過程は , 遷移確率が大きいため 2DEG の移動度を低下させる .

つぎに , 遮蔽効果を考慮するためには , 誘電関数テンソルの使用が重要であることを示す . 移動度のシミュレーションにおいて , 計算時間の大部分は誘電関数テンソルに基づく遮蔽効果の計算が占める . したがって , 計算量削減のため ,  $\epsilon_{v,m,m'}^{w,n,n'}(q)$  の対角成分のみを考慮し , 式 (5.119) を ,

$$M_{v,m,m'}(q) = \epsilon_{v,m,m'}^{v,m,m'}(q) M_{v,m,m'}^{(\text{scr})}(q) \quad (5.131)$$

と近似する方法が考えられる . このように誘電関数テンソルの対角成分のみを用いると , 遮蔽効果の計算に 1 つのサブバンドしか含まないため , 計算時間が大幅に削減できる . 図 5.15 に ,  $[100]/(001)$  ナノシート構造における , ラフネス散乱制限移動度の実効シート電子密度  $N_{\text{inv}}$  依存性

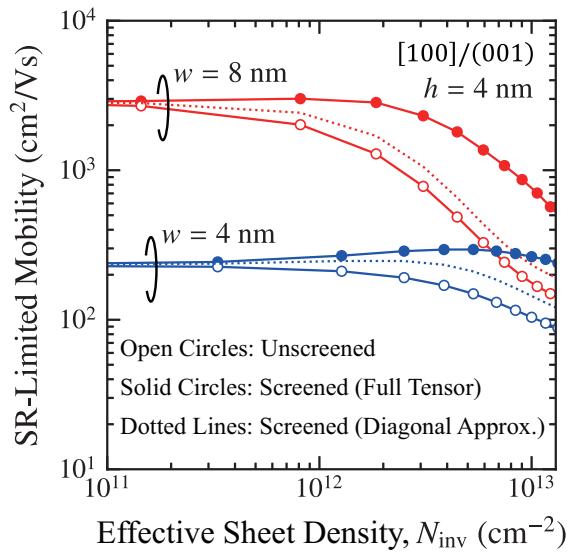


図 5.15: ラフネス散乱制限移動度の実効シート電子密度  $N_{\text{inv}}$  依存性.  $\Delta = 0.48 \text{ nm}$ ,  $\Lambda = 1.3 \text{ nm}$  とした. 遮蔽効果を無視した場合の結果を白抜きのマーカーで, 誘電関数テンソルに基づき遮蔽効果を考慮した結果を塗りつぶしたマーカーで, 誘電関数テンソルを対角近似して遮蔽効果を考慮した結果を点線で示す.

を示す. ここで, 実効シート電子密度  $N_{\text{inv}}$  は,

$$N_{\text{inv}} = \frac{N}{2(w+h)} \quad (5.132)$$

と定義した.  $N$  は式 (5.94) で与えられる線電子密度であり,  $2(w+h)$  はナノシートの周長である. 遮蔽効果を無視した場合の結果を白抜きのマーカーで, 誘電関数テンソルに基づき遮蔽効果を考慮した結果を塗りつぶしたマーカーで, 誘電関数テンソルを対角近似して遮蔽効果を考慮した結果を点線で示す.  $h = 4 \text{ nm}$  とし, 青線は  $w = 4 \text{ nm}$ , 赤線は  $w = 8 \text{ nm}$  の場合をそれぞれ表す.

$N_{\text{inv}}$  が  $10^{11} \text{ cm}^{-2}$  程度と小さい場合には, 遮蔽効果を考慮してもしなくても結果は変わらないことがわかる. 一方,  $N_{\text{inv}}$  が大きくなるにつれて, 遮蔽効果の影響が輸送特性に表れ, 遮蔽効果を考慮すると, 考慮しない場合よりもラフネス散乱制限移動度が高くなることがわかる. また, 誘電関数テンソルを対角近似した場合には, 遮蔽効果を低く見積もってしまうことがわかる. とくに,  $N_{\text{inv}}$  が高い場合には, 誘電関数テンソルの対角近似による誤差は大きい. この理由は,  $N_{\text{inv}}$  の増加とともに, 誘電関数テンソルに寄与するサブバンドの数が増加することによる. 同様の理由により, サブバンド間隔が比較的広い  $w = 4 \text{ nm}$  の場合に比べて, サブバンド間隔が比較的狭い  $w = 8 \text{ nm}$  の場合のほうが, 誘電関数テンソルの対角近似による誤差は大きいことがわかる.

つぎに,  $w = 20 \text{ nm}$  のナノシート構造において, 移動度の厚さ  $h$  依存性をシミュレーションした結果について述べる. 図 5.16(a,b,c,d) はそれぞれ結晶方位が,  $[100]/(001)$ ,  $[110]/(001)$ ,  $[001]/(110)$ ,  $[1\bar{1}0]/(110)$  のナノシート構造における移動度の  $h$  依存性である. 青線はラフネス散乱制限移動度  $\mu_{\text{SR}}$ , 赤線はフォノン散乱制限移動度  $\mu_{\text{PH}}$ , 黒線はラフネス散乱とフォノン散乱とを考慮した場合の移動度  $\mu_{\text{tot}}$  である. ゲート電圧は  $N_{\text{inv}} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  となるように適宜調整

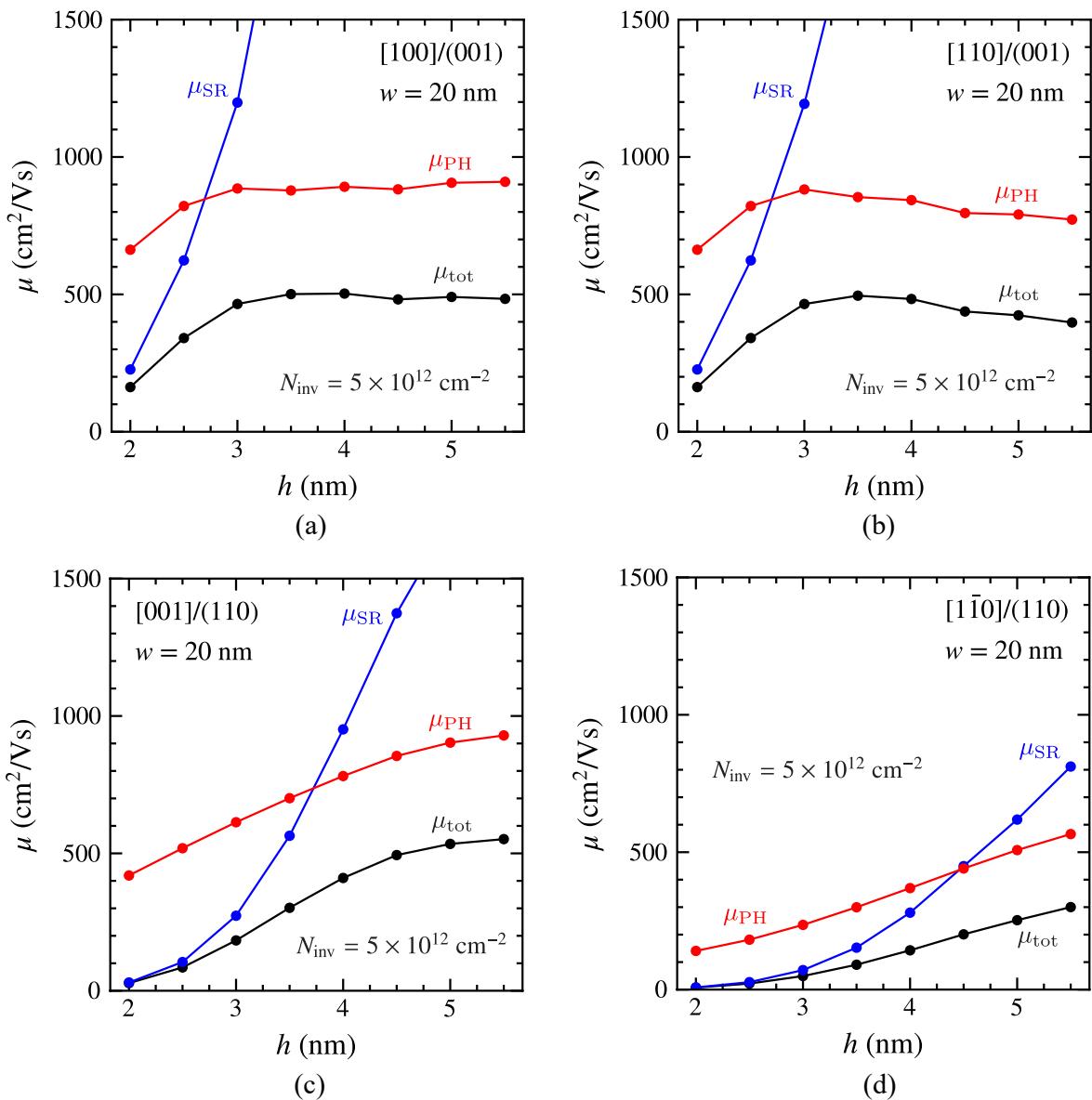


図 5.16:  $w = 20 \text{ nm}$  のナノシート構造における移動度の厚さ  $h$  依存性.  $N_{\text{inv}} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\Delta = 0.48 \text{ nm}$ ,  $\Lambda = 1.3 \text{ nm}$  とした. 赤線はフォノン散乱制限移動度, 青線はラフネス散乱制限移動度, 黒線はフォノン散乱とラフネス散乱を考慮した場合の移動度を表す. (a)(b)(c)(d) はそれぞれ結晶方位が, [100]/(001), [110]/(001), [001]/(110), [110]/(110) の場合の結果である.

した.

(001) 面上のナノシート構造 [図 5.16(a)(b)] では,  $h = 2.5 \text{ nm}$  程度で  $\mu_{\text{SR}}$  と  $\mu_{\text{PH}}$  の大小関係が逆転していることがわかる. 一方, (110) 面上のナノシート構造 [図 5.16(c)(d)] では, 厚さが  $h = 2.5 \text{ nm}$  よりも大きい領域で  $\mu_{\text{SR}}$  と  $\mu_{\text{PH}}$  の大小関係が逆転していることがわかる.  $h = 2 \text{ nm}$  程度の極薄膜領域では, (110) 面上のナノシート構造ではラフネス散乱強度が高くなるため, (001) 面上のナノシート構造よりも移動度は低くなる.

(001) 面の移動度が比較的高い理由として, (001) 面上のナノシート構造では, [001] 谷の  $z$  軸方

向の有効質量が重いことが挙げられる。まず、 $h < w$  であるため、各谷の基底サブバンド準位の上下関係は、 $z$  軸方向の有効質量でおおむね決まる。したがって、 $z$  軸方向の有効質量が  $m_l$  で重い [001] 谷は、基底サブバンド準位が低く、もっとも占有率が高くなる。さらに、この  $z$  軸方向の有効質量が重い [001] 谷では、界面位置乱れによるサブバンド準位の変動が抑えられるため、ラフネス散乱強度が低くなる。

以上より、極薄膜領域のナノシート構造デバイスを作製する場合、移動度を高くするという観点からは (001) 面が優れていることがわかる。一方、 $h = 5 \text{ nm}$  程度と比較的厚い領域では、(110) 面上のナノシート構造でも移動度は比較的高い。具体的には、図 5.16(c) の [001]/(110) ナノシート構造の結果を見ると、 $\mu_{\text{tot}}$  は  $500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  程度であり、これは (001) 面上のデバイスの  $\mu_{\text{tot}}$  と同程度に高い。この理由は、 $h$  が大きい範囲ではラフネス散乱だけでなく、フォノン散乱が輸送特性に関与するためである。比較的厚い領域では、ラフネス散乱とフォノン散乱を同時に考慮する必要がある。

つぎに、 $h = 4 \text{ nm}$ 、 $w = 10 \text{ nm}$  のナノシート構造における、移動度の結晶方位依存性のシミュレーション結果について述べる。図 5.17(a) は、実効シート電子密度を  $N_{\text{inv}} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  と固定した場合における移動度の結晶方位依存性である。赤線は (001) 面、青線は (110) 面、緑線は (111) 面上のナノシート構造を表す。縦軸はラフネス散乱とフォノン散乱を考慮した場合の移動度、横軸は輸送方向の角度  $\theta$  である。ここで、輸送方向の角度の原点  $\theta = 0^\circ$  は、(001) 面の場合は [100] 方向、(110) 面の場合は [001] 方向、(111) 面の場合は [211] 方向とした [図 5.2 および図 5.17(b) 参照]。図中には主要な結晶方位の結果に、その輸送方向と基板面方位を、[輸送方向]/(基板面方位) と付した。図 5.2 に示すように、結晶の対称性から、(001) 面上のナノシート構造は  $\theta = 45^\circ$ 、(110) 面上のナノシート構造は  $\theta = 90^\circ$ 、(111) 面上のナノシート構造は  $\theta = 30^\circ$  で移動度が周期的に変化する。したがって、図 5.17(a) は、各面上のデバイスにおいて可能な輸送方向をすべて網羅している。

図 5.17(a) より (110) 面では、輸送方向による移動度の変化が大きく、 $0^\circ$  と  $90^\circ$  で 2 倍程度変化していることがわかる。また、移動度は  $60^\circ$  付近まで単調に減少し、その後、増加に転じることがわかる。この理由は、Si における 6 つの伝導帯谷の強い有効質量の異方性からつぎのように説明できる。

図 5.17(c) に、(110) 面と (001) 面における波数空間上での 6 つの伝導帯谷の等エネルギー面を示す。赤色、青色、緑色で示す伝導帯谷はそれぞれ、[100] 谷、[010] 谷、[001] 谷である。図 5.17(a) の青線の結果を、より詳細に解析した結果を図 5.17(d,e,f) に示す。

図 5.17(d) では、各伝導帯谷に電子が占有されている割合を示した<sup>\*8</sup>。赤線は [100] 谷の占有率、緑線は [001] 谷の占有率である。図 5.17(c) からわかるように、対称性から [010] 谷の占有率は [100] 谷のそれと等しいため、図では線が重なっている。なお、[100] 谷の占有率は [100] 谷の占有率との合計とした。同様に、[010] 谷の占有率は [010] 谷の占有率との合計、[001] 谷の占有率は [001] 谷の占有率との合計とした。

<sup>\*8</sup> 式 (5.94) で定義されるサブバンド  $n$  由来の線電子密度  $N_n$  を、各谷  $v$  ( $= [100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$ ) に由来するサブバンド全体について足し合わせ、これをすべての谷に由来する線電子密度  $N$  [式 (5.94)] で割ることで、各伝導帯谷に電子が占有されている割合を計算した。

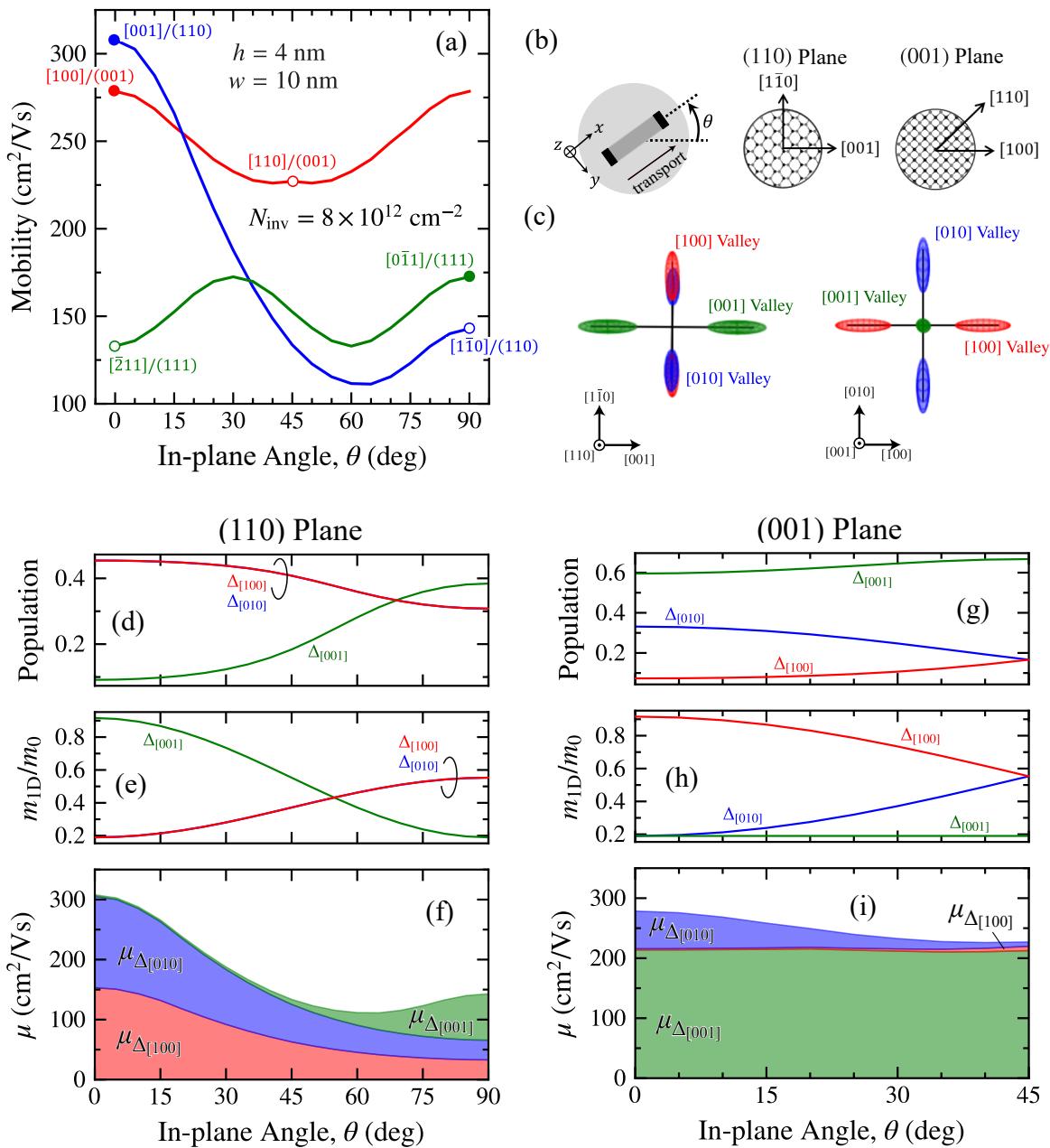


図 5.17:  $h = 4 \text{ nm}$ ,  $w = 10 \text{ nm}$  のナノシート構造における移動度の結晶方位依存性。 $N_{\text{inv}} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\Delta = 0.48 \text{ nm}$ ,  $\Lambda = 1.3 \text{ nm}$  とした。(a) 赤線は (001) 面, 青線は (110) 面, 緑線は (111) 面上のナノシート構造を表す。横軸は輸送方向を表す角度  $\theta$  である。 $\theta = 0^\circ$  は, (001) 面の場合は  $[100]$  方向, (110) 面の場合は  $[001]$  方向, (111) 面の場合は  $[\bar{2}11]$  方向とした。(b) 輸送方向を表す角度  $\theta$  と, (110) 面および (001) 面の原子配列。(c) 波数空間における 6 つの伝導帯谷の等エネルギー面。(d)(g) は (110) 面と (001) 面上ナノシート構造における各谷の占有率の  $\theta$  依存性。(e)(h) は (110) 面と (001) 面上ナノシート構造における各谷の  $x$  軸方向の有効質量の  $\theta$  依存性。(f)(i) は (110) 面と (001) 面上ナノシート構造における移動度に対する各谷の寄与の  $\theta$  依存性。

占有率との合計とした。定義より、赤線、緑線、青線（赤線と重なっている）の和はつねに1である。

$\theta$  が増加するにつれて、[100] 谷および [010] 谷の占有率は低下し、[001] 谷の占有率は増加することがわかる。この理由は、 $\theta$  の変化にともない伝導帯谷の主軸方向に対して閉じ込め方向が変化するためである。

図 5.17(e) は、各谷における輸送方向の有効質量  $m_{1D}$  の  $\theta$  依存性を表す。図 5.17(c) からわかるように、対称性から [100] 谷と [010] 谷では  $m_{1D}$  が等しいため、図では線が重なっている。 $\theta$  が増加するにつれて、[001] 谷の輸送方向の有効質量は軽くなり、[100] 谷および [010] 谷の輸送方向の有効質量は重くなることがわかる。

図 5.17(f) は、すべての谷を考慮した移動度 [図 5.17(a) の青線] への各谷の寄与を表す。すなわち、各谷の移動度に各谷の占有率を乗じた値を表す。まず、 $\theta = 0^\circ$  では、[100] 谷および [010] 谷の占有率が大きく、かつ、[100] 谷および [010] 谷の輸送方向の有効質量は軽い。したがって、 $\theta = 0^\circ$  において (110) 面の移動度は最大値をとる。これに対して、 $\theta$  が増加すると、[100] 谷および [010] 谷の占有率は低下し、輸送方向の有効質量が重い [001] 谷に電子が占有されはじめる。この効果により、 $\theta \lesssim 60^\circ$  では、移動度は単調に減少する。

つぎに、 $\theta \gtrsim 60^\circ$  の場合を考察する。この範囲においても  $\theta$  が増加するにつれて、[100] 谷および [010] 谷の占有率は低下し、[001] 谷の占有率は増加する。しかし、[100] 谷および [010] 谷の輸送方向の有効質量は重くなり、[001] 谷の輸送方向の有効質量は軽くなる結果、その大小関係が逆転する。したがって、 $\theta = 60^\circ$  付近で移動度は増加に転じる。

つぎに、(001) 面の結果について考察する。図 5.17(a) より (001) 面では、 $\theta$  が増加するにつれて、移動度は低下することがわかる。先に述べた対称性より  $45^\circ$  から  $90^\circ$  における移動度の  $\theta$  依存性は、 $0^\circ$  から  $45^\circ$  の  $\theta$  依存性を反転したものに等しい。そこで、 $0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ$  の範囲において、各谷の占有率を図 5.17(g)、各谷の輸送方向の有効質量を図 5.17(h)、すべての谷を考慮した移動度への各谷の寄与を図 5.17(i) に示す。

$\theta$  によらず [001] 谷の占有率がもっとも高く、かつ、輸送方向の有効質量が軽いため、[001] 谷の寄与が全移動度に対して支配的であることがわかる。そのつぎに移動度に寄与しているのは [010] 谷である。この [010] 谷の占有率は  $\theta$  の増加にともない低下し、輸送方向の有効質量も重くなる。したがって、[010] 谷の全移動度への寄与が低下するため、 $\theta$  の増加にともないすべての谷を考慮した移動度は低下する。

最後に、 $h = 4 \text{ nm}$ 、 $w = 10 \text{ nm}$  のナノシート構造における、移動度の  $N_{\text{inv}}$  依存性のシミュレーション結果について述べる。図 5.18(a) に、代表的な結晶方位のナノシート構造において、ラフネス散乱とフォノン散乱を考慮した移動度の  $N_{\text{inv}}$  依存性を示す。

結晶方位によらない全体的な傾向として、 $N_{\text{inv}}$  が大きい領域では、その増加にともない移動度は低下することがわかる。この原因の一つは、 $N_{\text{inv}}$  の増加による垂直電界の増加により、ラフネス散乱強度が強くなるためである。

しかし、例えば [001]/(110) に着目すると、 $N_{\text{inv}}$  が小さい場合には、その増加にともない移動度も増加することがわかる。この理由は、 $N_{\text{inv}}$  の増加により遮蔽効果が強くなり、ラフネス散乱強度が弱くなるためである。このように、 $N_{\text{inv}}$  の増加に対して、遮蔽効果による散乱強度低下と、垂

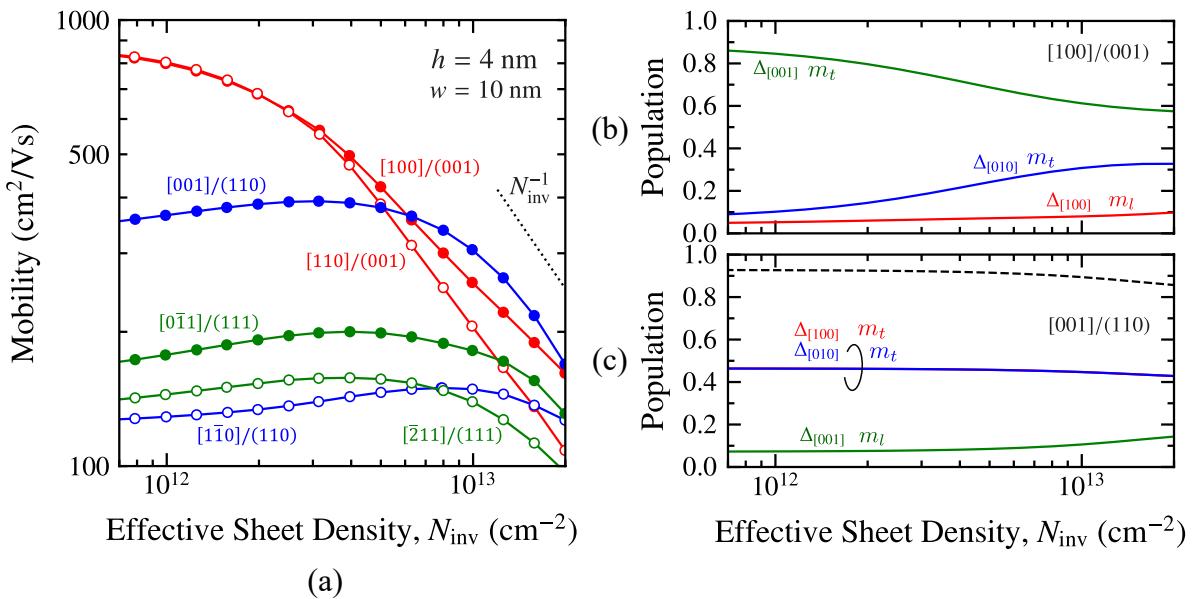


図 5.18: (a)  $h = 4 \text{ nm}$ ,  $w = 10 \text{ nm}$  のナノシート構造における移動度の  $N_{\text{inv}}$  依存性 .  $\Delta = 0.48 \text{ nm}$ ,  $\Lambda = 1.3 \text{ nm}$  とした . (b)(c) はそれぞれ, [100]/(001) および [001]/(110) における各谷の占有率  $N_{\text{inv}}$  依存性 . 各谷の  $x$  軸方向の有効質量を各線の近くに付した .

直電界による散乱強度増加という相反する効果がラフネス散乱に表れる . これらの効果の大小関係は, 図 5.18(a) より,  $N_{\text{inv}} = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  程度で入れかわることがわかる .

なお, [100]/(001) において,  $N_{\text{inv}}$  の増加にともない移動度が増加する領域が存在しないのは,  $N_{\text{inv}}$  が低い領域ではラフネス散乱ではなくフォノン散乱によって移動度が支配的に決定されるためである . すなわち, ラフネス散乱強度は遮蔽効果によりたしかに弱くなるが,  $N_{\text{inv}}$  が低い領域での移動度はほとんどフォノン散乱で決まるため, 遮蔽効果の影響は [001]/(110) のように表れない .

図 5.18(a) より,  $N_{\text{inv}} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  程度では, [001]/(110) が [100]/(001) を上回りもっと高い移動度を示すことがわかる . この理由の一つは,  $N_{\text{inv}}$  の増加にともない, [100]/(001) では  $z$  軸方向の有効質量が軽い [010] 谷の占有率が増加するためである .  $z$  軸方向の有効質量が軽い [010] 谷の電子は, ラフネス散乱強度が大きくなるため移動度は低い .

実際, 図 5.18(b)(c) にそれぞれ, [100]/(001) および [001]/(110) における各谷の占有率を,  $N_{\text{inv}}$  の関数として示す . 各谷の輸送方向の有効質量  $m_{1D}$  を線の横に付した . [001]/(110) では, [100] 谷と [010] 谷が縮退しているため, これらの谷の占有率の和を破線で示した .

[100]/(001) では,  $N_{\text{inv}}$  の増加にともない [001] 谷の占有率が低下する一方, [010] 谷の占有率は増加することがわかる . この [010] 谷の  $z$  軸方向の有効質量は軽い . したがって, [100]/(001) では  $N_{\text{inv}}$  の増加にともない, ラフネス散乱強度が強くなり, 移動度が低下する .

このような占有率変化にともなう移動度の低下は,  $N_{\text{inv}} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  程度の場合, [001]/(110) では起こらない . なぜなら, [001]/(110) では, 基底サブバンドを形成する [100] 谷と [010] 谷が縮

退しているため状態密度が高く、フェルミエネルギーが上がりづらいためである<sup>9</sup>。

以上の理由から、 $N_{\text{inv}} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  程度では、[001]/(110) が [100]/(001) を上回りもっとも移動度が高くなる。なお、図 5.18(c) より、[001]/(110) において  $N_{\text{inv}} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  を超えさらに大きくなる場合、輸送方向の有効質量が重い [001] 谷の占有率が増加しあらがわかる。したがって、図 5.18(a) に示すように、[001]/(110) の移動度は  $N_{\text{inv}} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  付近から急速に減少しあらがわかる。

## 5.6 まとめ

はじめに、任意の結晶方位からなるナノシート構造において、1次元的に量子閉じ込めを受けた電子状態を有効質量近似に基づき記述する方法を説明した。逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロの場合、量子閉じ込め効果によって輸送方向の有効質量が重くなることを数学的に示した。この有効質量の増加により、自由走行時にサブバンド指数が不变であると仮定すると、閉じ込めがない極限での計算結果が、実際のバルク結晶における計算結果に漸近しないという問題が発生することを述べた。

つぎに、KI 方程式に基づき、自由走行時のサブバンド指数変化を解析した。逆有効質量テンソルの非対角成分がゼロの場合、サブバンド指数は不变である一方、非対角成分が非ゼロの場合にはサブバンド指数が確率的に変化することがわかった。このような加速にともなうサブバンド指数変化が輸送特性へ与える影響を調べるために、各サブバンドに電子が存在する確率  $|a_n(t)|^2$  で重み付けした平均的な分散関係  $\bar{E}_{n_0 k_0}$  を解析した。加速の初期期間  $t < \tau_c$  において、量子閉じ込め効果による輸送方向の有効質量増加を打ち消すようにサブバンド間遷移が起こることを解析的に示した。また、初期期間以降  $\tau_c < t$  では、電子が初期状態のサブバンドに戻ることを数値計算により示した。

これらの結果から、 $\tau_c$  までに散乱される電子が多いほど、自由走行時のサブバンド間遷移の効果によってドリフト速度が高くなることがわかった。さらに、閉じ込めがない極限では  $\tau_c \rightarrow \infty$  となることが期待されるため、自由走行時にサブバンド指数が不变であるという仮定が生じさせる漸近性の問題は、サブバンド指数変化を考慮することで解決できる。実際には、 $\tau_c$  までに散乱される電子と  $\tau_c$  以降に散乱される電子の両方が存在するため、サブバンド間遷移を無視したシミュレーションによるドリフト速度  $v_{\text{KI}}$  と、サブバンド間遷移を考慮したシミュレーションによるドリフト速度  $v_{\text{o}}$  には、

$$v_{\text{o}} \leq v_{\text{KI}} \leq v_{\text{o}} \times \frac{m_{1\text{D}}}{m_{3\text{D}}} \quad (5.133)$$

という関係 [式 (5.59)] が定性的に成立することを示した。

自由走行時サブバンド間遷移が輸送特性へ与える影響を、モンテカルロシミュレーションを用いて定量的に調べた。その結果、 $v_{\text{KI}}/v_{\text{o}}$  は電界にほとんど依存しないことがわかった。さらに、量子閉じ込め幅を十分に広げていくと、 $v_{\text{KI}}/v_{\text{o}}$  が  $m_{1\text{D}}/m_{3\text{D}}$  に漸近することが明らかとなった。[100]/(001), [001]/(110), [110]/(110) などの特定の結晶方位のナノシート構造では、 $v_{\text{KI}}/v_{\text{o}} = 1$

<sup>9</sup> サブバンド端よりもフェルミ準位が熱エネルギーの数倍程度低い場合、占有率はフェルミ準位に対して不变である。

であることがわかった。また、極めて微細なナノシート構造では、自由走行時サブバンド間遷移の効果は比較的小さいことがわかった。

ただし、本研究のモンテカルロシミュレーションでは、散乱過程として等方的なフォノン散乱のみを考慮した。そのため、不純物散乱などの非等方的な一般的な散乱過程を考慮した場合に、自由走行時サブバンド間遷移が電子輸送特性へ与える影響は異なる可能性がある。

最後に、(001)面、(110)面、(111)面上のナノシート構造における電子移動度を、緩和時間近似に基づき計算した。フォノン散乱に加え、ラフネス散乱を考慮し、さらに誘電関数テンソルを用いて遮蔽効果を考慮した。1DEG の電子状態は、シュレディンガー方程式とポアソン方程式の自己無撞着計算から求めた。ラフネス散乱制限移動度を、電子状態を 2DEG として近似した場合と、1DEG として適切に扱った場合の両方で計算し、それらの違いを比較した。その結果、ナノシート構造の電子状態を 2DEG として近似するのではなく、1DEG として適切に扱うことの重要性が示された。また、誘電関数テンソルを用いた遮蔽効果の考慮が、電子移動度の正確な評価において重要であることがわかった。

極めて薄いナノシート構造では、[001] 谷の  $z$  軸方向における有効質量が重いため、(001)面上のデバイスが高い移動度を示すことがわかった。比較的厚いナノシートにおいて、移動度の輸送方向依存性を包括的にシミュレーションした結果、(110)面上のナノシート構造では、伝導帯谷の強い有効質量異方性により、輸送方向によって移動度が大きく変化することがわかった。ナノシート幅  $w = 10$  nm、ナノシート厚さ  $h = 4$  nm、実効シート電子密度  $N_{\text{inv}} = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  の条件下において、(001)面上のナノシートでは輸送方向が [100]、(110)面上のナノシートでは輸送方向が [001]、(111)面上のナノシートでは輸送方向が [011] の場合に移動度が高くなることがわかった。また、ナノシート幅  $w = 10$  nm、ナノシート厚さ  $h = 4$  nm のナノシートについて、移動度の  $N_{\text{inv}}$  依存性をシミュレーションした結果、 $N_{\text{inv}} = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  程度の場合には、[001]/(110) がもっとも高い移動度を示すことがわかった。

## 参考文献

- [1] J. Nye, *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*, Oxford University Press (2002).
- [2] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern, “Electronic properties of two-dimensional systems,” *Rev. Mod. Phys.*, **54**, 437 (1982).
- [3] D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, *Nanoscale MOS Transistors: Semi-Classical Transport and Applications*, Cambridge University Press (2011).
- [4] S. Takagi, A. Toriumi, M. Iwase, and H. Tango, “On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET’s: Part II—effects of surface orientation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **41**, 2363 (1994).
- [5] G. Tsutsui and T. Hiramoto, “Mobility and threshold-voltage comparison between (110)- and (100)-oriented ultrathin-body silicon MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **53**,

2582 (2006).

- [6] J. Chen, T. Saraya, K. Miyaji, K. Shimizu, and T. Hiramoto, “Electron Mobility in Silicon Gate-All-Around [100]- and [110]-Directed Nanowire Metal–Oxide–Semiconductor Field-Effect Transistor on (100)-Oriented Silicon-on-Insulator Substrate Extracted by Improved Split Capacitance–Voltage Method,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **48**, 011205 (2009).
- [7] S. Mochizuki, N. Loubet, P. Mirdha, C. Durfee, H. Zhou, G. Tsusui, J. Frougier, R. Vega, L. Qin, N. Felix, D. Guo, and H. Bu, “Evaluation of (110) versus (001) Channel Orientation for Improved nFET/pFET Device Performance Trade-Off in Gate-All-Around Nanosheet Technology,” *2023 International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 1 (2023).
- [8] L. Silvestri, S. Reggiani, E. Gnani, A. Gnudi, and G. Baccarani, “A Low-Field Mobility Model for Bulk, Ultrathin Body SOI and Double-Gate n-MOSFETs With Different Surface and Channel Orientations–Part I: Fundamental Principles,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **57**, 1567 (2010).
- [9] F. Stern and W.E. Howard, “Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit,” *Phys. Rev.*, **163**, 816 (1967).
- [10] M. Bescond, N. Cavassilas, and M. Lannoo, “Effective-mass approach for n-type semiconductor nanowire MOSFETs arbitrarily oriented,” *Nanotechnology*, **18**, 255201 (2007).
- [11] C. Jacoboni, *Theory of Electron Transport in Semiconductors*, Springer (2010).
- [12] M.V. Fischetti and W.G. Vandenberghe, *Advanced Physics of Electron Transport in Semiconductors and Nanostructures*, Springer (2016).
- [13] C. Zener and R.H. Fowler, “A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics,” *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **145**, 523 (1934).
- [14] L.V. Keldysh, “The effect of a strong electric field on the optical properties of insulating crystals,” *J. Exp. Theor. Phys.*, **7**, 788 (1958).
- [15] E.O. Kane, “Theory of Tunneling,” *J. Appl. Phys.*, **32**, 83 (1961).
- [16] W.V. Houston, “Acceleration of Electrons in a Crystal Lattice,” *Phys. Rev.*, **57**, 184 (1940).
- [17] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Wiley (1987).
- [18] D. Esseni and P. Palestri, “Theory of the motion at the band crossing points in bulk semiconductor crystals and in inversion layers,” *J. Appl. Phys.*, **105**, 053702 (2009).
- [19] G. Strang, *Introduction to Linear Algebra*, Wellesley-Cambridge Press (2023).
- [20] M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport*, Cambridge University Press (2009).
- [21] S. Wang, “Generalization of the Thomas-Reiche-Kuhn and the Bethe sum rules,” *Phys. Rev. A*, **60**, 262 (1999).
- [22] C. Jacoboni and L. Reggiani, “The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials,” *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 645 (1983).

- [23] M. Hjelm, H.-E. Nilsson, A. Martinez, K.F. Brennan, and E. Bellotti, “Monte Carlo study of high-field carrier transport in 4H-SiC including band-to-band tunneling,” *J. Appl. Phys.*, **93**, 1099 (2003).
- [24] R. Hathwar, M. Saraniti, and S.M. Goodnick, “Modeling of multi-band drift in nanowires using a full band Monte Carlo simulation,” *J. Appl. Phys.*, **120**, 044307 (2016).
- [25] C. Hamaguchi, *Basic Semiconductor Physics*, Springer (2023).
- [26] M. Lundstrom and C. Jeong, *Near-Equilibrium Transport*, World Scientific (2013).
- [27] Y. Kruglyak, “Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics,” *J. Nanosci.*, **2014**, 725420 (2014).
- [28] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, and J. Bird, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press (2009).
- [29] I.M. Tienda-Luna, F.G. Ruiz, A. Godoy, B. Biel, and F. Gámiz, “Surface roughness scattering model for arbitrarily oriented silicon nanowires,” *J. Appl. Phys.*, **110**, 084514 (2011).
- [30] S. Jin, M.V. Fischetti, and T.-W. Tang, “Modeling of electron mobility in gated silicon nanowires at room temperature: Surface roughness scattering, dielectric screening, and band nonparabolicity,” *J. Appl. Phys.*, **102**, 083715 (2007).
- [31] T. Ando, “Screening effect and quantum transport in a silicon inversion layer in strong magnetic-fields,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **43**, 1616 (1977).
- [32] S. Jin, M.V. Fischetti, and T.-W. Tang, “Modeling of surface-roughness scattering in ultrathin-body SOI MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **54**, 2191 (2007).
- [33] D. Esseni and A. Abramo, “Modeling of electron mobility degradation by remote Coulomb scattering in ultrathin oxide MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **50**, 1665 (2003).
- [34] A. Konar, T. Fang, and D. Jena, “Dielectric-environment mediated renormalization of many-body effects in a one-dimensional electron gas,” *Phys. Rev. B*, **84**, 085422 (2011).
- [35] J.H. Davies, *The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction*, Cambridge University Press (1997).
- [36] H. Langtangen and K.-A. Mardal, *Introduction to Numerical Methods for Variational Problems*, Springer (2019).
- [37] Y. Taur and T.H. Ning, *Fundamentals of Modern VLSI Devices*, Cambridge University Press (2021).
- [38] V. Eyrat, “A Comparative Study on Methods for Convergence Acceleration of Iterative Vector Sequences,” *J. Comput. Phys.*, **124**, 271 (1996).
- [39] A. Trellakis, A.T. Galick, A. Pacelli, and U. Ravaioli, “Iteration scheme for the solution of the two-dimensional Schrödinger-Poisson equations in quantum structures,” *J. Appl. Phys.*, **81**, 7880 (1997).
- [40] H. Sakaki, “Scattering Suppression and High-Mobility Effect of Size-Quantized Electrons

in Ultrafine Semiconductor Wire Structures,” Jpn. J. Appl. Phys., **19**, L735 (1980).

[41] J. Motohisa and H. Sakaki, “Interface roughness scattering and electron mobility in quantum wires,” Appl. Phys. Lett., **60**, 1315 (1992).

## 第 6 章

### 結論

本研究の目的は、次世代半導体デバイスの早期開発に向けて、半導体ナノシートにおける電子輸送理論および計算技術を開発することである。この目的に対して、以下の(1)～(3)に関する研究を行った。(1) ナノシートの高効率な量子輸送デバイスシミュレーションを実現するため、ハミルトニアン行列サイズを削減する等価モデルの新規開発。(2) ナノシートにおいてラフネス散乱で決まる平均自由行程を、摂動論によらない量子輸送シミュレーション結果から抽出する数値計算手法の新規開発。(3) 自由走行時サブバンド間遷移確率の量子論に基づく計算と、これを反映したモンテカルロ法に基づく1次元電子ガスの輸送理論の新規開発。本章では、本研究を通して得られた成果・知見を総括し、本論文の結論を述べる。

第3章では、項目(1)に関する研究結果を述べた。本研究で新規に開発した1次元等価モデル(1DEM)は、シミュレーション対象のデバイスのバンド構造のみから、サイズの小さなハミルトニアン行列を構築できる。従来の行列次元削減法では、サイズの大きなハミルトニアン行列からサイズの小さなハミルトニアン行列を構築する必要があった。すなわち、削減対象となる元のハミルトニアン行列を最初に用意しなければならなかった。1DEMにはこのような制限がなく、柔軟にデバイスシミュレーションへ応用できる点に独自性がある。1DEMを様々な半導体1次元構造に適用し、性能を評価するために強結合近似モデル(TBM)との比較を行った。まず、TBMと1DEMのバンド構造を比較し、TBMのバンド端付近のバンド構造を1DEMが小さな行列サイズで精度良く表現できることを確認した。つぎに、1DEMとTBMに基づく非平衡グリーン関数(NEGF)シミュレーションを実行し、その結果を比較した。TBM-NEGFから求めた透過関数と1DEM-NEGFから求めた透過関数が精度良く一致していることが確認できた。これにより、1DEMを用いることで必要な精度を維持しつつ、NEGFシミュレーションの計算量を大幅に削減できることを実証した。

第4章では、項目(2)に関する研究結果を述べた。本研究で新規に開発した統計的な手法は、量子輸送シミュレーション結果から単一モードナノシートのラフネス散乱に起因する平均自由行程を高効率に抽出できる。本開発手法は、チャネル長  $L$  が短い領域でのみ用いることができた従来手法を拡張したものであり、 $L$  の長さによらず適用できる。また、アンダーソン局在の影響を取り除くために非弾性散乱を追加で考慮する必要がないため、高速に計算できるという特徴も有する。さら

に、電極領域とチャネル領域とを明示的に分割する必要がある量子輸送シミュレーションから、電極領域に依存しないバルク的な物理量を計算できる点にも独自性がある。本開発手法を用いて平均自由行程のナノシート厚さ  $T_w$  依存性を調べたところ、 $T_w$  が厚い領域ではよく知られた  $T_w^6$  の依存性を示し、 $T_w$  が薄い領域では  $T_w$  依存性が弱くなることがわかった。これは、ボルン近似および自己無撞着ボルン近似に基づく計算と整合していることを示した。本開発手法は、単純な摂動論が成立しない場合でも適用できる。また、無次元抵抗の統計的性質のみに基づいているため、ナノシートの幾何構造、ラフネスパターンを記述する統計モデル、および電子状態モデルによらず様々な系へ応用できると考えられる。本研究で開発した統計的手法の利点の一つは、このような適用範囲の広さにある。

第5章では、項目(3)に関する研究結果を述べた。本研究では、Krieger-Iafrate(KI)方程式を用いて、1次元電子ガスにおける自由走行時サブバンド間遷移確率を解析した。はじめに、逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロの場合、量子閉じ込め効果によって輸送方向の有効質量  $m_{1D}$  が、閉じ込めを無視したバルク的な有効質量  $m_{3D}$  よりも重くなることを数学的に証明した。つぎに、KI方程式に基づき、自由走行時のサブバンド指数変化を解析した。逆有効質量テンソルの非対角成分がゼロの場合、サブバンド指数は不变である一方、逆有効質量テンソルの非対角成分が非ゼロの場合、サブバンド指数が確率的に変化することを示した。自由走行時サブバンド間遷移を無視したシミュレーションから得たドリフト速度  $v_o$  と、自由走行時サブバンド間遷移を考慮したシミュレーションから得たドリフト速度  $v_{KI}$  には、 $v_o \leq v_{KI} \leq v_o \times (m_{1D}/m_{3D})$  なる関係が成立立つことを示した。サブバンド間遷移確率を、従来のモンテカルロシミュレーションに取り入れる新規手法を開発した。これを用いて、サブバンド間遷移が輸送特性に与える影響を定量的に解析した。新規手法と従来手法を用いて移動度をシミュレーションし、新規手法は、従来法が抱える巨視的な系への漸近性に関する問題点を、改善していることを示した。さらに、微細なナノシート構造では、 $v_{KI}/v_o \approx 1$  であることを明らかにした。すなわち、自由走行時サブバンド間遷移が輸送特性に与える影響はそれほど大きくなく、無視できることを定量的に示した。矩形断面ナノシートの電子移動度の結晶方位依存性を包括的にシミュレーションし、とくに(110)基板では、チャネル方位によって移動度が大きく変調されることを示した。

以上のように、本研究では、次世代半導体デバイスの開発に必要な基盤となる電子輸送理論および計算技術に関する新たな知見を得るとともに、実用的なシミュレーション手法を提案し、その有用性を実証した。具体的には、1次元等価モデルの開発による計算効率の向上、ラフネス散乱に起因する輸送特性の解析手法の新規開発、および自由走行時のサブバンド間遷移を考慮した輸送理論の確立という3つの主要課題に取り組み、それぞれにおいて新規かつ独自の結果が得られたと考える。これらの成果は、ナノシートを用いた次世代半導体デバイスのシミュレーション技術開発に寄与するものであり、半導体デバイスのさらなる高性能化に貢献するものと考えている。本研究を通して得られた成果は、半導体デバイスの性能向上のみならず、ナノスケール物理現象の理解にも寄与するものである。これにより、次世代のナノエレクトロニクスの発展に貢献することが期待される。

最後に、さらなる研究課題と将来の展望について述べる。本研究では、完全結晶からなるデバイ

スに対して 1DEM を構築し, 有効性を確認した。しかし, デバイス内部に歪みや欠陥が存在する場合でも, そのバンド構造がなんらかの方法で取得可能であれば, 1DEM を適用できると考えられる。これを実際に検証し, その有効性と限界を明らかにすることが次の課題となる。また, 本研究で開発した統計的手法は, 単一モード系の無次元抵抗分布に基づき, 単一モードのナノシート構造からラフネス散乱に由来する平均自由行程を抽出する。断面形状の大きいナノシートのような多モード系に適用するためには, 多モード系の無次元抵抗分布を記述する Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar 方程式 [1-3] などを活用した計算手法の開発が必要である。多モード系への拡張が実現できれば, 本研究で開発した統計的手法の適用範囲を大幅に広げられる。さらに, 自由走行時サブバンド間遷移の解析は, 本研究では一様電界を仮定して行った。一方, 実際のデバイスでは, 電界が非一様である場合がほとんどである。この非一様電界下での自由走行時サブバンド間遷移がデバイス特性に与える影響を詳細に解析することは, 実用的なデバイス設計に直接貢献する。

これらの課題に取り組むことで, 本研究の電子輸送理論をさらに拡張し, 次世代半導体デバイスの開発に向けた理論基盤の深化が期待される。

## 参考文献

- [1] O.N. Dorokhov, “Transmission coefficient and the localization length of an electron in N bound disordered chains,” JETP Lett., **36**, 318 (1982).
- [2] P.A. Mello, P. Pereyra, and N. Kumar, “Macroscopic approach to multichannel disordered conductors,” Ann. Phys., **181**, 290 (1988).
- [3] G. Mil’nikov and N. Mori, “Universal conductance statistics in a backscattering model: Solving the Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar equation with  $\beta = 1, 2$  and 4,” Phys. Rev. B, **88**, 155406 (2013).



## 付録 A

# バンド間トンネルシミュレーションの精度

等価モデル (EM: Equivalent Model) は、2012 年に G. Mil'nikov らによって文献 [1] ではじめて提案された。本付録では、間接遷移型半導体からなる量子細線において、バンド間トンネル (BTBT: Band-to-Band Tunneling) シミュレーションを行い、EM の輸送エネルギー窓と計算精度との関係を調べた結果を述べる [2]。

### A.1 等価モデルの構築方法

文献 [1] で示されている方法を用いて、 $sp^3d^5s^*$  強結合近似モデル (TBM: Tight-Binding Model) [3] で記述された量子細線構造の EM を構築した。その方法を以下で述べる。まず、輸送エネルギー窓を  $[\epsilon_1, \epsilon_2]$  と表す。ここで、 $\epsilon_1$  と  $\epsilon_2$  はそれぞれ輸送エネルギー窓の下限と上限である。EM では、サイズの大きなハミルトニアン行列から、 $[\epsilon_1, \epsilon_2]$  の範囲のプロッホ状態を抽出することで、サイズの小さなハミルトニアン行列を構築する。

TBM のバンド構造は、

$$H(k) = H_0 + W e^{ika} + W^T e^{-ika} \quad (A.1)$$

を対角化することで得られる。ここで、 $k$  は波数、 $a$  は格子定数である。 $H_0$  は孤立した単位胞のハミルトニアンであり、 $W$  は隣接する単位胞間の相互作用を表す。 $H_0$  と  $W$  は大きさが  $N_{AM} \times N_{AM}$  実行列である。TBM のバンド構造の中から、輸送エネルギー窓内を表現するように、プロッホ状態  $\phi_{nk}$  を任意の数サンプリングする。それらを並べた行列を直交化し、初期変換行列  $\Phi$  を構築する。変換行列  $\Phi$  を用いて、EM のハミルトニアンは、

$$h_0 = \Phi^\dagger H_0 \Phi, \quad w = \Phi^\dagger W \Phi \quad (A.2)$$

と与えられる。 $\Phi$  のサイズは  $N_{AM} \times N_{EM}$  である。通常、 $N_{EM} < N_{AM}$  となる。EM のバンド構造は、

$$h(k) = h_0 + w e^{ika} + w^T e^{-ika} \quad (A.3)$$

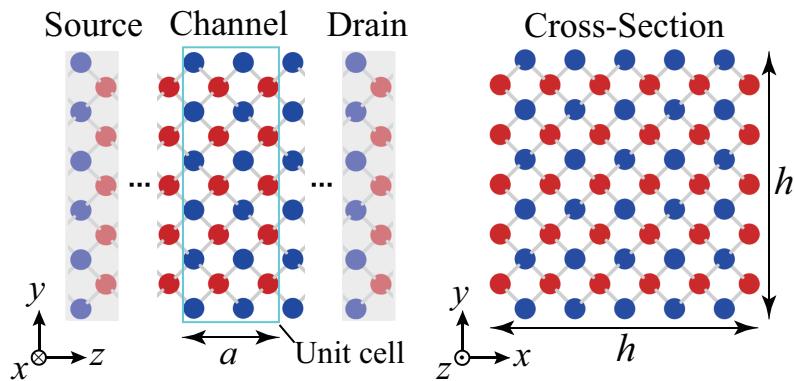


図 A.1:  $h \times h$  の正方形断面をもつ半導体量子細線構造の模式図。チャネルは両端で左電極(ソース)と右電極(ドレイン)に接続されている。

を対角化することで得られる。初期変換行列から構築した EM のバンド構造は、輸送エネルギー窓内のすべての物理的な状態を含む。しかし、非物理的な状態も含む。この非物理的な状態は、追加の基底  $\Phi_{\text{extra}}$  を変換行列  $\Phi$  に加えることで除去できる。そのさい、初期変換行列  $\Phi$  にすでに含まれる物理的な状態へ影響を及ぼさないように、追加する基底を構成する必要がある。このような基底の追加は、変分関数  $F[\Phi]$  を最小化することで行える。 $F[\Phi]$  の詳細な定義などは、文献 [1] で示されている。

## A.2 輸送エネルギー窓とバンド間トンネルシミュレーション精度の関係

図 A.1 にシミュレーションした量子細線構造を示す。 $h = 1.4$  nm の正方形断面 GaP 量子細線構造に対して EM を構築した。単位胞には 60 個の原子が含まれており、TBM のサイズは  $N_{\text{TBM}} = 600$  である。図 A.2 に TBM のバンド構造を灰色の実線で示す。右のパネルは実バンド構造 ( $E$ - $k$  関係)、左のパネルは複素バンド構造 ( $E$ - $\kappa$  関係) を表す。 $\kappa$  は波数の虚数部である。GaP は間接遷移型の半導体であるが、量子細線構造の場合には価電子帯端と伝導帯端は  $k = 0$  に位置し、それらはバンドギャップ領域で単一の減衰状態によって接続されていることがわかる。このもっとも内側の減衰状態が BTBT に主に寄与すると考えられる。

つぎに、3 とおりの輸送エネルギー窓を設定し、EM を構築した。輸送エネルギー窓を  $[E_c + \Delta E_c, E_v - \Delta E_v]$  と表す。ここで、 $E_c$  と  $E_v$  はそれぞれ伝導帯端と価電子帯端のエネルギーである。輸送エネルギー窓幅は  $E_W = \epsilon_2 - \epsilon_1 = E_g + \Delta E_c + \Delta E_v$  と与えられる。ここで、 $E_g$  はバンドギャップエネルギーを表す。

図 A.2 に、(a)  $\Delta E_c = \Delta E_v = 0.1$  eV, (b) 0.5 eV, (c) 1.5 eV として構築した EM のバンド構造を赤破線で示す。図 A.2(a)(b) より、EM は、価電子帯端および伝導帯端の実バンド構造を精度良く表現していることがわかる。しかし、減衰状態は精度良く表現できていない。一方、図 A.2(c) のように、輸送エネルギー窓幅を十分に広げると、EM は広い範囲の減衰状態を精度良く表現でき

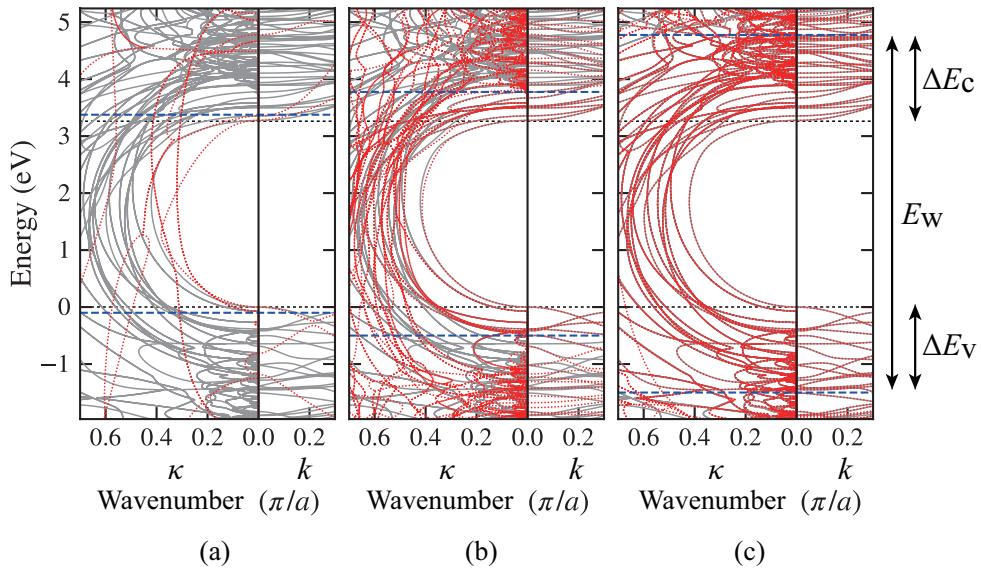


図 A.2:  $h = 1.4$  nm の GaP 量子細線のバンド構造。灰色の実線は TBM, 赤破線は EM を用いて計算した。右パネルは実バンド構造 ( $E$ - $k$  関係), 左パネルは複素バンド構造 ( $E$ - $\kappa$  関係) を表す。輸送エネルギー窓幅はそれぞれ, (a)  $E_W = 3.48$  eV, (b)  $4.28$  eV, (c)  $6.28$  eV である。

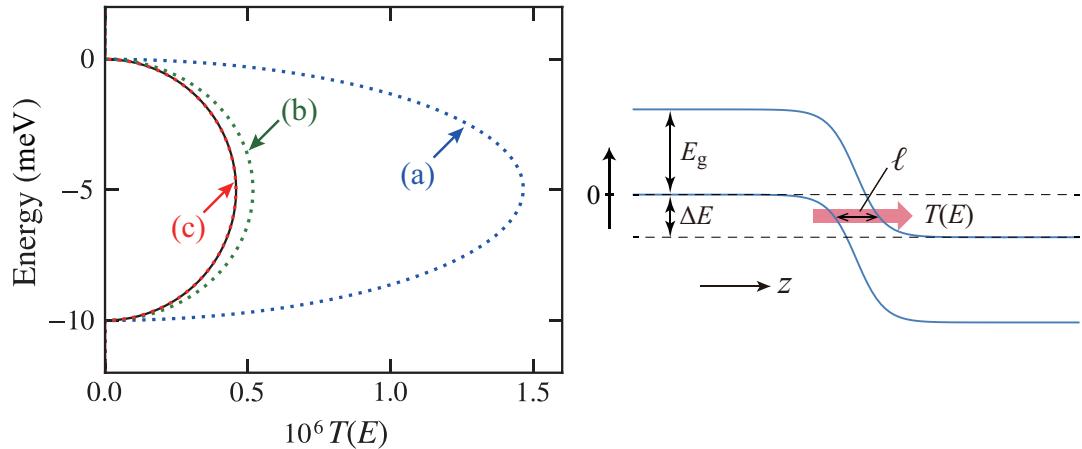


図 A.3: 透過関数  $T(E)$  のエネルギー依存性。エネルギーの原点はソース領域の価電子帯端とした。実線は TBM, 点線は EM を用いて計算した  $T(E)$ 。(a)~(c) の各 EM は図 A.2 と対応している。挿入図は、チャネル領域に印加したポテンシャルを表す。

いることがわかる。行列サイズの縮小割合  $N_{\text{EM}}/N_{\text{TBM}}$  は, (a)  $16/600$ , (b)  $89/600$ , (c)  $252/600$  となった。

つぎに, 図 A.2(a)(b)(c) の 3 つの EM に基づく非平衡グリーン関数法より, BTBT 透過関数を計算した。デバイス全体を, ソース領域, チャネル領域, ドレイン領域の 3 つの領域に分け, ソース領域の価電子帯からドレイン領域の伝導帯への BTBT をシミュレーションした。チャネル領域

には、図 A.3 に示すような  $\tanh$  関数型ポテンシャル、

$$U(z) = \frac{E_g + \Delta E}{2} \tanh\left(-\alpha \frac{z}{\ell}\right) \quad (\text{A.4})$$

を印加した。ここで、 $\alpha = \log(1 + 2E_g/\Delta E)$ 、 $\Delta E$  はトンネル窓幅である。 $\ell$  はトンネル距離であり、トンネル窓の中央における価電子帯と伝導帯の距離を表す。図 A.3 に、透過関数  $T(E)$  のエネルギー依存性を示す。 $\Delta E = 10 \text{ meV}$ 、 $\ell = 5 \text{ nm}$  とした。エネルギーの原点はソース領域の価電子帯上端とした。TBM の結果を実線で、EM の結果を点線で示す。(a)(b) の EM から計算した透過関数は、TBM の結果と異なる値を示す。一方、(c) の輸送エネルギー窓幅を広く設定した EM は、TBM の結果と精度良く一致していることがわかる。

以上の結果は、BTBT のシミュレーションでは、 $E$ - $k$  関係を表現するだけでは不十分であり、 $E$ - $\kappa$  関係も十分な精度で表現する必要があることを示唆している。したがって、EM で BTBT を扱う場合、実バンド構造だけに注目した見かけの輸送エネルギー窓では不十分である。減衰状態を高精度に表現するために見かけよりも広い輸送エネルギー窓を設定する必要がある。

## 参考文献

- [1] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, "Equivalent transport models in atomistic quantum wires," *Phys. Rev. B*, **85**, 035317 (2012).
- [2] J. Okada, N. Mori, and G. Mil'nikov, "Accuracy of equivalent model in band-to-band tunneling simulation of semiconductor nanowires," *Jpn. J. Appl. Phys.*, **62**, SC1063 (2023).
- [3] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, "Empirical *spds*\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters," *Phys. Rev. B*, **57**, 6493 (1998).

## 付録 B

# 後方散乱の平均自由行程

本付録では、後方散乱の平均自由行程  $\lambda$  と輸送の平均自由行程  $\ell$  との関係について説明する。

### B.1 後方散乱の平均自由行程 $\lambda$ と輸送の平均自由行程 $\ell$

拡散輸送領域における等方的な  $d$  次元伝導体 ( $d = 1, 2, 3$ ) を考える。試料の大きさを、

$$\Omega = \begin{cases} L & (d = 1) \\ LW & (d = 2) \\ LA & (d = 3) \end{cases} \quad (B.1)$$

$$(B.2)$$

$$(B.3)$$

とする。図 B.1 に示すように、 $L$  は輸送方向 ( $x$  軸方向) の長さを表し、 $W$  は 2 次元伝導体の断面長さ、 $A$  は 3 次元伝導体の断面積を表す。この  $d$  次元伝導体を流れる電流<sup>\*1</sup>は、緩和時間近似のものとで、

$$\mathbf{J} = \frac{n_{\text{sp}}}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} e \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}), \quad f(\mathbf{k}) = e \tau_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{F} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) \quad (B.4)$$

と表せる [1, 2]。ここで、 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$  は群速度、 $\tau_{\mathbf{k}}$  は運動量緩和時間、 $\mathbf{F}$  は電界ベクトル、 $f_0(E)$  は熱平衡分布関数、 $n_{\text{sp}} = 2$  はスピン縮退度を表す。この式より、電気伝導率  $\sigma_{xx}$  はつぎの式で与えら

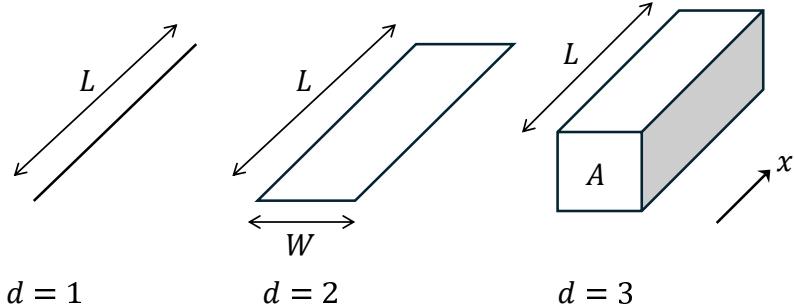


図 B.1:  $d$  次元伝導体の模式図。輸送方向を  $x$  軸方向とした。

<sup>\*1</sup>  $d = 3$  の場合、 $\mathbf{J}$  は輸送方向に垂直な面積あたりの電流を表す。 $d = 2$  の場合、 $\mathbf{J}$  は輸送方向に垂直な幅あたりの電流を表す。 $d = 1$  の場合、 $\mathbf{J}$  は電流を表す。

れる。

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \frac{n_{\text{sp}}}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} e^2 \tau_{\mathbf{k}} v_x^2(\mathbf{k}) \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) \\ &= e^2 \int D(E) \tau(E) \frac{v^2(E)}{d} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

ここで,  $v(E) = (2E/m)^{1/2}$  は電子の速さであり,  $D(E)$  は状態密度を表す。波数  $k$  に関する総和をエネルギー積分に変換するさい, 例えば, 3 次元の場合,  $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = 3v_x^2 = v^2$  が成り立つことなどを利用した。つぎに, 電気伝導率  $\sigma_{xx}$  からコンダクタンス  $G$  を計算する。

1 次元の場合は,

$$G = \frac{\sigma_{xx}}{L} = \frac{n_{\text{sp}} e^2}{2\pi\hbar} \int \frac{2v(E)\tau(E)}{L} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE \quad (\text{B.6})$$

2 次元の場合は,

$$G = \frac{W}{L} \sigma_{xx} = \frac{n_{\text{sp}} e^2}{2\pi\hbar} \int W \frac{\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} \frac{\frac{\pi}{2}v(E)\tau(E)}{L} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE \quad (\text{B.7})$$

3 次元の場合は,

$$G = \frac{A}{L} \sigma_{xx} = \frac{n_{\text{sp}} e^2}{2\pi\hbar} \int A \frac{mE}{2\pi\hbar^2} \frac{\frac{4}{3}v(E)\tau(E)}{L} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE \quad (\text{B.8})$$

となる。一方, ランダウアー公式より, コンダクタンスは,

$$G = \frac{n_{\text{sp}} e^2}{2\pi\hbar} \int M(E) T(E) \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE \quad (\text{B.9})$$

と表せる。ここで,  $T(E)$  は透過率であり,  $M(E)$  はつぎの式で与えられるモード数関数である [3]。

$$M(E) = \begin{cases} \Theta(E) & (d = 1) \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

$$M(E) = \begin{cases} W \frac{\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} & (d = 2) \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

$$M(E) = \begin{cases} A \frac{mE}{2\pi\hbar^2} & (d = 3) \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

透過率  $T(E)$  が, 後方散乱の平均自由行程  $\lambda(E)$  を用いて,

$$T(E) = \frac{\lambda(E)}{L + \lambda(E)} \quad (\text{B.13})$$

と表せると仮定すると, 拡散輸送領域では  $L \gg \lambda(E)$  であるので, 式 (B.13) を式 (B.9) に代入すると, 拡散輸送領域のコンダクタンスの式,

$$G = \frac{n_{\text{sp}} e^2}{2\pi\hbar} \int M(E) \frac{\lambda(E)}{L} \left( -\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE \quad (\text{B.14})$$

が得られる。この式と、式 (B.6)、式 (B.7)、式 (B.8) とを比較することにより、電気伝導に関する平均自由行程  $\ell(E) = v(E)\tau(E)$  と、後方散乱の平均自由行程  $\lambda(E)$  とは以下の関係にあることがわかる [4]。

$$\lambda(E)/\ell(E) = \begin{cases} 2 & (d = 1) \\ \frac{\pi}{2} & (d = 2) \\ \frac{4}{3} & (d = 3) \end{cases} \quad \begin{array}{l} (B.15) \\ (B.16) \\ (B.17) \end{array}$$

## 参考文献

- [1] C. Hamaguchi, Basic Semiconductor Physics, Springer (2023).
- [2] D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, Nanoscale MOS Transistors: Semi-Classical Transport and Applications, Cambridge University Press (2011).
- [3] Y. Kruglyak, “Landauer-Datta-Lundstrom Generalized Transport Model for Nanoelectronics,” J. Nanosci., **2014**, 725420 (2014).
- [4] C. Beenakker, “Random-matrix theory of quantum transport,” Rev. Mod. Phys., **69**, 731 (1997).



## 付録 C

# 量子井戸におけるラフネス散乱

本付録では、量子井戸におけるラフネス散乱の摂動モデルについて説明する [1, 2] .

### C.1 行列要素

幅  $T_w$  の無限量子井戸に閉じ込められた 2 次元電子ガスを考える。サブバンド指数を  $n (= 1, 2, 3, \dots)$ 、面内の波数を  $k$  として電子状態は、

$$\Phi_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_n(z) \quad (\text{C.1})$$

$$E_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_k + \epsilon_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{xy}} + \frac{\hbar^2}{2m_z} \left( \frac{n\pi}{T_w} \right)^2 \quad (\text{C.2})$$

と表せる。ここで、 $A$  は 2 次元系の面積、 $m_{xy}$  は  $xy$  面内方向の有効質量、 $m_z$  は  $z$  軸方向(閉じ込め方向)の有効質量、 $\mathcal{E}_k$  は電子の運動エネルギー、 $\epsilon_n$  はサブバンド準位を表す。片側の面のラフネス  $\Delta(\mathbf{r})$  によるエネルギー変化は、

$$U_n(\mathbf{r}) = \frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial T_w} \Delta(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{m_z T_w^3} \Delta(\mathbf{r}) \quad (\text{C.3})$$

となる。同一サブバンド間行列要素は、

$$\langle n\mathbf{k}' | U_n(\mathbf{r}) | n\mathbf{k} \rangle = -\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{m_z T_w^3} \frac{1}{A} \int \Delta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (\text{C.4})$$

となるので、つぎの式が得られる。

$$|\langle n\mathbf{k}' | U_n(\mathbf{r}) | n\mathbf{k} \rangle|^2 = \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{1}{A^2} \iint \Delta(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (\text{C.5})$$

ラフネスパターンに関する統計平均(試料平均)、 $\langle \dots \rangle_{\text{av}}$  をとると、

$$\langle |\langle n\mathbf{k}' | U_n(\mathbf{r}) | n\mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} = \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{1}{A^2} \iint \langle \Delta(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}') \rangle_{\text{av}} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (\text{C.6})$$

となる。ここで、ラフネスパターンは定常でランダムに生じることに注意すると、 $\langle \Delta(\mathbf{r})\Delta(\mathbf{r}') \rangle_{\text{av}}$  は、式 (4.14) で定義される自己相関関数  $C_R(\mathbf{r})$  を用いて、

$$\langle \Delta(\mathbf{r})\Delta(\mathbf{r}') \rangle_{\text{av}} = C_R(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{C.7})$$

と表せる。これを式 (C.6) に代入すると、

$$\langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} = \frac{n^4\pi^4\hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{1}{A} S_R(\mathbf{q}) \quad (\text{C.8})$$

となる。ただし、 $S_R(\mathbf{q})$  は式 (4.17) で定義されるパワースペクトル密度である。

以上の計算からわかるように、一般に、行列要素がラフネス  $\Delta(\mathbf{r})$  に比例する場合、 $\langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{av}}$  はパワースペクトル密度  $S_R(\mathbf{q})$  に比例する。

## C.2 運動量緩和時間

上下の面のラフネスに相関がないと仮定すると、 $g_R = 2$  として、運動量緩和時間  $\tau_{n\mathbf{k}}$  は、

$$\frac{1}{\tau_{n\mathbf{k}}} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} (1 - \cos \theta) \delta(E_{n\mathbf{k}'} - E_{n\mathbf{k}}) \quad (\text{C.9})$$

となる。ここで、 $\theta$  は  $\mathbf{k}'$  と  $\mathbf{k}$  がなす角を表す。行列要素に前節の結果を代入すると、

$$\frac{1}{\tau_{n\mathbf{k}}} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \frac{n^4\pi^4\hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{m_{xy}}{2\pi\hbar^2} \int \frac{d\theta}{2\pi} S_R(k [2(1 - \cos \theta)]^{1/2}) (1 - \cos \theta) \quad (\text{C.10})$$

となる。ただし、 $|\mathbf{k}' - \mathbf{k}| = k [2(1 - \cos \theta)]^{1/2}$  なる関係を用いた。相関関数としてつぎの形を仮定する。

$$S_R(q) = \pi \Delta^2 \Lambda^2 F(q^2 \Lambda^2 / 4) \quad (\text{C.11})$$

とくに、ガウス型・指数関数型の相関関数の場合、

$$F(x) = \begin{cases} e^{-x} & \text{(ガウス型)} \\ (1 + 2x)^{-3/2} & \text{(指数関数型)} \end{cases} \quad (\text{C.12})$$

$$(\text{C.13})$$

である。このとき、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{n\mathbf{k}}} &= g_R \frac{2\pi}{\hbar} \frac{n^4\pi^4\hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{m_{xy}}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \pi \Delta^2 \Lambda^2 F\left(\frac{1}{2}k^2 \Lambda^2 (1 - \cos \theta)\right) (1 - \cos \theta) \\ &= g_R \frac{2\pi}{\hbar} \frac{n^4\pi^5\hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{m_{xy}}{2\pi\hbar^2} \Delta^2 \Lambda^2 [M_0(\eta) - M_1(\eta)] \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

となる。ここで、 $\eta = k^2 \Lambda^2 / 2 = m_{xy} \mathcal{E}_k \Lambda^2 / \hbar^2$  であり、 $M_0(\eta)$ 、 $M_1(\eta)$  を、つぎの式で定義した。

$$M_n(\eta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(\eta(1 - \cos \theta)) \cos^n \theta d\theta \quad (n = 0, 1) \quad (\text{C.15})$$

この  $M_0(\eta)$ 、 $M_1(\eta)$  は、ガウス型相関関数の場合、

$$M_n(\eta) = e^{-\eta} I_n(\eta) \quad (n = 0, 1) \quad (\text{C.16})$$

となり，指数関数型相関関数の場合，

$$M_0(\eta) = \frac{2E(m)}{\pi\sqrt{1+4\eta}}, \quad M_1(\eta) = \frac{(2\eta+1)E(m) - K(m)}{\pi\eta\sqrt{1+4\eta}}, \quad m = \frac{4\eta}{1+4\eta} \quad (\text{C.17})$$

となる．ただし， $I_n(\eta)$  はつぎの式で定義される変形ベッセル関数，

$$I_n(\eta) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{\eta \cos \theta} \cos(n\theta) d\theta \quad (\text{C.18})$$

であり， $K(m)$ ， $E(m)$  は，つぎの式で定義される第 1 種・第 2 種の完全橍円積分である．

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} (1 - m \sin^2 t)^{-1/2} dt, \quad E(m) = \int_0^{\pi/2} (1 - m \sin^2 t)^{1/2} dt \quad (\text{C.19})$$

### C.3 量子緩和時間

量子緩和時間  $\tau_{n\mathbf{k}}^q$  は，

$$\frac{1}{\tau_{n\mathbf{k}}^q} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k}\rangle|^2 \rangle_{\text{av}} \delta(E_{n\mathbf{k}'} - E_{n\mathbf{k}}) \quad (\text{C.20})$$

と定義される．運動量緩和時間と同様にして計算を進めると，

$$\frac{1}{\tau_{n\mathbf{k}}^q} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \frac{n^4 \pi^5 \hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{m_{xy}}{2\pi\hbar^2} \Delta^2 \Lambda^2 M_0(\eta) \quad (\text{C.21})$$

となる．

### C.4 自己無撞着ボルン近似

自己無撞着ボルン近似のもとでは，自己エネルギー  $\Sigma_{nk}$  の虚部を  $-i\Gamma_{nk}/2$  とすると，

$$\Gamma_{nk} = \frac{\hbar}{\tau_{n\mathbf{k}}^q} \quad (\text{C.22})$$

であり，

$$\frac{\Gamma_{nk}}{\hbar} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k}\rangle|^2 \rangle_{\text{av}} \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{n\mathbf{k}'}(E_{n\mathbf{k}}) \right] \quad (\text{C.23})$$

$$G_{n\mathbf{k}'}(E) = \frac{1}{E - E_{n\mathbf{k}'} + \frac{i}{2}\Gamma_{n\mathbf{k}'}} \quad (\text{C.24})$$

と表す（自己エネルギーの実部を無視した）．したがって，

$$\frac{\Gamma_{nk}}{\hbar} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k}\rangle|^2 \rangle_{\text{av}} \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'} + \frac{i}{2}\Gamma_{n\mathbf{k}'}} \right] \quad (\text{C.25})$$

となる。ここで、 $\Gamma_{nk'} = \Gamma_{nk}$  を仮定すると、

$$\begin{aligned}
 \frac{\Gamma_{nk}}{\hbar} &= g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle n\mathbf{k}'|U_n(\mathbf{r})|n\mathbf{k}\rangle|^2 \rangle_{\text{av}} \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{k'} + \frac{i}{2}\Gamma_{nk}} \right] \\
 &= g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \frac{S_R(\mathbf{q})}{A} \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} + \frac{i}{2}\Gamma_{nk}} \right] \\
 &= g_R \frac{2\pi}{\hbar} \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4}{m_z^2 T_w^6} \int \frac{qdq d\phi}{(2\pi)^2} S_R(\mathbf{q}) \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} + \frac{i}{2}\Gamma_{nk}} \right] \\
 &= g_R \frac{n^4 \pi^4 \hbar^3 \Delta^2}{2m_z^2 T_w^6} \int q dq d\phi \Lambda^2 F(q^2 \Lambda^2 / 4) \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} + \frac{i}{2}\Gamma_{nk}} \right]
 \end{aligned} \tag{C.26}$$

となる。ここで、 $\mathbf{k}$  の方向に  $x$  軸を選ぶと、 $\mathbf{k} = (k, 0)$ 、 $\mathbf{q} = (q \cos \phi, q \sin \phi)$  となり、

$$|\mathbf{k} + \mathbf{q}|^2 = k^2 + q^2 + 2kq \cos \phi \tag{C.27}$$

となるので、 $\mathcal{E}_q = \hbar^2 q^2 / 2m_{xy}$  として、

$$\mathcal{E}_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} = \mathcal{E}_k + \mathcal{E}_q + 2\sqrt{\mathcal{E}_k \mathcal{E}_q} \cos \phi \tag{C.28}$$

$$q dq = \frac{m_{xy}}{\hbar^2} d\mathcal{E}_q \tag{C.29}$$

と表せるため、

$$\Gamma_{nk} = g_R \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4 \Delta^2}{2m_z^2 T_w^6} \frac{1}{\mathcal{E}_\Lambda} \int_0^\infty d\mathcal{E}_q F(\mathcal{E}_q / 4\mathcal{E}_\Lambda) \int_0^\pi d\phi \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{-\mathcal{E}_q - 2\sqrt{\mathcal{E}_k \mathcal{E}_q} \cos \phi + \frac{i}{2}\Gamma_{nk}} \right] \tag{C.30}$$

となる。ここで、 $\mathcal{E}_\Lambda = \hbar^2 / 2m_{xy} \Lambda^2$  とおいた。したがって、自己無撞着方程式は、 $x = \mathcal{E}_q / 4\mathcal{E}_\Lambda$  として、以下のようになる。

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{nk} &= g_R \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4 \Delta^2}{2m_z^2 T_w^6} \frac{1}{\pi \mathcal{E}_\Lambda} \int_0^\infty d\mathcal{E}_q F(\mathcal{E}_q / 4\mathcal{E}_\Lambda) \int_0^\pi d\phi \frac{\frac{1}{2}\Gamma_{nk}}{(\mathcal{E}_q + 2\sqrt{\mathcal{E}_k \mathcal{E}_q} \cos \phi)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_{nk})^2} \\
 &= g_R \frac{2n^4 \pi^3 \hbar^4 \Delta^2}{m_z^2 T_w^6} \int_0^\infty dx F(x) \int_0^\pi d\phi \frac{\frac{1}{2}\Gamma_{nk}}{(4\mathcal{E}_\Lambda x + 4\sqrt{\mathcal{E}_k \mathcal{E}_\Lambda x} \cos \phi)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_{nk})^2}
 \end{aligned} \tag{C.31}$$

特別な場合として、量子緩和時間が短く状態密度の幅が大きい場合、式 (C.31) の被積分関数における分母の第 1 項を無視すると、

$$\Gamma_{nk}^{(1)} = \sqrt{g_R} \frac{2n^2 \pi^2 \hbar^2 \Delta}{m_z T_w^3} \tag{C.32}$$

となる。また、量子緩和時間が長く状態密度の幅が小さい場合、 $-\text{Im}G_{nk'}(E)/\pi = \delta(E - E_{nk'})$  となることから、式 (C.23) より、

$$\Gamma_{nk}^{(0)} = g_R \frac{n^4 \pi^5 \hbar^2 m_{xy} \Delta^2 \Lambda^2}{m_z^2 T_w^6} M_0(\eta) \tag{C.33}$$

となる。

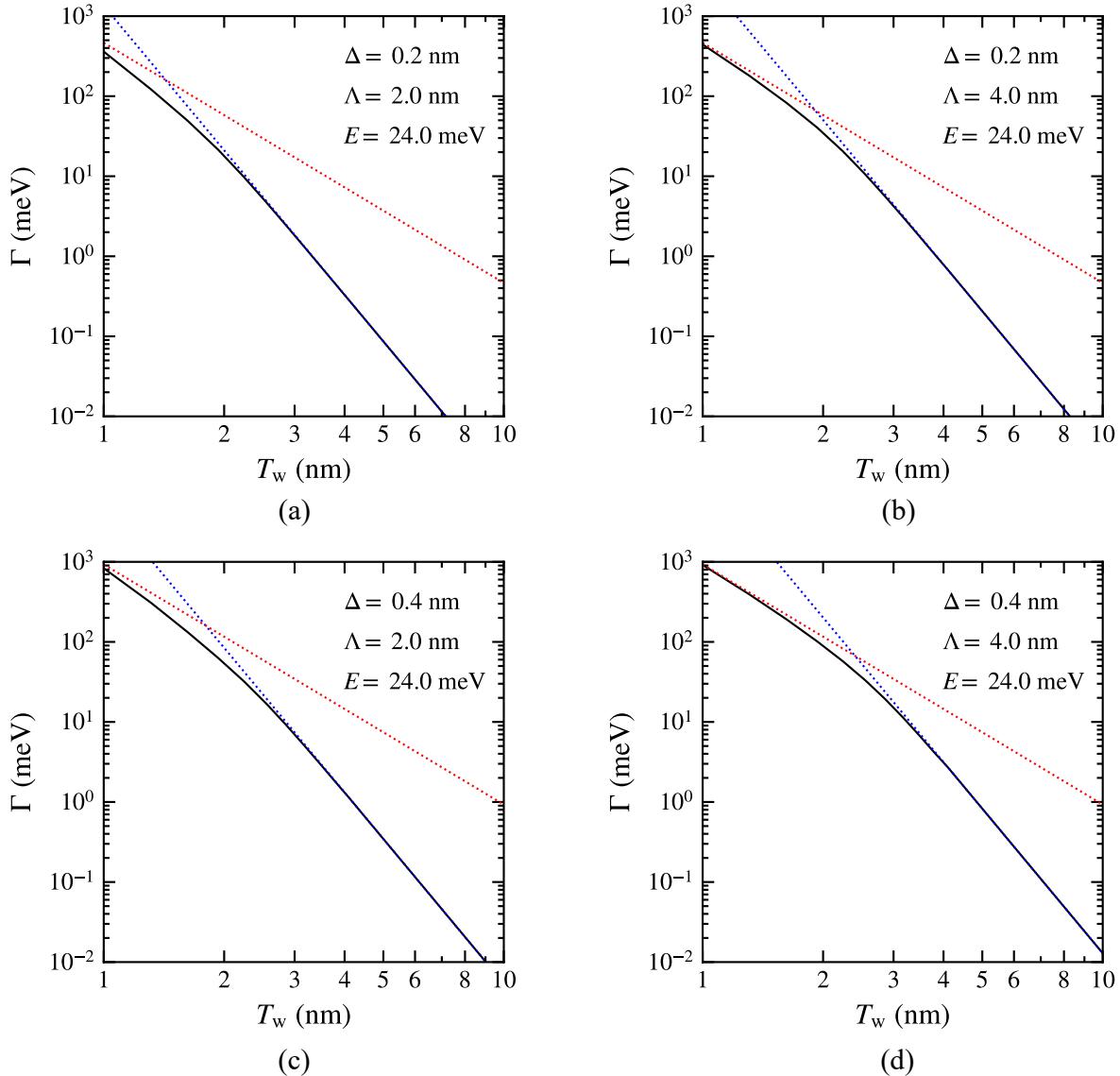


図 C.1: 状態密度の幅  $\Gamma$  の井戸幅  $T_w$  依存性 . 実線は式 (C.31) を自己無撞着的に解いた結果 , 赤点線は式 (C.32) , 青点線は式 (C.33) を用いた場合の結果 . 相関関数をガウス型 ,  $n = 1$  ,  $m_{xy} = 0.19m_0$  ,  $m_z = 0.916m_0$  とした . 上段 (a,b) では  $\Delta = 0.2$  nm , 下段 (c,d) では  $\Delta = 0.4$  nm とした . 左列 (a,c) では  $\Lambda = 2.0$  nm , 右列 (b,d) では  $\Delta = 4.0$  nm とした .

図 C.1 に , 状態密度の幅  $\Gamma$  の井戸幅  $T_w$  依存性を示す . 実線は式 (C.31) を自己無撞着的に解いた場合 , 赤点線は式 (C.32) , 青点線は式 (C.33) を用いた場合の結果を表す . 相関関数をガウス型 ,  $n = 1$  ,  $m_{xy} = 0.19m_0$  ,  $m_z = 0.916m_0$  とした . 上段 (a,b) では  $\Delta = 0.2$  nm , 下段 (c,d) では  $\Delta = 0.4$  nm とした . 左列 (a,c) では  $\Lambda = 2.0$  nm , 右列 (b,d) では  $\Delta = 4.0$  nm とした . 井戸幅が大きくなるにつれて , ラフネス散乱強度が低くなるため , 状態密度の幅は小さくなることがわかる . また , 式 (C.31) を自己無撞着的に解いた結果 (黒実線) は , ボルン近似の結果 (青点線) に漸近していることがわかる . 一方 , 井戸幅が小さくなるにつれて黒実線は赤点線に漸近していることがわかる . したがって , 量子緩和時間は , 式 (C.32) , 式 (C.33) より ,  $T_w$  が大きい場合は  $T_w^6$  ,  $T_w$  が小さ

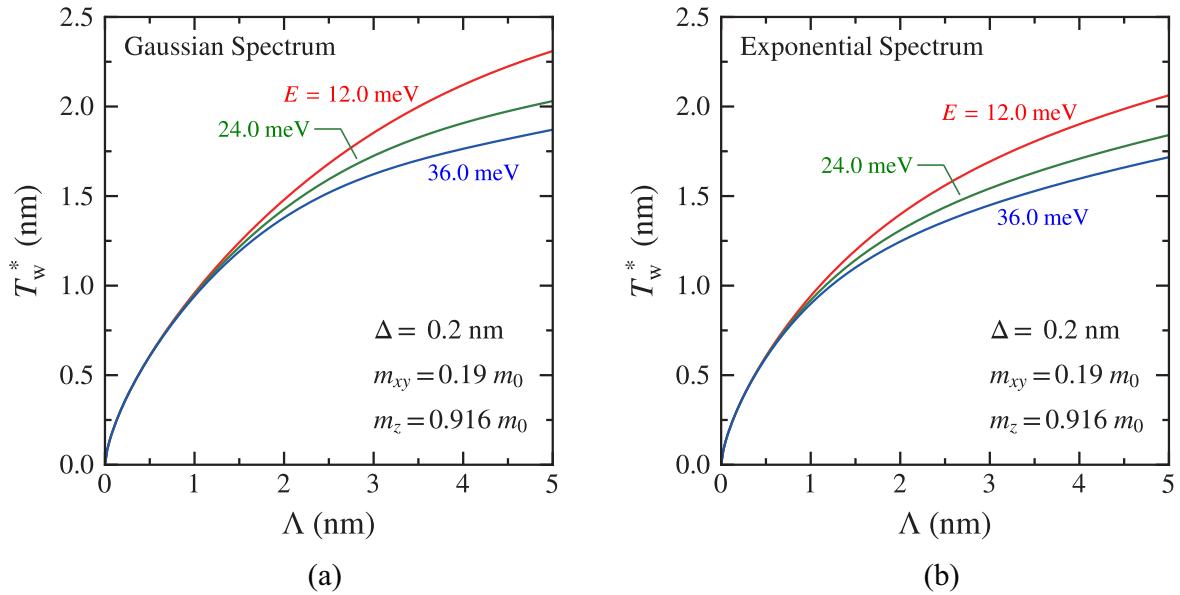


図 C.2: 量子緩和時間の膜厚  $T_w$  依存性が,  $T_w^3$  から  $T_w^6$  に変化するおよその膜厚  $T_w^*$  の相関長  $\Lambda$  依存性 . (a) はガウス型相関関数, (b) は指数型相関関数の場合 . ラフネス高さ  $\Delta = 0.2 \text{ nm}$ , 有効質量  $m_{xy} = 0.19 m_0$ ,  $m_z = 0.916 m_0$  とした . 電子の運動エネルギーが  $E = 12.0, 24.0, 36.0 \text{ meV}$  の場合の結果をそれぞれ, 赤線, 緑線, 青線で示した .

い場合は  $T_w^3$  に比例して変化することがわかる . 量子緩和時間の井戸幅に対する依存性が  $T_w^3$  から  $T_w^6$  に変化する  $T_w$  は, 赤点線と青点線が交わる  $T_w$  程度であると見積もることができる . すなわち,  $\Gamma_{nk}^{(1)} = \Gamma_{nk}^{(0)}$  を満たす  $T_w$  を求めると ,

$$T_w^* = \left[ \frac{\sqrt{g_R} n^2 \pi^3}{2} \frac{m_{xy}}{m_z} \Delta \Lambda^2 M_0(\eta) \right]^{1/3}, \quad \eta = m_{xy} \mathcal{E}_k \Lambda^2 / \hbar^2 \quad (\text{C.34})$$

となる . この式から計算した  $T_w^*$  の相関長  $\Lambda$  依存性を図 C.2 に示す . 相関関数の関数形として, 図 C.2(a) ではガウス型相関関数, (b) では指数型相関関数を仮定した . また, ラフネス高さ  $\Delta = 0.2 \text{ nm}$ , 有効質量  $m_{xy} = 0.19 m_0$ ,  $m_z = 0.916 m_0$  とした . 電子の運動エネルギーが  $E = 12.0, 24.0, 36.0 \text{ meV}$  の場合の結果をそれぞれ, 赤線, 緑線, 青線で示した . なお, 図 C.1 および図 C.3 からわかるように, 平均自由行程の  $T_w$  依存性が変化するのは,  $T_w^*$  より, 1–2 nm 程度厚い点であることに注意 .

## C.5 状態密度の幅を考慮した運動量緩和時間

自己無撞着的に求めた状態密度の幅  $\Gamma_{nk}$  を考慮した運動量緩和時間は ,

$$\frac{1}{\tau_{nk}} = g_R \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \langle |\langle n\mathbf{k}' | U_n(\mathbf{r}) | n\mathbf{k} \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} (1 - \cos \theta) \left[ -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{n\mathbf{k}'}(E_{n\mathbf{k}}) \right] \quad (\text{C.35})$$

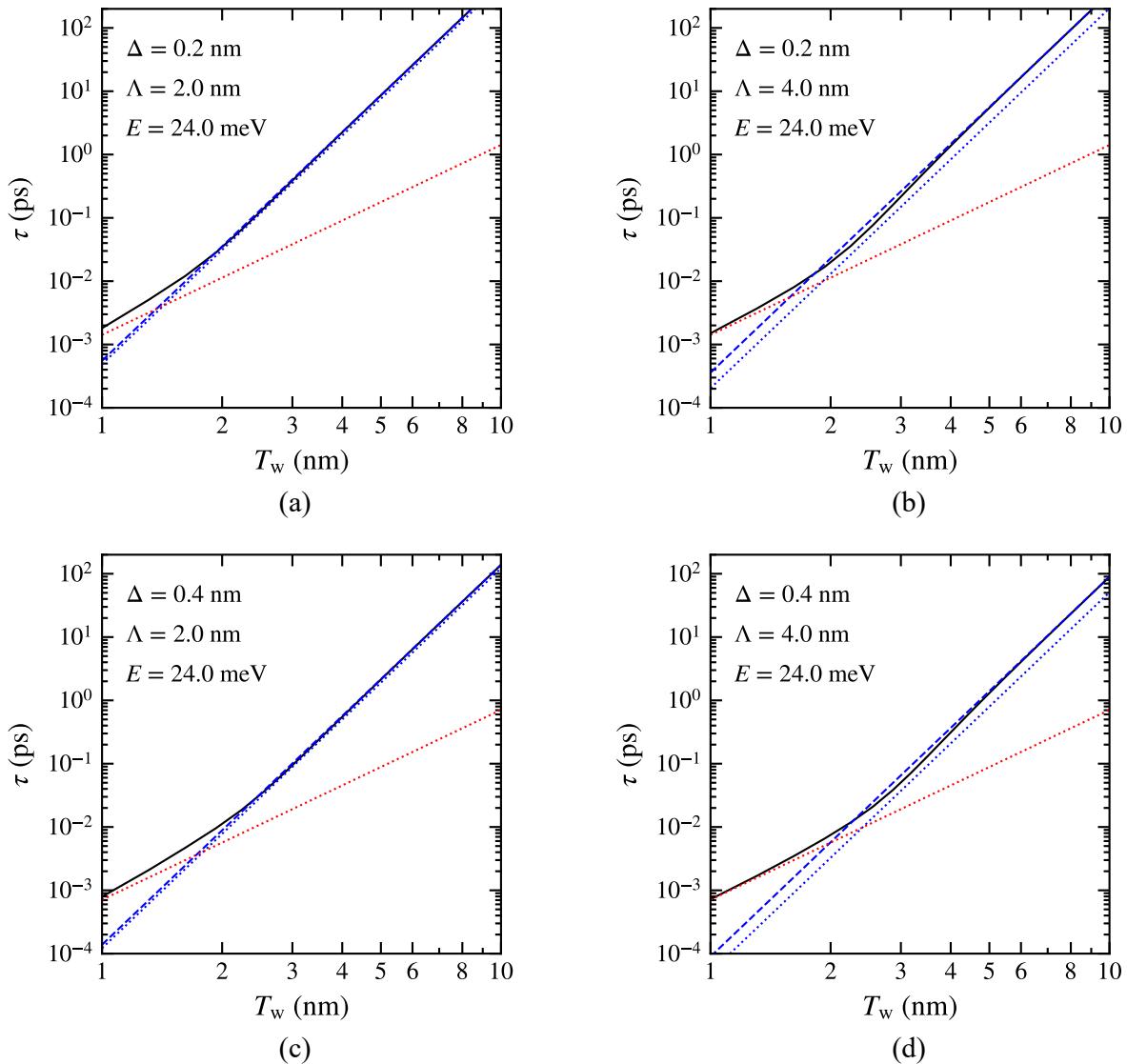


図 C.3: 緩和時間の井戸幅  $T_w$  依存性 . 実線は式 (C.36) を , 青破線は式 (C.10) を用いて計算した運動量緩和時間 . 赤点線は式 (C.32) , 青点線は式 (C.33) から計算した状態密度の幅を量子緩和時間に換算した結果 . 相関関数をガウス型 ,  $n = 1$  ,  $m_{xy} = 0.19m_0$  ,  $m_z = 0.916m_0$  とした . 上段 (a,b) では  $\Delta = 0.2$  nm , 下段 (c,d) では  $\Delta = 0.4$  nm とした . 左列 (a,c) では  $\Lambda = 2.0$  nm , 右列 (b,d) では  $\Delta = 4.0$  nm とした .

と表せる . 前節の結果を用いると ,

$$\frac{1}{\tau_{nk}} = \frac{\Gamma_{nk}^{(1)}{}^2}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dx F(x) \int_0^\pi d\phi \frac{\frac{1}{2}\Gamma_{nk}}{(4\mathcal{E}_\Lambda x + 4\sqrt{\mathcal{E}_k \mathcal{E}_\Lambda} x \cos\phi)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_{nk})^2} (1 - \cos\theta) \quad (\text{C.36})$$

となる . ここで ,  $\phi$  は  $q$  と  $k$  がなす角 ,  $\theta$  は  $k'$  と  $k$  がなす角を表す .

図 C.3 に , 運動量緩和時間と量子緩和時間の井戸幅  $T_w$  依存性を示す . 実線は式 (C.36) を , 青破線は式 (C.10) を用いて計算した運動量緩和時間である . 式 (C.36) を計算するさい ,  $\cos\theta = -\cos 2\phi$  と近似した . 上段 (a,b) では  $\Delta = 0.2$  nm , 下段 (c,d) では  $\Delta = 0.4$  nm とした . 左列 (a,c) では

$\Lambda = 2.0 \text{ nm}$  , 右列 (b,d) では  $\Delta = 4.0 \text{ nm}$  とした .  $T_w$  が大きい場合 , 実線と青破線は一致していることがわかる . これは ,  $T_w$  が大きい場合 , 散乱強度が低く , 状態密度が幅をもつ効果が表れないといためである . また , 図には , 量子緩和時間を合わせてプロットした . 赤点線は式 (C.32) , 青点線は式 (C.33) から計算した状態密度の幅を量子緩和時間に換算した結果である . 相関長  $\Lambda$  が大きい場合 , 運動量緩和時間と量子緩和時間の差が大きいことがわかる .

## 参考文献

- [1] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue, “Interface roughness scattering in GaAs/AlAs quantum-wells,” *Appl. Phys. Lett.*, **51**, 1934 (1987).
- [2] P.K. Basu, “Effect of interface roughness on excitonic linewidth in a quantum well: Golden-rule and self-consistent-Born-approximation calculations,” *Phys. Rev. B*, **44**, 8798 (1991).

## 謝辞

本研究は、大阪大学大学院工学研究科電気電子情報通信工学専攻 森 伸也教授の御指導の下で行われたものであり、本研究を遂行するにあたり、終始変わらず懇切丁寧に御教示、御鞭撻を賜りましたことに深く感謝致します。

本論文を執筆するにあたり、多大な御助言、御指導を賜りました大阪大学大学院工学研究科電気電子情報通信工学専攻 廣瀬 哲也教授、大岩 顕教授に心より感謝致します。

本研究を進めるにあたり、日頃から貴重な御意見と御教示を賜りました松岡 俊匡准教授、田中一助教に深く御礼致します。

本論文に関して貴重な御教示を頂きました大阪大学大学院工学研究科電気電子情報通信工学専攻 小島 一信教授、森 勇介教授、片山 光浩教授、丸山 美帆子教授、尾崎 雅則教授、片山 竜二教授、近藤 正彦教授、八木 哲也名誉教授、山崎順教授、斗内 政吉教授、故 河仲 準二教授、山本 和久特任教授（レーザー科学研究所）、余語 覚文教授に深く感謝致します。

研究を進めるにあたり、多くの御助言を頂きました量子情報エレクトロニクスコースの方々に心から御礼申し上げます。また、研究生活の様々な面で数多くの御助言と御協力を賜りました先輩方、そして研究室の同期の皆様に感謝の意を表します。学会参加や研究に関連する手続きなど種々の事務的な面で御手伝い頂いた田村 智沙秘書に心より感謝致します。

本研究の開始当初から懇切なる御指導、御助言を頂き、研究生活の上でも大変お世話になりました橋本 風渡氏に心から感謝致します。

同じ研究室で研究を共にした Seyed Ali Mojtahedzadeh 氏、LIM Jin Hyong 氏、永溝 幸周氏には、研究生活の様々な面で大変お世話になり、深く感謝致します

最後に、研究生活を通じて生活面や精神面で多大な御支援をいただきました家族に深く感謝致します。



# 研究業績

## 学術論文

1. J. Okada, F. Hashimoto, N. Mori, “Reduction of order of device Hamiltonian with adaptive moment estimation,” Japanese Journal of Applied Physics, **60**, SBBH08, 2021.
2. J. Okada, F. Hashimoto, N. Mori, “Equivalent model for band-to-band tunneling simulation of direct-gap III-V semiconductor nanowires,” Japanese Journal of Applied Physics, **60**, 091002, 2021.
3. J. Okada, N. Mori, and G. Mil’nikov, “Accuracy of equivalent model in band-to-band tunneling simulation of semiconductor nanowires,” Japanese Journal of Applied Physics, **62**, SC1063, 2023.
4. J. Okada, H. Tanaka, and N. Mori, “Numerical calculation method for the mean free path of single-mode semiconductor nanosheets with surface roughness,” Applied Physics Express, **16**, 091003, 2023.

## 国際会議

1. J. Okada, F. Hashimoto, N. Mori, “Reduction of order of device hamiltonian with adaptive moment estimation,” 2020 International Conference on Solid State Devices and Materials, Virtual Conference, September 27-30, 2020.
2. J. Okada, F. Hashimoto, N. Mori, “Equivalent model for tunneling simulation of direct-gap semiconductor nanowires,” 2020 International Workshop on Computational Nanotechnology, Virtual Conference, May 26-June 6, 2021.
3. J. Okada, N. Mori, and G. Mil’nikov, “Accuracy of equivalent model in band-to-band tunneling simulation of semiconductor nanowires,” 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials, Chiba, Japan, September 26-29, 2022.
4. J. Okada, J. Hattori, K. Fukuda, T. Ikegami, and N. Mori, “Modeling of band-to-band tunneling in ultra-thin GaSb and InAs gate-all-around nanowire tunnel FETs,” Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems 2022, Hawaii, USA, December 4-9, 2022.

5. J. Okada and N. Mori, "Statistical study of the effect of interface roughness on electron mobility in Si nanosheets," The 22nd International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, Münster, Germany, August 14-18, 2023.
6. N. Mori, G. Mil'nikov, H. Tanaka, J. Okada, J. Iwata, and A. Oshiyama, "[Invited] Semiconductor device simulation from first principles," The 24th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure, Shanghai, China, October 30 - November 1, 2023.
7. N. Mori, J. Okada, H. Tanaka, G. Mil'nikov, J. Iwata, and A. Oshiyama, "[Invited] Modeling and simulation of quantum transport properties of semiconductor nanosheets," 2024 IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference, Salt Lake City, USA, October 21-24, 2024.

## 国内会議

1. 岡田 丈, 橋本 風渡, 森 伸也, “ニューラルネットワークを用いた強結合近似ハミルトニアンの圧縮”, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会, 上智大学, 東京都, 2020 年 3 月 12 日 .
2. 岡田 丈, 橋本 風渡, 森 伸也, “適応モーメント推定を利用した量子輸送シミュレーションの高速化”, 応用物理学会秋季学術講演会, オンライン会議, 2020 年 9 月 11 日 .
3. 岡田 丈, 橋本 風渡, 森 伸也, “直接遷移型半導体におけるバンド間トンネルシミュレーションの高速化”, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン会議, 2021 年 3 月 16 日 .
4. 入田 一輝, 岡田 丈, 橋本 風渡, 田中 一, 森 伸也, “強束縛近似法による  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の電子状態の解析”, 応用物理学会秋季学術講演会, オンライン会議, 2021 年 9 月 12 日 .
5. 岡田 丈, 森 伸也, “等価モデルに基づく半導体ナノワイヤバンド間トンネルシミュレーション”, 第 69 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン会議, 2022 年 3 月 22 日 .
6. 森 伸也, 岡田 丈, 美里劫 夏南, “[招待講演] 量子輸送デバイスシミュレーションにおける等価モデルの進展”, 第 236 回シリコンテクノロジー分科会研究集会, オンライン会議, 2022 年 7 月 22 日 .
7. 岡田 丈, 美里劫 夏南, 森 伸也, “ナノワイヤトランジスタのバンド間トンネルにおける等価モデル”, 「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会, オンライン会議, 2023 年 3 月 7 日 .
8. 岡田 丈, 森 伸也, “半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱の数値解析”, 応用物理学会秋季学術講演会, 熊本市民会館, 熊本県, 2023 年 9 月 21 日 .
9. 岡田 丈, 田中 一, 森 伸也, “[招待講演] 半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱の量子論に基づく数値解析”, シリコンテクノロジー分科会 第 246 回研究集会, 機械振興会館, 東京都, 2023 年 11 月 9 日 .
10. 岡田 丈, 森 伸也, “矩形断面半導体ナノシートにおける電子移動度の数値解析”, 応用物

理学会春季学術講演会，東京都市大学，東京都，2024年3月24日。

11. 岡田 丈，田中 一，森 伸也，“[招待講演] 半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱で決まる平均自由行程の量子論に基づく数値解析手法”，電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス研究会，北海道大学，北海道，2024年8月5日。
12. 岡田 丈，田中 一，森 伸也，“半導体ナノシートにおける電子移動度の結晶方位依存性のモンテカルロシミュレーション”，応用物理学会秋季学術講演会，朱鷺メッセ，新潟県，2024年9月20日。

## 受賞

1. 2023年11月，電子情報通信学会 SDM 研究会若手優秀発表賞，“半導体ナノシートにおける表面ラフネス散乱の量子論に基づく数値解析”
2. 2024年9月，応用物理学会講演奨励賞，“半導体ナノシートにおける電子移動度の結晶方位依存性のモンテカルロシミュレーション”