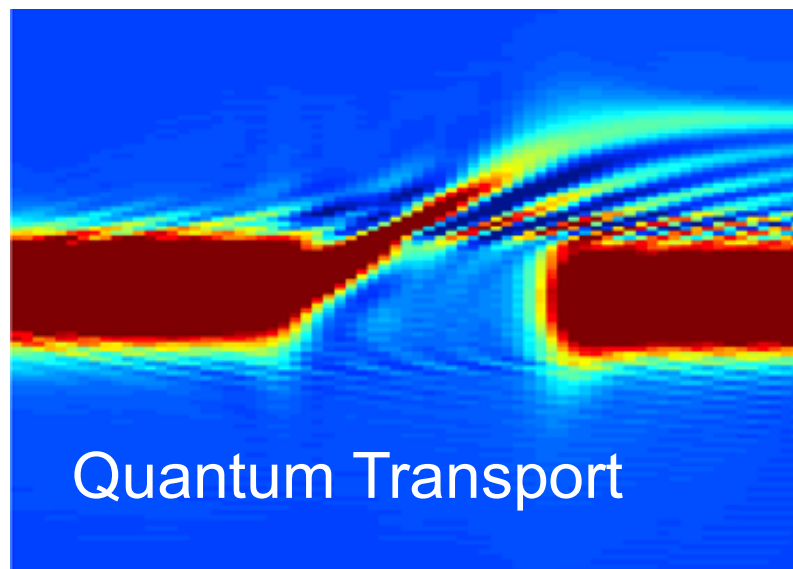


『ウィグナー・ボルツマン電子輸送論』

土屋 英昭 著



神戸大学大学院工学研究科

電気電子工学専攻

まえがき

現代のエレクトロニクスは量子論が支えているとよく言われる。タブレット型PCやスマホなど、近年のエレクトロニクス製品の心臓部である半導体部品の動作原理のほとんどが、量子論の上に成り立っているからである。量子論が対象とするミクロの物質は、私たちの常識では理解することができない奇妙な性質を持っている。その奇妙な性質をまとめたものが量子論である。ミクロの世界の大きさは、およそ物質を構成している原子数個分程度の大きさ、あるいはそれよりもさらに小さな領域である。一方、逆に、それより大きな世界は「マクロの世界」と呼ばれ、そこでは私たちが持つ常識的な物質観が通用する。

量子論はミクロの物質が持つ驚くべき性質をいくつも明らかにしたが、その中でもっとも重要なものは「電子などミクロの物質は粒子でもあるが波でもある」という相反する二重性を持っていることである。電子は小さな「粒子」であると思っている人が多いのではないだろうか？量子論が提唱される以前の物理学でも、電子は小さな粒子だと考えられていた。しかし量子論は、電子を粒子でもあるが波でもあることを明らかにしたのである。実際にそう考えることによって、従来の物理学では説明することができなかったことが理解できるようになった。

このように近年のエレクトロニクス製品の開発には、量子論が不可欠になってきた。これまでも量子論に立脚したデバイス設計技術の必要性が叫ばれ、従来のドリフト・拡散電流モデルに密度勾配表現に基づく量子補正項を取り入れた「量子流体モデル」や電子を完全な波とし、かつ散乱を無視したバリスティック波として取り扱う「非平衡グリーン関数法」の研究が大きく進展し、一部は、実際の設計ツールの中に取り入れられ始めている。そのような状況の中で、エレクトロニクス開発環境をさらに高度化させるための新しいデバイス設計技術の研究が盛り上がりを見せている。そこでは「散乱を含む非平衡電子輸送」の問題を位相空間の舞台上で表現することで、電子の動きをより直感的に理解することを可能とし、従来のマクロデバイスの限界を打破することを目指している。また、将来の革新的デバイスの開発環境には「量子ダイナミクス」をコンピュータ上で解析・視覚化できる能力が不可欠な要素となってくる。本書は、これらの能力を兼ね備え、独特の量子輸送理論を展開する「ウィグナー関数理論」に注目し、その基礎から応用までを系統的に書き上げた初めての専門書である。欧米日の研究者が「ウィグナー関数理論」に関する国際コンソーシアムを立ち上げ、原子レベルでの理論の構築からデバイスレベルの応用研究までを共同で行う試みが進められている。

本書で、いきなりウィグナー関数理論を講述し始めたとなると、新たな概念が次々と登場するために、本書の理論に壁を感じて挫折してしまうことが懸念される。そこで、ウィグナー計算法の入門書としての性質も付加することとし、そのために必要な量子論と粒子統計分布の基礎知識を第1章と第2章で復習している。本書の第4章で取り上げる『ウィグナー・モンテカルロ法』は、粒子モデルに電子の波動性を取り入れる、いわゆる「粒子・波動二重性」に真正面から取り組む手法であるので、第1章では粒子・波動二重性に力点を置いて、その歴史的な着想から数式を用いた表現方法まで、偉大な物理学者たちの思考過程に触れながら復習を行なっている。「二重性」という考え方が如何に革新的なものであるかを身を以て感じてもらいながら、本書を通じて、実際のデバイス設計論に取り入れる際の発想法について何かを学び取っていただければ幸甚である。また、ウィグナー関数理論の第一の特徴は、位相空間上で電子の運動を表現することであるので、非平衡統計分布の理解と役割について修得しておくことも重要と考えた。非平衡分布関数については、本書の第3章の主要テーマに取り上げているが、著者の個人的見解としては、熱平衡状態の電子の分布関数、いわゆるフェルミ・ディラック分布関数と非平衡分布関数の関連を明確に論述した専門書・テキストは皆無に近いと思われる。第2章では熱平衡状態に限定して、フェルミオンとボゾンの統計分布関数の性質を復習し直し、第3章で取り上げるボルツマン輸送方程式から得られる電子の非平衡分布関数の理解につながる基礎物理を再確認していただくことで、極微細デバイスへの応用に向けた準備を進めていきたい。

第1章と第2章での復習の後には、まず古典論に基づく従来のデバイス・シミュレーション技術を学ぶ目的で、これまでの研究で確立されてきたボルツマン電子輸送論の解説を第3章で行なっている。上記で述べた非平衡電子輸送の特徴に加えて、電子の加速や散乱現象、さらには材料の現実的かつ効率的なバンド構造の解析モデル化を解説し、

極微細デバイスにおける非平衡分布関数の形成例までを紹介している。そして最後の第4章では、ウィグナー関数理論の基礎をじっくりと説明した後、実際のデバイスへ応用するための技術論、たとえば方程式の離散化や位相空間内での擬粒子の注入方法、そして計算フローチャートの修正・追加点などを詳しく解説している。応用例については、十分でないと感じられる場合は参考文献を検索し補っていただきたい。本章では、新しい分野への挑戦を含む内容となっているために、記述内容が不明瞭になっている所も多々あると思われるが、今後の発展への期待に代えてお許し頂ければ幸甚である。

2017年7月 吉日

土屋 英昭

[†]www.iue.tuwien.ac.at/wigner-wiki/

目 次

まえがき

第1章 量子論と電子輸送

- 1.1 光(波動)の粒子性
 - ・プランクのエネルギー量子仮説
 - ・アインシュタインの光量子仮説
- 1.2 電子(粒子)の波動性
 - ・ラザフォードの原子模型
 - ・ボーアの原子模型
 - ・ド・ブロイの関係式
- 1.3 シュレディンガー方程式
 - ・変数分離法
- 1.4 確率解釈
 - ・確率密度
 - ・確率流密度
- 1.5 エーレンフェストの定理
- 1.6 不確定性原理

第2章 ミクロ粒子の統計分布

- 2.1 粒子の統計性
 - ・多粒子系の波動関数
 - ・パウリの排他原理
- 2.2 熱平衡状態の粒子統計
- 2.3 フェルミ・ディラック分布
 - ・ボルツマン近似
- 2.4 波数空間での表現
 - ・電子密度の計算
 - ・電流密度の計算
- 2.5 ボーズ・アインシュタイン分布(プランク分布)

第3章 ボルツマン電子輸送論

- 3.1 古典粒子の運動方程式
 - ・位相空間内の電子の運動
- 3.2 ボルツマン輸送方程式
 - ・ドリフト・拡散電流モデル
 - ・電子移動度
- 3.3 デバイス・シミュレーションへの応用
 - ・MOSFET のアンサンブル・モンテカルロ法

- 3.4 散乱過程
 - ・弾性散乱過程と非弾性散乱過程
 - ・散乱機構の選択方法
- 3.5 バンド構造
 - ・フルバンド構造
 - ・伝導帯最下端付近の異方性と多谷構造
 - ・解析バンドモデル
- 3.6 微細化シリコン MOSFET 内の非平衡分布関数の計算例

第4章 ウィグナー電子輸送論

- 4.1 ウィグナー関数理論
 - ・位置表示の密度行列
 - ・ウィグナー関数の定義
 - ・ウィグナー輸送方程式
- 4.2 ウィグナー輸送方程式の基本的性質
 - ・量子発展項 Qf_w の微分表現
 - ・古典的極限 ($\hbar \rightarrow 0$)
 - ・ウィグナー関数のモーメント(0 次, 1 次)
- 4.3 非局所ポテンシャル項の数値離散化法
 - ・実空間の離散化
 - ・波数空間の離散化
 - ・非局所ポテンシャル項の離散化
- 4.4 ウィグナー・モンテカルロ(WMC)法
 - ・新しい粒子変数 affinity
 - ・擬粒子の注入
 - ・物理量の計算
 - ・WMC 法のフローチャート
 - ・共鳴トンネルダイオードへの応用
- 4.5 シリコンナノワイヤ MOSFET の WMC シミュレーション
 - ・ゲートオールアラウンド型シリコンナノワイヤ MOSFET
 - ・3 次元マルチサブバンド WMC 法
 - ・ソース・ドレイン直接トンネリングへの表面ラフネス散乱の影響

付録 A 有限差分法による離散化

参考文献

1 章 量子論と電子輸送

量子論を一言で言うと「**ミクロの世界**における物質観」となる。ミクロの世界の物質は、私たちが普段目にしている物質とは全く異なる奇妙で常識外れの性質を持っている。第 1 章では、光と電子を対象にして量子論が築き上げられていった歴史を辿りながら、量子論とはどのようなものかを見て行くことにする。特に本書の第 4 章で取り上げる『ウィグナー・モンテカルロ法』は、粒子モデルに電子の波動性を取り入れるという「**粒子・波動二重性**」に真正面から取り組む手法であるため、この第 1 章では粒子・波動二重性に力点を置いて、その歴史的着想から数式を用いた表現方法まで、偉大な物理学者たちの思考過程に触れながら復習していきたい。

1.1 光(波動)の粒子性

量子論の「**量子**」なるものが誕生したのは、光の正体を明らかにする研究から生まれた。「量子」は quantum という英語の訳語で、「小さな固まり・単位」という意味を表す。ときは 1900 年、つまり、19 世紀最後の年であった。当時の社会的背景並びに大國ドイツの製鉄業が抱えていた物理学上の問題点については、文献[1]に詳細にまとめられているので、それらについては文献[1]にゆずる。ここでは**黒体放射**の研究からプランクが提案した「**エネルギー量子仮説**」と、**アインシュタイン**が**光電効果**の現象を説明するために提案した「**光量子仮説**」について復習し、**光の粒子性**について考えていくことにする。

19 世紀の初めに、ヤングが**光の干渉**という現象を発見し、さらに、マクスウェルによる**電磁波の予言**とヘルツによるその存在が証明されたこと等を通して、19 世紀半ばには、光は電磁波の一種であり、まぎれもなく波であるとする説が定着していた。つまり、「光は波である」という考え方が、当時の物理学の常識とされていた。一方、製鉄業からは、良質な鉄を作るために、溶鉱炉内の鉄の温度と光の関係を今よりも正確に、そして理論的に知りたいという要請が出されてきて、多くの物理学者がこの問題に取り組んでいた。その一人がプランクであった。

プランクのエネルギー量子仮説

さて、黒い物体から放たれる光のスペクトル、すなわち黒体放射のスペクトルを様々な実験で調べていくと、その特徴が明らかになってきたので、物理学者たちはその曲線を数式で表してスペクトルと温度の関係に法則を見出そうと試みた。ところがこれがなかなかうまくいかなかった。なぜならば、光の正体を「波」だと思っていた当時の物理学の法則を適用すると、黒体放射のスペクトル分布は実験結果と似ても似つかぬものになってしまうのである(この辺りの話についても文献[1]に詳しく述べられている)。そこでプランクは、物質を熱した時の温度と、その物質が放つ光の色の関係を探る研究を進める中で、光のエネルギーは「とびとび」の値をとるという仮説(エネルギー量子仮説)を立てた。プランクはまず、黒体放射のスペクトルの実験曲線を正確に示す方程式を導き出す事に成功した。この方程式は現在「**プランクの公式**」と呼ばれており、そしてこのプランクの公式で表すことができるこのスペクトル分布は「**プランク分布**」と名付けられている。

続いてプランクは、黒体放射のスペクトルは何故こうした分布線になるのか、そして自分の導き出した公式がどうして成り立つのかと考えるうちに、革新的な発想にたどりついたのである。それは、光のエネルギーは一個、二個と数えられる小さな固まり、いわば「粒」のようなものではないか、というものである。その考えをさらに進めて、プランクは光のエネルギーについて、次のような一つの仮説を提案した。

「ある振動数の光(電磁波)が持つエネルギーの値は、振動数にある定数(のちに**プランク定数**と名付けられた)をかけたものを最小単位として、必ずその整数倍になっている」

これをエネルギー量子仮説と呼ぶ。これを数式で表すと、

$$E = nh\nu \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.1)$$

と、非常に簡潔な形になる。つまり、振動数が ν である光のエネルギーを測定すると、その値は $h\nu$ 、 $2h\nu$ 、 $3h\nu$ ……

という「とびとび」の値のどれかになっているのである。ということは光がエネルギーを受け取ったり放出したりする際には、 $h\nu$ を一つの単位としていわば $h\nu$ をひと固まりの「粒」として受け渡しをすると考えられるのである。

このようにプランクは、光のエネルギーを「 $h\nu$ を単位とする固まりとして考える」という仮説を示した。このひと固まりの単位量が、すなわち量子である。このプランクのエネルギー量子仮説に基づく振動数が ν である光のエネルギーは、必ず $h\nu$ 、 $2h\nu$ 、 $3h\nu$ という整数倍の値になる。整数倍以外の中途半端なエネルギー、例えば $0.5h\nu$ や $1.2h\nu$ というエネルギーを光は持つことはできないのである。これは従来の物理学にはない革新的な考え方であった。なぜならそれまでの物理学ではすべての物理量は連続的に変化するものと考えていて、自然現象の中のある物理量が不連続な変化をする、つまり「とびとび」の値を取ることは有りえないとされていたからである。

なぜ従来の物理学では、物理量を連続的に変化するものだと考えていたのかというと、それは単位量の定数であるプランク定数 h が非常に小さな値であるために、物理量の不連続性に気がつかなかったからである。プランク定数は $6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ という値である。ここで問題は「 10^{-34} 」という桁の値で、これは1兆分の1の、その1兆分の1のさらに100億分の一という非常に小さな値である。一方、**可視光の振動数**は 10^{15} Hz 程度の桁であり、この値自体は相当地に大きな値であるが、この両者を掛け算して得られる光のエネルギー単位量 $h\nu$ は、「 10^{-20} J 」程度のごくわずかな値になる。すなわち、光のエネルギーは不連続に変化するものの、その「とびとび」具合は、 10^{-20} J ほどの微々たるものであることが分かる。したがってそれまでのどんな科学者も、その段差に気がつかなかったのである。しかし、ミクロの世界の物理現象を考える時には、この段差、すなわち物理量の不連続性が無視できないものとして影響を及ぼしてくることになる。

アインシュタインの光量子仮説

このようにプランクは、エネルギー量子仮説によって、光がエネルギーをある固まりで受け渡しするという考え方を示した。しかしプランクは、光そのものが小さな粒状の物質でできているとまでは考えなかった。これに対して、プランクの考えを取り入れつつ、さらに突っ込んで「光はエネルギーを持った粒の集まりだと考えられる」というアイデアを提案したのが、当時はまだ無名だったアインシュタインであった。アインシュタインはこのアイデアを用いて、当時やはり謎とされていた光電効果という現象を見事に説明したのである。光電効果とは、紫外線や青い光などの波長の短い電磁波を金属の表面に当てると、金属表面から電子が飛び出してくるという現象である。1888年に発見されたこの現象は、20世紀の初めまでに実験で詳しく調べられてきていたが、光を波だと考え、得られた実験結果をまったく説明できないことが、当時の物理学者達を悩ませていた。当時の光電効果の不可解さについても文献[1]を参考にしていきたい。

さて1905年にアインシュタインは、プランクのエネルギー量子仮説にアイデアを借りて、次のような「光量子仮説」という理論を発表した。

「振動数が ν である光は $h\nu$ のエネルギーを持った粒の集まりのようなものである」

そしてこの仮定に基づく、光電効果の不思議な実験結果がきちんと説明できることを示したのである。アインシュタインはその粒のことを**光量子**と呼んだ。

まず、紫外線や青い光などの波長の短い電磁波は振動数が大きい電磁波であるから、この電磁波はエネルギー $h\nu$ の値が大きくなる。この大きなエネルギーを持った粒＝光量子を金属表面にぶつけると、金属と電子の結合が断ち切られて電子が飛び出してくると解釈することができる。振動数 ν が大きいほど光量子のエネルギー $h\nu$ が大きいので、電子は勢いよく飛び出してくる。逆にある一定の振動数以下になると、金属と電子の結合を断ち切るだけのエネルギーを光量子が持てないために、電子が飛び出さなくなる。次に、電磁波の振幅が大きくなった場合はどうであろうか。電磁波の振幅が大きくなると電磁波の強度が増すことになる。これをアインシュタインは、光量子の数が増えることだと考えた。当てる電磁波の振幅が大きくなっても、光量子一つのエネルギーは変わらないが、金属に当たる光量子の個数が増えるので、それだけ金属から飛び出す電子の個数も増えることになる。

このようにアインシュタインは、それまで波であると考えられてきた光を、光量子（現在では**光子**、あるいは**フォトン**と呼ぶ）という粒の集まりだと考え直すことで、光電効果のしくみを解き明かすことに成功したのである。では光の正体は結局のところ粒子であって、波ではなかったのであろうか？残念ながら、そのように決めつけてしまうことはできない。なぜならば、たとえば、光の干渉現象は光を波と考えない限り説明できないのである。

以上のことから光は、粒子でもあり波でもあるという不思議な**二重性**を示すことが分かってきたのである。この二重性とは、たとえば粒子が波打って動いたり、粒子の集まりが全体として波のようにうねるといったことではないことに注意していただきたい。つまり光は、従来の古典物理学ではまったく別のものとして扱ってきた「粒子としての性質」と「波としての性質」を合わせ持つ存在であるということである。また、プランクが提案した式(1.1)は、波を特徴づける振動数 ν と粒子のエネルギー E が、本質的に、プランク定数 h だけで関係づけられることを表しており、**光の二重性**を数式で表現する基礎的かつ重要な関係式となっている。

1.2 電子(粒子)の波動性

次に、**電子の二重性**について述べていこう。

読者の皆さんは、電子は小さな「粒子」だとイメージしているのではないであろうか？量子論以前の物理学者でも、電子は小さな粒子だと思われていた。しかし量子論では、この後説明するように、電子を波であるとするのである。正確には、電子などミクロの物質は粒子でもあるが波でもあるという、相反する二重性を持っているのである。

現代の私たちは、あらゆる物質は原子という小さな粒が集まって構成されていることを知っている。原子は英語でアトム(atom)と言う。これは古代ギリシアの哲学者デモクリトスが、物質を構成する究極の微粒子を想定して、これに「分割できないもの」という意味の名前(atomos)を付けたことに由来している。近代科学において原子の概念が導入されたのは、19 世紀の初めであった。イギリスの科学者ドルトンが、純粋な物質(元素)の数と同じだけの種類の小さな粒子、すなわち原子が存在するだろうという**原子説**を唱えたのである。原子の大きさは原子の種類によって異なるが、およそ1ミリメートルの1000 万分の一ほどである。こんな小さなものを直接見ることができる顕微鏡は、19 世紀にはもちろん存在していなかった。しかしこの原子説は、物質の化学反応のようすや化学法則の意味を見事に説明できたために、近代科学の基礎理論として定着した。

では、原子は本当に分割できないのであろうか？実は、19 世紀の終わりに電子が発見され、この電子が原子に含まれていることが分かったのである。具体的には、電子の発見は、1897 年にトムソンによってなされた。さらにミリカンによって、**電子の質量**は水素原子の約2000 分の一であることが測定された。またローレンツらが、原子の中に電気を帯びた粒子が存在することを予言し、その粒子が陰極につないだ金属板から出てくる陰極線を構成する電子と同じものであることを示した。つまり原子は「分割できないもの」ではなく、電子などのさらに小さな要素に分けられることが分かってきたのである。

ラザフォードの原子模型

原子の中に電子が含まれていることが分かると、では電子は原子のどこにあるのだろうか、つまり原子の内部構造はどうなっているのかという点に、科学者の関心が集まってきた。原子はマイナスの電気を帯びた電子を持っているが、原子全体としては電気を帯びていない。そこで原子の中にはプラスの電気を帯びた部分もあり、プラスとマイナスの電気が互いに打ち消しあっていることが予想された。1911 年にラザフォードは、プラスの電気を帯びた部分が原子の中心部分に集中していて、その周囲を電子が回っているという、いわゆる「**ラザフォードの原子模型**」を提唱した。そのイメージを図1.1に示す。これは太陽の周囲を惑星が回っているようすに似ているとすることができる。

当時の顕微鏡技術ではもちろん見ることはできなかったため、ラザフォードは当時発見されたばかりの**アルファ線**という放射線を金属の薄い膜に当てるという実験を行うことで、原子の中心部にはプラスの電気を持つ重い粒子が存在するのだという結論にたどり着いた¹⁾。ラザフォードが考えたこの重い粒子とは、その後の研究により、プラスの電気を持つ**陽子**と、電氣的に中性である**中性子**とがいくつか集まって固く結合した**原子核**であることが明らかになった。

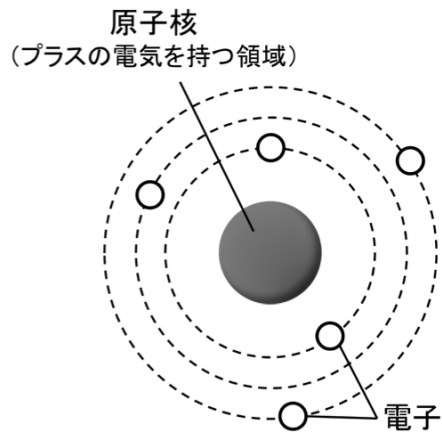


図 1.1 ラザフォードの原子模型.

ラザフォードの実験により、プラスの電気を帯びた原子核の周囲を、マイナスの電気を帯びた複数の電子が回転しているという原子の構造が明らかになったことから、この問題は解決したと思われたが、残念ながらラザフォードの原子模型には重大な欠点があることが指摘された。当時の物理学に基づく、電気を帯びた粒子が回転運動を行えば、その粒子は光(電磁波)を放ってエネルギーを失うはずだからである。したがって、このラザフォードの原子模型では、マイナスの電気を持つ電子は原子核のまわりを周回しながら電磁波を出してエネルギーを失い、図 1.2 に描くように、あっという間にプラスの電気を持つ原子核とくっついてしまうのである。文献[1]によると、電子はわずか 1000 億分の一秒でエネルギーを失って原子核とくっつくことになる。ということは、実際の原子はほんの一瞬の間しかラザフォードの原子模型のような状態を維持することができないことになり、原子などのミクロの物質はあっという間につぶれてしまうことになる。この難問と思われる課題を解決し原子の真の姿に迫るための画期的なアイデアを提唱したのが、ニールス・ボーアであった。

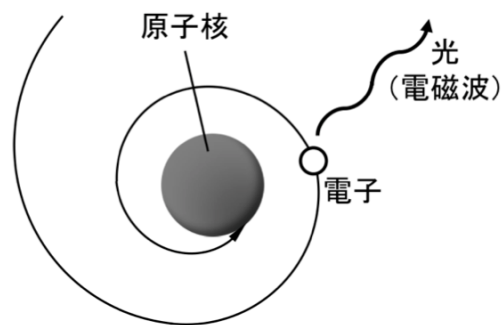


図 1.2 古典物理学に基づいたマイナス電荷を持つ電子の周回運動イメージ.

ボーアの原子模型

ボーアはラザフォードの研究室での議論を通して、上記の問題を解決するための自分なりの着想を得ていたようではあったが、まだ完全なものではなかった。その時、友人から水素原子の「**バルマー系列**」の話を聞かされ、早速それを調べたボーアは「バルマー系列を見ると、たちまち私にはいっさいが明らかになった」と語ったそうである。バルマー系列とは、水素原子のスペクトルに現れる四つの線スペクトルのことで、ラザフォードの原子模型では説明できないものであった。バルマー系列の詳細は文献[1]を見ていただくことにして、ここでは、上記の点を指摘することに留めておく。ボーアはバルマー系列の規則性からヒントを得て、1913 年に、「**量子条件**」と「**振動数条件**」という、古典物理学の常識から外れる 2 つの大胆な仮定をもとにした原子の構造モデル、いわゆる「**ボーアの原子模型**」を発表したのである。ボーアが立てた 2 つの条件を言葉と数式で説明すると次のようになる。

[量子条件] 原子核の周囲を回る電子の軌道はどんなものでも良いわけではなく、決められた円軌道上だけを運動している。そしてその円軌道の半径 r は、次式の条件に合うとびとびの値のものだけに限定される。

$$2\pi r \times mv = nh \quad (1.2)$$

ここで、 r : 電気の軌道半径、 m : 電子の質量、 v : 電子の速度、 n : 整数(1, 2, 3, ...)、 h : プランク定数を表す。この式が意味するのは、「軌道 1 周の長さに電子の運動量を掛けたものは、プランク定数 h の整数倍のものに限定される」ということである。そして、この軌道上を回っているときには、電子は電磁波を出さないものとする。

[振動数条件] 電子が 1 つの軌道から別の軌道に移るとき、電子は電磁波を放出したり吸収したりする。その電磁波の振動数 ν は、電子がそれぞれの軌道にいたときのエネルギーの差を、プランク定数 h で割ったものになり、次式で与えられる。

$$\nu = \frac{E_a - E_b}{h} \quad (1.3)$$

ここで、 E_a : 電子が $n = a$ の軌道にいたときのエネルギー、 E_b : 電子が $n = b$ の軌道にいたときのエネルギー、 h : プランク定数を表す。

ボーアの量子条件では、電子の軌道半径は、プランク定数 h を含んだ最小単位(量子)の整数倍に比例した値、すなわちとびとびの値だけに限定されるとするのである。これは、1.2 節でプランクが導入した量子の概念とプランク定数 h が、原子の構造を考える際にも用いられることになったことを意味している。このような仮定に基づいたボーアの原子模型を、最も簡単な構造の原子である水素原子に適用すると、図 1.3 のようになる。また、量子条件の最後の所で述べたように、電子は決められた半径の軌道上を回っているときには電磁波を放たないと考えて、このときの電子の状態を「定常状態」と名付けた。しかしボーアは、定常状態の電子は電磁波を出さない理由は説明していない。つまり、回転運動をする電子は電磁波を放つという古典物理学の法則を無視したのである。このためボーアの仮定は乱暴な理論に思えるが、原子の構造を解き明かす際には、従来の物理学にとらわれてはいけないという直感を持っていて、そしてその直感を実際に正しかったのである。未開拓の分野、あるいは未知の分野に挑戦する研究者にとっては、良い教訓となるであろう。

それぞれの軌道上を回っているときの電子のエネルギーの値は、次のようにして求めることができる。すなわち、電子が円運動をしているときには電子に働く遠心力と、電子が原子核から受ける電氣的な引力が、ちょうど釣り合うという式が成り立つ。その式に先ほどの量子条件の式(1.2)を当てはめると、電子の軌道半径とともに、その電子のエネルギーの値を求めることができる。量子力学の教科書には必ず議論されている内容であるので、読者には演習問題として自ら上記の問題を解いてもらいたい。

さて、電子は一番内側の軌道「 $n = 1$ 」を回っているときに最低のエネルギー状態になる。これより小さなエネルギー

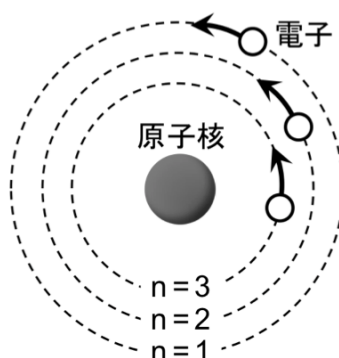


図 1.3 ボーアの原子模型(水素原子の場合)。

状態になることはできず、 $n = 1$ より小さな半径の軌道を回ることもできない。ちなみに、 $n = 1$ のときの軌道半径は約一億分の 0.53 センチメートルになり、この半径を**ボーア半径**と呼んでいる。このように、ボーアは量子条件という仮定を設けることで、電子の取り得るエネルギーには最低ラインがあり、決してそれ以下にはなれないことを示したのである。すなわち、ラザフォードの原子模型で重大な欠陥とされていた「電子が原子核に吸い込まれる」という問題を、この量子条件を課すことで解決した。

一方、量子条件をもとにして計算した電子の軌道エネルギー E_a 及び E_b を式(1.3)の振動数条件の式に適用すると、バルマー系列の各振動数(振動数は波長の逆数)と見事に一致することが示された。式(1.3)では、電子が放つ電磁波の振動数は、アインシュタインの光量子仮説に基づいて、電磁波のエネルギーがその振動数 ν にプランク定数 h をかけたもの、すなわち $h\nu$ で与えられるという提案に立脚している。

このようにボーアは、光に関する難問を解く際にプランクとアインシュタインが提案した量子仮説を、原子の構造を明らかにする際に再登場させ、見事にラザフォードの原子模型の欠陥を解決するとともに、バルマー系列の線スペクトルの測定結果を説明することに成功したのである。この時点では厳密には、ボーアの理論はまだ未完成なものであったが、原子の中に「量子」の概念を初めて持ち込み、後進の若い物理学者たちが水素原子以外の原子についてもあてはまる原子モデルを確立し量子論を完成させる上で、ボーアの理論はまさに画期的な進歩をもたらした大きな業績と位置付けられている。

ド・ブロイの関係式

前述したボーアの仮定に何か根拠を与えることはできないのであろうか？ すなわち、これらの仮定が持つ意味を考えることで、従来の物理学にとって代わる、原子や電子などのミクロの世界を支配する新たな物理法則やルールを探ることができるかもしれないのである。しかしながら、この「根拠探し」は難航した。その突破口が開かれたのは、ボーアの原子模型が発表されてから、10 年以上の時間を要した。そしてそれは、粒子とみなされてきた電子を「波」であるとする革新的な発想であった。

1924 年、フランスの物理学者ド・ブロイは「電子を波として考える」という画期的なアイデアを発表した。粒子であるはずの電子を波として考える—という発想は、1.1 節で説明した「それまで波だと思っていた光を粒子として考える」ことの、ちょうど逆の関係になっている。つまり、ド・ブロイはアインシュタインの光量子仮説に注目して、それまで波として考えてきた光に粒子としての性質が見い出せるならば、今まで粒子とみなしてきた電子に、波としての性質を見い出せるのではないかという逆転の発想を行ったのである。そしてド・ブロイは、次の運動量と波長の関係式を原子内の電子に適用した。

「運動量が p である電子は、波長が λ である波とみなすことができる。このとき波長 λ は、プランク定数 h を運動量 p で割った値になる、すなわち

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.4)$$

で与えられる。」

また電子に限らず、すべての物質はこの式で求められる波長を持つ波であると考えて、この波を**物質波**と名づけた。式(1.4)を**ド・ブロイの関係式**と呼び、式(1.4)で定義された λ は**ド・ブロイ波長**と呼ばれている。

電子や物質の波は、次節で説明するように「複素数の波」になるため、**音波**や電磁波等の実数の波とは異なり、どのような姿をしており、物理的になにを表しているかは依然としてはっきりとした説明は得られていないが、ここではこの問題を脇に置いて、電子を通常の波と想定して、原子核の周囲を回転している場合を考えることにする。

このとき、ボーアの原子模型で出された量子条件の図 1.3 のように、電子の波は原子核の周囲を円形にぐるぐる回っていると予想される。このとき、一周してきた波の山の部分が最初の山とぴったり重ならないと、**波の干渉**によって波の振幅が減少し、何周かするうちに、波は完全に消えてしまう。つまり、原子核の周囲を回る電子の波がいつまでも消

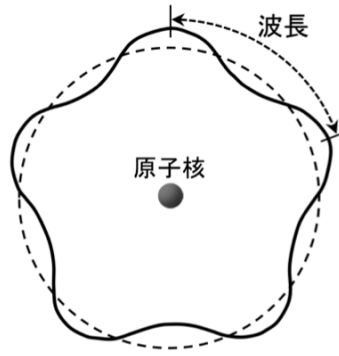


図 1.4 原子核の周囲を回る電子波のイメージ。

えずに存在するためには、図 1.4 に示すように、一周して戻ってきた波の山が、最初の山と完全に一致することが条件になる。そしてこの条件を満たすとき、電子の波の「一周の長さ」は、必ず波の波長を整数倍したものになっている。

このことを数式を使って考えてみる。一周の長さは $2\pi r$ で、これが波長 λ の整数倍、つまり $n\lambda$ (n : 整数) になることが条件なので、

$$2\pi r = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.5)$$

が成り立つ。これに、ド・ブロイの関係式(1.4)を代入すると、

$$2\pi r \times p = 2\pi r \times mv = nh \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.6)$$

となり、ボーアの量子条件(1.2)を導くことができる。このようにド・ブロイは電子を波と考えて、その波長を定義することで、電子の軌道にボーアの量子条件がつく根拠を説明することに成功したのである。

式(1.1)と(1.4)は、粒子のエネルギー E と運動量 p を、波の振動数 ν と波長 λ に関係付ける、いわば二重性を表現する重要な式であり、それらをつなぐ役割を果たすのがプランク定数 h であることを私たちに伝えている。量子論はミクロな物質が持つ驚くべき性質をいくつも明らかにしたが、その中でもっとも重要なものは、このミクロな物質は『波』の性質を持つ、というものであることを改めて強調しておく。

1.3 シュレディンガー方程式

電子を波として考えるというド・ブロイの発想は非常に大胆なものであった。そしてその物質波の概念を知り強い興味を抱いたのが、オーストリアの物理学者シュレディンガーであった。シュレディンガーは 1926 年に、物質波の伝わり方を計算する方程式を発表し、これを解けば、物質がどのような形の波を持ち、その波が時間の経過とともにどのように伝わっていくのかを計算することができることを示した。これを**シュレディンガー方程式**と呼んでいる。シュレディンガーは実際にこの方程式を用いて、水素原子中の電子のエネルギーを求めて、それらがボーアの量子条件のとおり、「とびとび」になっていることを示した。シュレディンガーの理論は**波動力学**と呼ばれ、ミクロの世界の運動を記述する量子力学の基本的な理論になっていった。

シュレディンガーが行った元々の導出方法は、**解析力学**というテクニックを駆使して**ニュートン力学**をまとめ直したものであるが、抽象的な概念が多数登場するため、素人にはなかなか難解なものとなっている²⁾。本節では、シュレディンガーが行なったオリジナルの方法ではなく、式(1.1)と(1.4)の関係式を頼りにしてシュレディンガー方程式を求める簡便な方法を紹介する。説明を簡単にするために、 x 方向に進む 1 次元のド・ブロイ波を考えることにする。

まず、角周波数が ω で波数が k のド・ブロイ波 $\varphi(x, t)$ を、指数関数を用いて次式で表す。

$$\varphi(x, t) = e^{-i(\omega t - kx)} \quad (1.7)$$

波動の式として高校物理で習う**三角関数**($\cos$ あるいは $\sin$)を用いる代わりに指数関数を用いるのは、微分しても形が変わらないので計算が楽だという利点のためである^{2,3)}。ただし、詳細は省くが、オイラーの公式を用いると、実数部分だけを見ていれば、三角関数で表して計算したときと同じ結果が得られることを示すことができる。

さて、式(1.7)の波の式と、次式の物質のエネルギーの式とを組み合わせることを考える。

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1.8)$$

ここで、 $V(x)$ は位置エネルギーを表す。そのためには、式(1.7)の中から k だけ、あるいは ω だけを取り出すことを行いたい。**偏微分**を用いれば、次のようにそれができる。偏微分というのは、 $\varphi(x, t)$ のように変数が二つ以上含まれる関数を、そのうちのどれか一つの変数だけで微分することである。他の変数は定数のように見なして計算すれば良い。まずは式(1.7)の $\varphi(x, t)$ を位置 x で偏微分してみよう。すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= i k e^{-i(\omega t - kx)} \\ &= i k \varphi \end{aligned} \quad (1.9)$$

と書ける。ここで式(1.4)の関係式は、波数 $k (= 2\pi/\lambda)$ を用いて

$$p = h/\lambda = (h/2\pi)k = \hbar k \quad (1.10)$$

と書き直すことができる。ただし、 $\hbar = h/2\pi$ と定義し、これを**ディラック定数**と呼ぶ。式(1.9)に式(1.10)の関係を用いると、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \varphi \quad (1.11)$$

より

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.12)$$

と置き換えられることが分かる。したがって、 φ に p^2 を作用させた場合には

$$p^2 \varphi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \quad (1.13)$$

となる。

同じことを ω についても行うため、 $\varphi(x, t)$ を時間 t で偏微分して計算すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= -i \omega e^{-i(\omega t - kx)} \\ &= -i \omega \varphi \end{aligned} \quad (1.14)$$

となる。ここで、式(1.1)の関係の中で、ひと固まりのエネルギー単位量 $h\nu$ を角周波数 ω を用いて $E = h\nu = \hbar\omega$ と表す。そしてこの関係を式(1.14)に適用すると、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \varphi \quad (1.15)$$

より

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.16)$$

と置き換えられることが分かる。

以上のことを古典力学の関係式(1.8)に当てはめてみよう。式(1.8)の両辺に φ を掛けると

$$E\varphi = \frac{p^2}{2m} \varphi + V(x)\varphi \quad (1.17)$$

となるので、これに上で求めた二つの関係式(1.12)と(1.16)を代入してやると、次の 1 次元のシュレディンガー方程式を求めることができる。

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x)\varphi \quad (1.18)$$

これを 3 次元の波に拡張すると、次の 3 次元シュレディンガー方程式を得ることができる。

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + V(\mathbf{r})\varphi \quad (1.19)$$

上式中の記号 ∇^2 はラプラシアンと呼ばれ、直交座標系では次式で定義される。

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.20)$$

式(1.18)および(1.19)を時間に依存するシュレディンガー方程式と呼んでいる。また、式(1.19)の右辺をハミルトニアン記号 H を使って

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

と表すと、時間に依存するシュレディンガー方程式は簡潔に

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi \quad (1.22)$$

と記すことができる。

変数分離法

式(1.19)や(1.21)の $V(\mathbf{r})$ の部分には具体的な位置エネルギーの形を代入して解く必要があるが、この説明ではまだそれを指定する必要はない。ただし、位置エネルギーの形は時間が経過しても変化しないことにしておく。位置エネルギーが時間とともに変化する場合は、シュレディンガー方程式を解くことが急激に難しくなる。したがって、ここでは $V(\mathbf{r})$ は時間には依存しないと仮定することにする。

それではまず、波動関数 $\varphi(\mathbf{r}, t)$ が位置 $\mathbf{r}$ に依存する部分と時間 t に依存する部分の積で、 $\varphi(\mathbf{r}, t) = R(\mathbf{r})T(t)$ と表せられるとする。これを式(1.19)に代入し、そしてさらにその両辺を $R(\mathbf{r})T(t)$ で割ると

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R(\mathbf{r})} \nabla^2 R(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

となり、興味深いことに、左辺には $\mathbf{r}$ が含まれず t のみに関する式になっており、右辺には t が含まれず $\mathbf{r}$ のみに関する式になっている。それらが等号で結ばれていることより、両辺とも $\mathbf{r}$ にも t にも依存しないある値に等しいはずである。その定数を E と表すと、

$$i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} = E T(t) \quad (1.24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 R(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})R(\mathbf{r}) = E R(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

という二つの式に分離することができる。これで変数分離は完了である。

さて、ここで導入した定数 E の物理的な意味は何であろうか。これが位置エネルギー $V(\mathbf{r})$ と同じ次元の量であることは式(1.25)を見ればすぐに分かるが、 E が表す正しい意味を把握するために一番目の式(1.24)を解いてみよう。式(1.24)は簡単に解くことができ、

$$T(t) = A e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (1.26)$$

と表すことができる。ここで A は定数である。この解は見ての通り振動解であり、ド・ブロイ波のエネルギーと角振動数の関係式 $E = \hbar\omega$ を使うと、次のような簡潔な式に書き直すことができる。

$$T(t) = A e^{-i \omega t} \quad (1.27)$$

すなわち、上で導入した定数 E は系のエネルギーを表すと解釈できることが示された。

次に二番目の式(1.25)を考えてみよう。これは時間に依存しないシュレディンガー方程式と呼ばれている。式の中に時間的な要素が一切含まれていないからである。式(1.25)は大変重要な式である。式(1.25)は、位置エネルギー

$V(\mathbf{r})$ に具体的な形を与えて、そのときの固有値 $E_1, E_2, \dots$ と固有関数 $R_1(\mathbf{r}), R_2(\mathbf{r}), \dots$ を求める固有値方程式となっている。量子力学の教えによると、時間に依存しないシュレディンガー方程式の固有値 E_n は、系のエネルギー期待値を表すことが示される³⁾。このことから上で導入した定数 E は、系のエネルギーを表すとの解釈は正しいことが保証される。

固体電子論では通常、この時間に依存しないシュレディンガー方程式を解いて、材料のバンド構造から電気特性までを議論する。その際、 $R(\mathbf{r})$ は「時間に依存しないシュレディンガー方程式」の解のことを言っているのもであって、このままではもとの「時間を含む」方程式の解にはなっていない。「時間を含む」方程式の解にするためには、 $R(\mathbf{r})$ と時間に依存する部分である $T(t)$ を繋げてやる必要がある。したがって、「時間を含む」方程式の正式な解は次のようになる。

$$\begin{aligned}\varphi_n(\mathbf{r}, t) &= R(\mathbf{r})T(t) \\ &= R_n(\mathbf{r}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}\end{aligned}\quad (1.28)$$

上式のような解は複数あり、多ければ無限に存在する。式(1.28)で $\varphi(\mathbf{r}, t)$ ではなく $\varphi_n(\mathbf{r}, t)$ としてあるのは解は一つきりではないというニュアンスを伝えるためである。式(1.28)はもう少し簡潔な形として

$$\varphi_n(\mathbf{r}, t) = R_n(\mathbf{r}) e^{-i \omega_n t} \quad (1.29)$$

と書くこともある。このようなシュレディンガー方程式の固有関数解を、通常われわれは**波動関数**と呼んでいる。

1.4 確率解釈

シュレディンガー方程式(1.19)および(1.22)の左辺を見ると虚数 i を含むために、式(1.28)や(1.29)の波動関数は「**複素数の波**」になっている。音波や電磁波などの古典物理学の波動方程式は実数だけでできていて複素数は現れない。したがって、音波や電磁波は実数の波になり、われわれがその姿をイメージしやすい波になる。これに対して複素数の波である波動関数、すなわち物質波は、どのように解釈すればよいのであろうか？虚数部分は一体何を表すのであろうか？不思議なことに、シュレディンガー方程式を解いて求められた波動関数の絶対値の2乗が粒子の存在確率を表すと考えると計算結果が事実と合うのである。したがって現在では、

「波動関数の絶対値を2乗したもの $|\varphi(\mathbf{r}, t)|^2$ が**粒子の存在確率**を表す」

とする解釈(**ボルン解釈**)が広く受け入れられている³⁾。

確率密度

$\varphi^*(\mathbf{r}, t)$ を $\varphi(\mathbf{r}, t)$ の複素共役とすると $|\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 = \varphi^*(\mathbf{r}, t)\varphi(\mathbf{r}, t)$ となり、これを**確率密度**と呼ぶ。今後は変数 $(\mathbf{r}, t)$ は必要でない限り省略することにする。このとき、位置 $\mathbf{r}$ 付近のごく狭い範囲 $d\mathbf{r}$ に粒子が見出される確率は

$$\varphi^* \varphi d\mathbf{r} \quad (1.30)$$

と表せば良い。そして、それを全空間で積分すると1になる。すなわち

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \varphi d\mathbf{r} = 1 \quad (1.31)$$

上式の左辺は3重積分することを表している。もし上式の積分値が1にならない場合には、波動関数に定数を掛けて調整しておく必要がある。この操作を**波動関数の規格化**と呼ぶ。なお、式(1.31)は、波動関数の絶対値の2乗が積分可能でなければならないことを意味しており、これはまた、「波動関数は無限遠でゼロにならない条件」を課している。

確率流密度

次に、確率密度の時間変化を考えてみよう。 $\rho = \varphi^* \varphi$ と表すことにする。このとき、3次元シュレディンガー方程式

(1.19)を使って、 $\partial\varphi/\partial t$ および $\partial\varphi^*/\partial t$ の項を変形してやると

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\varphi + \varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}(\varphi^*\nabla^2\varphi - \varphi\nabla^2\varphi^*) \\ &= -\frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot\{\varphi^*\nabla\varphi - (\nabla\varphi^*)\varphi\}\end{aligned}\quad (1.32)$$

となる。空間座標のみに依存する普通の形の位置エネルギーを考える限りは、 V を含む項は打ち消しあって消えてしまう。 ∇ は**ナブラ**と呼ばれ、直交座標系では次式で定義される演算子である。

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \quad (1.33)$$

式(1.32)の中括弧{ }の中はベクトルを表しているの、これと係数 $\hbar/2mi$ を一緒にして

$$\mathbf{S} \equiv \frac{\hbar}{2mi}\{\varphi^*\nabla\varphi - (\nabla\varphi^*)\varphi\} \quad (1.34)$$

と定義する。このとき式(1.32)は次のように簡単になる。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\nabla\cdot\mathbf{S} \quad (1.35)$$

上式は電磁気学に出てくる電荷の保存則と全く同じ形をしている。電磁気学では ρ は電荷密度を表していたが、ここでは

$$\rho = \varphi^*\varphi = |\varphi|^2$$

であり、これは確率密度と呼んでいる。したがって $\mathbf{S}$ は「電流密度」にならって**確率流密度**と呼ぶのが慣例となっている²⁾。

式(1.34)は波動関数およびその位置微分の積で表されており、そのままでは確率流密度の物理的イメージは描きにくい。そこで単純な例で $\mathbf{S}$ がどのような表現になるか試してみよう。次のような1次元の平面波、つまり自由電子を考えてみよう^{2,3)}。

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} \quad (1.36)$$

ここで A は定数である。このときの確率流密度は x 成分だけを考えれば良いので

$$\begin{aligned}S_x &= \frac{\hbar}{2mi}\left\{\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\right)\varphi\right\} \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left\{(A^*e^{-ikx})\frac{\partial}{\partial x}(Ae^{ikx}) - \frac{\partial}{\partial x}(A^*e^{-ikx})(Ae^{ikx})\right\} \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left\{(A^*e^{-ikx})(ik)(Ae^{ikx}) - (-ik)(A^*e^{-ikx})(Ae^{ikx})\right\} \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(ikA^*A + ikA^*A) \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(2ik|A|^2) \\ &= |A|^2\frac{\hbar k}{m} = |A|^2v\end{aligned}\quad (1.37)$$

となる。最後の式は、確率密度と速度の積で表されており、これに素電荷 e を掛けると、1 個の電子によって流れる電流密度を表すことが分かる。このように、確率流密度は、**バリスティック輸送下**(弾道輸送下あるいは**コヒーレント輸送下**とも言う)での電流密度と関連づけることができる。文献[3]では、式(1.34)を出発点として、**ツ・エサキの電流式**、**ランダウ・ビュティカーの式**、**バリスティック MOSFET の名取モデル**など、ナノ構造で重要となる**バリスティック電流式**を導き出せることが証明されている。

1.5 エーレンフェストの定理

前節で述べたように、量子力学では確率を用いる。そして確率には**期待値**が付き物である。シュレディンガー方程式から求められる期待値には、重要かつ興味深い関係が成り立っているので紹介する。それは「平均的に見れば、粒子の位置と運動量はニュートンの運動方程式に従う」というものである。その導出は少々面倒であるので、途中の導出過程については文献[2]および[3]等の他書をご覧くださいことにして、ここでは、粒子の**位置の期待値** $\langle x \rangle$ と**運動量の期待値** $\langle p \rangle$ の間に、古典力学の基礎であるニュートンの運動方程式と同じ関係が成り立つことを解説する。

まずは、 $\langle x \rangle$ の時間変化 $d\langle x \rangle/dt$ 、すなわち速度の期待値 $\langle v \rangle$ を考える。シュレディンガー方程式(1.19)を用いると

$$\begin{aligned}\langle v \rangle &= \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{d}{dt} \int \varphi^* x \varphi d\mathbf{r} = \int \left(\frac{d\varphi^*}{dt} x \varphi + \varphi^* x \frac{d\varphi}{dt} \right) d\mathbf{r} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int [\varphi^* \nabla^2(x\varphi) - (\nabla^2 \varphi^*) x \varphi] d\mathbf{r} + \frac{1}{m} \int \varphi^* \left(\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{r} \quad (1.38)\end{aligned}$$

を得る。上式の右辺第1項に**グリーンの定理**を適用し、さらに波動関数 φ が無限遠の閉曲面でゼロにならないといけないこと(1.4 確率解釈)を適用すると、結局、右辺第1項はゼロとなり、

$$\langle v \rangle = \frac{1}{m} \int \varphi^* \left(\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{r} \quad (1.39)$$

という結論を得る。したがって、運動量の期待値はこれに質量 m を掛けて

$$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \int \varphi^* \left(\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{r} \quad (1.40)$$

となる。1.3 節の式(1.12)で示したように、波動関数 φ が指数関数の形をしているときには、

$$p = \hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

と表せられるのであった。したがって、式(1.40)より、 $p = (\hbar/i) (\partial/\partial x)$ は「運動量を意味する演算子」としての役割を持つことが分かる。

式(1.40)をさらにもう一度、時間で微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d\langle p \rangle}{dt} &= m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \frac{d}{dt} \int \varphi^* \left(\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) d\mathbf{r} = \hbar \int \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t \partial x} \right) d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \left[(\nabla^2 \varphi^*) \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \varphi^* \nabla^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] d\mathbf{r} + \int \varphi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \varphi d\mathbf{r} \quad (1.41)\end{aligned}$$

となる。先程と同様に、式(1.41)の右辺第1項はグリーンの定理と無限遠の閉曲面で波動関数がゼロになることを使うとゼロになるので、結局、次式を得る。

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \int \varphi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \varphi d\mathbf{r} = \int \varphi^* F(x) \varphi d\mathbf{r} = \langle F \rangle \quad (1.42)$$

上式においては、古典力学では位置エネルギー $V(x)$ と力 $F(x)$ の間に

$$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (1.43)$$

という関係が成り立っていることを用いた。その結果得られたのが**力の期待値** $\langle F \rangle$ である。

以上をまとめると、次の二つの式が得られたことになる。

$$\begin{aligned}m \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \langle p \rangle \\ \frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \langle F \rangle\end{aligned}$$

これらはニュートンの運動方程式と同じ関係である。つまり、期待値の間には古典力学と同じ関係が成り立つことが分かる。これを**エーレンフェストの定理**と呼んでいる。この定理により、マクロな世界ではニュートンの運動方程式が成り立つ理由を、より深く理解することができる。

1.6 不確定性原理

本書を手にする読者であれば、「**不確定性原理**」という言葉を経々な場所て聞いたことがあるに違いない。要は、ミクロな領域では粒子の位置と運動量は同時に正確には決められず、次式のような関係が成り立っているというものである。

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.44)$$

ここで、 Δx が位置の測定誤差を、 Δp が運動量の測定誤差を表している。上式の解説はそこら中に溢れているので、ここではその詳細を繰り返す述べることはしないが、一方の測定誤差を極めて小さくすれば他方の測定誤差が極めて大きく増すことになり、どれほど頑張っても両者の測定誤差の積を一定値以下には下げることができない、というのがこの原理の主旨である。そしてそこには何故かプランク定数が関係している。式(1.44)と同じ不確定性の関係は、時間とエネルギーの間にも成立する。一方、 x と p_y の間には不確定性は存在しない。一般に、二つの演算子が**非可換**である場合 (例えば $[x, p_x] = xp_x - p_x x = i\hbar \neq 0$, 等) には、それら二つの物理量は同時に確定値をもつことはできない、すなわち不確定性原理が成立する。

本書の後半(3 章および 4 章)では、位置と運動量空間で定義される**位相空間**中の粒子の運動を議論するが、量子力学的粒子の場合、位相空間での座標の決定が上記の不確定性原理と矛盾しない形で論議が進められていく。

2 章 ミクロ粒子の統計分布

量子力学の知識だけでは、トランジスタやレーザーなど半導体部品の動作原理を理解するのはもちろんのこと、それらを設計するためのスキルを身に付けることは不可能である。トランジスタやレーザーに代表されるデバイスは、無数のミクロ粒子（通常は電子と正孔）の動きを制御し、様々な機能を実現させている。1個1個の粒子の状態は量子力学にしたがって決定されるが、それらが多数集まって発揮するマクロな機能を操るには、粒子の集団としての性質を記述する統計力学の力を借りる必要がある。本章では、量子力学的粒子にはボゾンとフェルミオンの2種類が存在することを示した後、熱平衡状態において、それらが従う統計分布関数について解説を行う。

2.1 粒子の統計性

ここまででは1個の粒子についてだけ考えてきた。それでは、粒子が2個以上、すなわち多数の粒子がある場合にはどうなるであろうか？同種類の粒子が多数ある場合、たとえば電子だけが多数ある場合や光子だけが多数ある場合には、量子力学特有の原理が顔を出すようになるので、そのことについて簡潔に説明しておこう。また、本書では取り扱わないが、粒子の大きさが目に見えるほどの大きさを持つ古典粒子の場合、各粒子を区別することは可能と考えて粒子の統計分布を求めていく。一方、本書で対象とする量子力学的粒子の場合は、その大きさはきわめて小さいため、人間がそのような粒子を区別することは不可能と考えるのが自然であり、本書でも同じ種類の量子力学的粒子は区別できないと考えて議論を展開する。このように、古典統計と量子統計の本質的な違いは、同種類の粒子が識別可能かどうかという点につきるのである^{1,3)}。

それでは N 個の同種類の（量子力学的）粒子があるとする。それら全ての粒子の状態を表す“全”波動関数 ψ は

$$\psi = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (2.1)$$

のように多数の変数で表すことができる。上式でどれでも良いので二つの粒子の座標値を入れ替えたときに、式(2.1)の全波動関数にどのような変化が起こり得るのか考えてみよう。同種類の粒子を考えていることから、二つの粒子を区別することはできない。したがって、この入れ替えによって、系のハミルトニアンとエネルギー固有値は全く変化することはない。ではどこに変化が現れるのであろうか？

それを考えるために、入れ替えた1組の粒子を、さらにもう一度入れ替えて元の粒子の状態に戻してやる。このとき当然のことながら、全波動関数も初めと同じ状態に戻る。このように、同じ操作を2度行くと元に戻るという変化は2種類考えられる。すなわち、1度の変換によって全波動関数にマイナスが付くか、あるいは、何も変化しない（プラスが付く）かのいずれかになる。たとえば、粒子1と2を入れ替えた場合の符号の違いを明記すると、

$$\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = -\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) ; \text{フェルミオン} \quad (2.2)$$

$$\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) ; \text{ボゾン} \quad (2.3)$$

となる。原子や電子などのミクロ粒子の場合は、このどちらとも起こり得ると言われており、我々の世界では、粒子を入れ替えたときに全波動関数の符号が反転するタイプの粒子（式(2.2)）と、符号が変化しないタイプの粒子（式(2.3)）の二種類が存在できる。前者をフェルミオン、後者をボゾンと呼んでいる。また、ボゾンを表す全波動関数は「粒子の入れ替えに対して対称」であり、フェルミオンを表すそれは「粒子の入れ替えに対して反対称」であるとも表現される。フェルミオンであるかボゾンであるかの違いは重要な問題であり、それらを論じる際にはしばしば「統計性」という用語が用いられる。

多粒子系の波動関数

多粒子系のイメージを与えるために、同種多粒子系のシュレディンガー方程式を次のように表してみる。

$$\left\{ \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{x}_i) \right] \right\} \psi = E\psi \quad (2.4)$$

上式を原子核の周りを回る電子に例えると、各々の電子は原子核のポテンシャル $V(\mathbf{x})$ の影響下にはあるが、電子間に

は簡単のためポテンシャルは働かないとしているようなものである。この方程式の解、すなわち全波動関数はどのようなものになるであろうか？原子核の周りにはいくつもの状態が存在できる。ここで、状態 n にある 1 粒子の波動関数を $\varphi_n(\mathbf{x})$ とすると、 N 個の粒子全体の波動関数は

$$\psi = \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_1) \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_2) \cdots \varphi_{n_i}(\mathbf{x}_i) \cdots \varphi_{n_j}(\mathbf{x}_j) \cdots \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_N) \quad (2.5)$$

のように 1 粒子の波動関数の積で表すことができる。この式が意味するのは、1 番目の粒子 $\mathbf{x}_1$ が状態 n_1 にあり、2 番目の粒子 $\mathbf{x}_2$ が状態 n_2 にあり、 $\cdots$ 、 i 番目の粒子 $\mathbf{x}_i$ が状態 n_i にあり、 $\cdots$ 、 j 番目の粒子 $\mathbf{x}_j$ が状態 n_j にあり、 $\cdots$ ということである。複数の粒子が同じ状態に入っている場合も含まれている。式(2.5)と同じ状況を表す解はこれ以外にいくつでもある。量子力学的粒子の場合、何番目の粒子という区別はできないので、たとえば、 i 番目と j 番目を入れ替えて、 i 番目の粒子が状態 n_j にあり、 j 番目の粒子が状態 n_i にいるかのように表現した次の式も同じ意味になる。

$$\psi = \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_1) \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_2) \cdots \varphi_{n_i}(\mathbf{x}_j) \cdots \varphi_{n_j}(\mathbf{x}_i) \cdots \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_N) \quad (2.6)$$

あらゆる入れ替えを考えると、 $N!$ 通りの式が同じ状態を表していることになる。そのようにして得られた多数の解を使って、全波動関数に「粒子の入れ替えに対して対称、あるいは反対称」の性質を備える便利な表現があることが知られている。

まず、反対称性を有する(フェルミオンの)全波動関数の表現としては、次式が唯一の表現になっている。

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_1) & \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_1) & \cdots & \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_1) \\ \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_2) & \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_2) & \cdots & \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_N) & \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_N) & \cdots & \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix} \quad (2.7)$$

上式を**スレーターの行列式**と呼んでいる。行列式というのは展開すると、プラスが付いたりマイナスが付いたりする項が全部で $N!$ 通り出現するわけであるが、そこで現れる項の一つ一つが、上で考えた $N!$ 通りの波動関数と同じものになっている。したがって、それらの線形結合に相当するこの行列式も式(2.4)の解の資格があるのである。 $1/\sqrt{N!}$ は全波動関数の規格化のために付いている。スレーター行列式の二つの行を入れ替えることは二つの粒子を入れ替えることに対応するが、行列式の性質によれば、二つの行を入れ替えると全体の符号が変わるのである。すなわち式(2.7)は、フェルミオンの要請とピッタリ一致している。

次に、対称性を有する(ボゾンの)全波動関数はどうであろうか。粒子の入れ替えに対して全波動関数の符号が変化しないことを保証するには、スレーター行列式を展開したときに現れるマイナス符号の項を全てプラスに置き換えたものを用いれば良い。それは次のように表される。

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_1) & \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_1) & \cdots & \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_1) \\ \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_2) & \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_2) & \cdots & \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{n_1}(\mathbf{x}_N) & \varphi_{n_2}(\mathbf{x}_N) & \cdots & \varphi_{n_N}(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

行列式が英語で**デターミナント**と呼ばれるのに対して、上式は**パーマネント**と呼ぶ²⁾。波動関数を式(2.7)や式(2.8)のように表すことで、次に述べる**パウリの排他原理**が自動的に計算に取り入れられることができ便利である。

パウリの排他原理

ところで行列式には、二つ以上の行または列が同じだと全体がゼロになるという性質がある。これは同一の状態を取る粒子が 2 個以上存在している状態を言っており、1 組でもそのようなものがあると、全体の波動関数 ψ はゼロになってしまうということである。つまり、式(2.7)で表されるフェルミオンは同じ状態に 2 個以上の粒子は存在できないことを

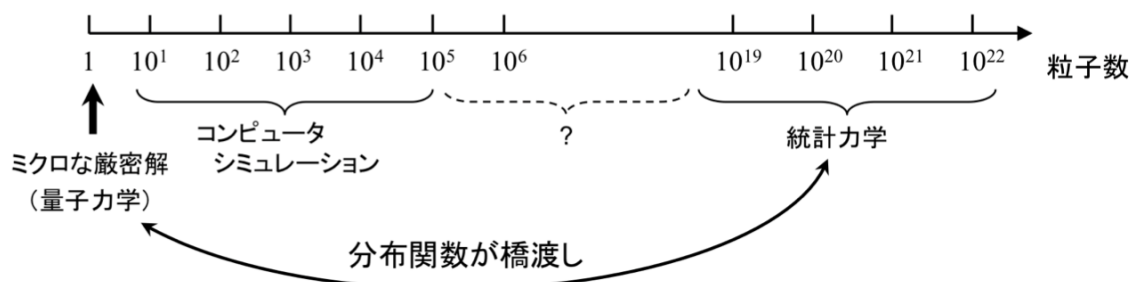


図 2.1 統計力学の役割^{3, 4)}.

表している。これをパウリの排他原理と呼んでいる。このようにフェルミオンは、全ての粒子が異なる状態を取らなくてはならないのである。本書では粒子の**スピン**については触れないので話が唐突になり申し訳ないが、**上向きのスピン状態**(↑)と**下向きのスピン状態**(↓)は異なる状態と見なされる。すなわち、同一のエネルギー状態でも、スピンが異なる状態が 2 つ存在する場合には、そのエネルギー状態には 2 個の粒子(↑↓)が存在できることになるのである。これを「**スピン縮重度**が 2 である」と表現し、固体の電子密度や電流密度の計算において考慮しないといけない重要な性質である(この点については 2.4 節で再登場するので注意していただきたい)。

一方、ボゾンの場合はフェルミオンとは異なり、同じ状態にいくつの粒子が入っても全波動関数はゼロにはならない。場合によっては、相当数の粒子が一つの状態にまとめられることもあり得る。このように、パウリの排他原理はフェルミオンのみに働く。上述してきた粒子の統計性の差異はスピンと深い関係があり、粒子のスピンが $\hbar/2$ の奇数倍であるときにはフェルミオンになり、偶数倍のときにはボゾンになることが知られている。

上記では粒子の数を N 個とし、多粒子系の性質を抽象的に説明してきたが、全波動関数の表現やパウリの排他原理等をより具体的に議論したい場合には、粒子の数を思い切って 2 個にまで減らし、上記と同様の議論を行うと良い。興味がある読者は、参考文献[3]の第 1 章を参考にしていただきたい。

2.2 熱平衡状態の粒子統計

ここから、マクロな大きさを有する物質中の粒子を対象にしていく。例えば、体積が 1cm^{-3} の気体中にどのくらいの数の気体分子が含まれているかという、**アボガドロの法則**を用いて計算すると、約 2.7×10^{19} 個になる³⁾。また金属でも同様の計算をしてみると、非常に大雑把な見積もりではあるが、銅の電子密度は約 $1.6 \times 10^{22} \text{cm}^{-3} \approx 10^{22} \text{cm}^{-3}$ と求められる。このように無数に多くの粒子から構成される実際の物質の性質を調べるのに、1 個 1 個の粒子の運動を追跡して、それらの寄与をすべて足し合わせて特性を出すという方法は現実的ではないし、通常は不可能である。そこで、1 個(あるいは数個)の粒子の運動を量子力学に基づいて厳密に解析し、その結果に粒子の**統計分布関数**を掛けて平均化した特性を評価する方法が取られる。すなわち統計分布関数は、図 2.1 に示すように、ミクロな厳密解とマクロな平均的物理量の間を橋渡しする役目を担っている^{3, 4)}。そして、フェルミオンとボゾンでそれぞれ異なる分布関数が用意されており、実際の計算に用いられる。話が少しそれるが、最近の**スーパーコンピュータ**に代表されるようにコンピュータの数値計算能力の急速な進展によって、**コンピュータ・シミュレーション**というテクニックを駆使すれば、粒子数が数千個～数十万個で構成される物質の特性を、量子力学だけを用いて解析することが可能になってきている(**第一原理計算法**と呼ばれる)。しかし粒子数が数百万個あるい数千万個以上に多くなっていくと、コンピュータ・シミュレーションでも手に負えない状況に直面することになるであろう。

先ほど上で、分布関数が用意されていると述べたが、正確には、「**熱平衡状態**の粒子に対しては、比較的簡単な数式で表現することができている」というのが正しい説明になる。電圧を印加したときのような**非熱平衡状態**の粒子に対しては、分布関数を簡単な数式で表す方法は残念ながら見つけられていない。その辺の話については 3 章で詳しく述べることにして、本章の次節以降では、熱平衡状態の分布関数とその基本的性質について詳しく解説を行う。

表2.1 量子力学的粒子の分配の仕方. 例として、3つのエネルギー状態 E_1, E_2, E_3 に2個の粒子を分配する場合を示す. 粒子○は識別不可能として取り扱っている.

状 態	フェルミオン			ボゾン		
	E_1	E_2	E_3	E_1	E_2	E_3
	○	○		○	○	
		○	○		○	○
	○		○	○		○
				○○	○○	○○
分配の総数	3			6		

2.3 フェルミ・ディラック分布

物質中の粒子は全てが同じエネルギーをもっているのではなく、それぞれの粒子のエネルギーには大小がある。ある粒子の集団を見たときに、エネルギーの高いところに多数の粒子がいるとか、低いところに多数いるとかという概念を**エネルギー分布**と呼ぶ。このエネルギー分布は粒子のエネルギーの関数になっており、フェルミオンのエネルギー分布は**フェルミ・ディラック分布**、ボゾンのそれは**ボーズ・アインシュタイン分布**と呼ばれている。

統計分布は、「膨大な数の粒子をさまざまなエネルギー状態にどのように分配するかを決める法則」である。2.1 節で示した通り、量子力学的粒子にはフェルミオンとボゾンの 2 種類が存在するため、上記の文章中で述べた「分配の仕方」にも各粒子に対応して 2 通りある。フェルミ・ディラック分布、並びにボーズ・アインシュタイン分布の違いの根源は、この「粒子の分配の仕方」の違いによるものであることを理解しておいていただきたい。表 2.1 に示した単純な例でこのことを見てみよう。この表では、3 つのエネルギー状態 E_1, E_2, E_3 に、2 個の粒子を分配する場合を想定している。ここで、2 個の粒子は識別不可能として、どちらも同じ白丸で表している。このように、フェルミオンではパウリの排他原理が働くため、同じエネルギー状態に 2 個の粒子が同時に入ることができないので、分配の仕方の総数としてはボゾンのそれよりも少ない 3 通りとなることがわかる。表 2.1 では我々が勘定できるできるように 2 個の粒子の場合を例にあげて、フェルミオンとボゾンの違いを説明したが、現実の物質では 2.2 節で述べた通り、膨大な数の粒子を表 2.1 と同様の規則にしたがって分配させる必要がある。また重要な点であるが、取り扱う粒子の総数とその全エネルギーを一定にした条件下で粒子の分配を行う必要がある(この点については後の節で述べるように、光子やフォノンの場合は必ずしも全粒子数は一定であるとは限らないため注意が必要である)。したがって、実際の分布関数の導出は少々骨の折れる作業となることから、その導出過程については省略し文献[3]等を参考にしていきたい。

そのようにして得られたフェルミ・ディラック分布関数 f_{FD} は次式で与えられる。

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad (2.9)$$

ここで、 E_F は**フェルミエネルギー**、 k_B は**ボルツマン定数**、そして T は**絶対温度**を表す。式(2.9)はフェルミオンの、通常は電子のエネルギー分布関数として知られているものである。前述した通り、式(2.9)は熱平衡状態の粒子に対して導き出されたものである。熱平衡状態の定義とは、粒子を各エネルギー状態に分配する際に「最も高い確率で現れる組み合わせ」となる。順列理論の用語で言うと上記のようになるが、物理的には、電圧や電流など外部からの摂動が一切ない状況下(熱平衡状態)で「最も起こりやすい分布」が式(2.9)の関数で与えられる、ということになる。

式(2.9)のフェルミ・ディラック分布関数は特徴的な曲線を描く。図 2.2 に $T = 0\text{K}$ (絶対温度ゼロ度)と $T \neq 0\text{K}$ (有限温度)のフェルミ・ディラック分布関数のエネルギー依存性を模式的に描いている。 $T = 0\text{K}$ ではフェルミエネルギー

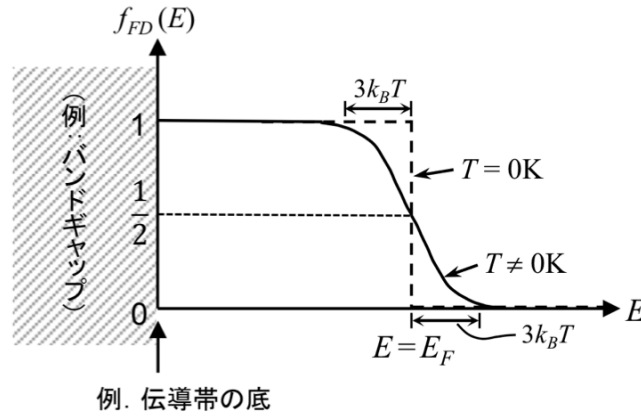


図 2.2 フェルミ・ディラック分布関数のエネルギー依存性. $T = 0\text{K}$ (破線)と $T \neq 0\text{K}$ (実線).

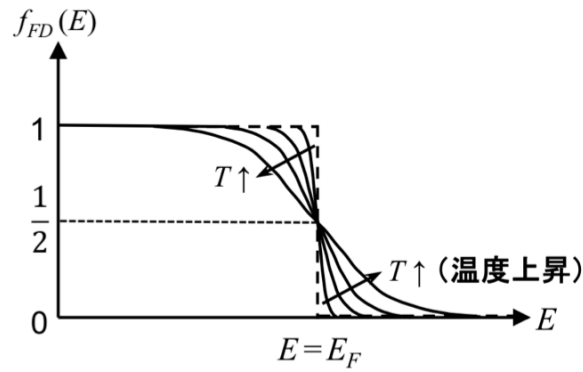


図 2.3 フェルミ・ディラック分布関数の温度依存性.

を境にして、 $E < E_F$ で $f_{FD} = 1$, $E > E_F$ で $f_{FD} = 0$ となり、図 2.2 の破線のように $E = E_F$ で階段状の分布関数となる。一方、 $T \neq 0\text{K}$ では、ほぼ $E_F - 3k_B T < E < E_F + 3k_B T$ のエネルギー範囲で分布関数の値が1から0の間を連続的に変化し、図 2.2 の実線で示すように滑らかな曲線を描く。したがって、分布関数の値が変化するエネルギー領域は温度 T に依存することになる。その様子を模式的に描くと図 2.3 のようになる。温度が高くなるにつれて、 E_F より高いエネルギーをもつ電子が増加するのに対して、 E_F より小さいエネルギーをもつ電子は減少することがわかる。ここですでに気付いているかもしれないが、「フェルミ・ディラック分布関数の値は 1 を越えることがない」ことを指摘しておきたい。これはパウリの排他原理を表しており、2.1 節で触れたように、フェルミオンの場合、同一のエネルギー状態に存在できる粒子数はスピン状態を含めて 1 個に限定されることをグラフで表現した形となっている³⁾。つまり、分布関数の値が 1 ということは、そのエネルギー状態は“常に”1 個の電子に占有されていることを表している。それに対して、たとえば分布関数の値が $1/2$ ということは ($E = E_F$ に対応)、そのエネルギー状態に電子が入っている時間と入っていない時間がちょうど等しい状態になっていることを意味しているのである。

ボルツマン近似

金属中にはおよそ $10^{21} \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ という非常に高密度の電子が存在するため、金属の特性を評価する際には、前節で紹介したフェルミ・ディラック分布を用いることが必須になっている。一方、半導体は意図的に高いドーピング状態を導入しない限り、古典的分布関数である**ボルツマン分布**を適用できる場合が多い。ボルツマン分布は、式(2.9)で説明すると、 $E - E_F > 3k_B T$ の高いエネルギーをもつ電子に対して成り立ち、このとき式(2.9)は

$$f_{FD}(E) \approx e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}} \quad (2.10)$$

と、さらに簡単化される。これを**ボルツマン近似**と呼んでいる。この近似は特に大きなバンドギャップを有する半導体で成り立つことが多く、大変重要な近似である³⁾。

2.4 波数空間での表現

前節の議論では、分布関数は粒子のエネルギーの関数として定義し、その基本的性質について説明を行った。本書の後半(3章および4章)の主題は、固体中および微細デバイス中での電子輸送論であることから、3章で詳しく説明するように、電子の分布関数は位置と波数を変数とする**位相空間** (x, k) で定義しておくのが望ましい。そこで、物質の**エネルギー分散関係**を用いて電子の波数の関数として式(2.9)を記すように変更しておく(物質内に**空間的不均一分布**が存在したり、電圧が印加されている場合には、さらに位置の関数となるように拡張する必要がある。詳しくは3章で議論する)。すなわち、フェルミ・ディラック分布関数 f_{FD} は電子の波数の関数として、次式のように書き直す。

$$\begin{aligned} f_{FD}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{e^{(E(\mathbf{k})-E_F)/k_B T} + 1} \\ &= \frac{1}{e^{(\hbar^2 k^2/2m - E_F)/k_B T} + 1} \end{aligned} \quad (2.11)$$

上式の2行目では、放物線状の分散関係を仮定して $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/2m$ とした。 $\hbar$ はディラック定数であり、 m は電子の質量を表す。本書の議論を半導体に適用する場合には、 m は材料の有効質量とする。

電子密度の計算

式(2.11)を用いると物質中の**電子密度**は次式で求めることができる。

$$\begin{aligned} n &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}}{e^{(\hbar^2 k^2/2m - E_F)/k_B T} + 1} \end{aligned} \quad (2.12)$$

一行目の V は物質の体積を表す。そして係数 $2V/(2\pi)^3$ (分子の2はスピン縮重度である)は、**波数空間の状態密度**であり、電子を波として取り扱うことで現れてくるものである。この係数が掛かってくる理由については文献[3]で詳しく説明されているのでここでは省略する。式(2.12)にボルツマン近似を適用することで、半導体の電子密度の表現を求めることができる³⁾。また $T = 0K$ では、電子密度がフェルミエネルギーの $3/2$ 乗に比例することも導き出すことができる³⁾。

電流密度の計算

物質中を流れる**電流密度**は式(2.11)を用いて次式で計算することができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{2(-e)}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} f_{FD}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \\ &= \frac{-2e}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{d\mathbf{k}}{e^{(\hbar^2 k^2/2m - E_F)/k_B T} + 1} \end{aligned} \quad (2.13)$$

ここで e は**電子の素電荷**を表し $-e < 0$ となる。上式では電子の速度 $v = \hbar \mathbf{k}/m$ は $\mathbf{k}$ の奇関数であり、フェルミ・ディラック分布関数 $f_{FD}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の偶関数であるので、上式の被積分関数は $\mathbf{k}$ の奇関数となるため、 $\mathbf{k}$ の積分値 ($\mathbf{k} = -\infty \sim \infty$) は零になる。当然のことであるが、本章では熱平衡状態を前提にしているので、物質中には電流は流れないことを上記の話は言っているに過ぎない。これに対して非熱平衡状態では、電子の分布関数 $f_{FD}(\mathbf{k})$ が外部の力、例えば電圧によって非対称に変形させられ電流が流れる³⁾。そのときの電子の分布関数を、実際のデバイスに対して求めることが本書の目的の一つである。3.6節では微細化された**シリコン MOSFET** 内の非平衡分布関数の計算例を

紹介しているので参考にしていきたい。

2.5 ボーズ・アインシュタイン分布(プランク分布)

ボゾンに属する代表的な粒子には、光子やフォノンが挙げられる。フォノンは結晶の格子振動を量子化した粒子であり、電子と相互作用することによって物質に吸収されたり、放出されたりする。それらはそれぞれフォノン吸収過程(フォノン数が1個減少する)、およびフォノン放出過程(フォノン数が1個増加する)と呼ばれ、物質中の電子の運動を擾乱させる散乱過程として重要な役割を果たしている。フォノンと同様に光子についても吸収過程と放出過程があり、これらボゾン粒子は全粒子数が一定とはならないという特徴がある^{3,5)}。その場合、フェルミ・ディラック分布で言う所のフェルミエネルギーに相当する変数は定義されなくなるため、そのエネルギー分布は次式で与えられることになる。

$$f_{\text{Planck}}(E) = \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1} \quad (2.14)$$

上式の右辺の分母の1の前の符号がー(マイナス)に変わっていることにも注意されたい。式(2.14)は全粒子数が一定でない場合のボゾンの分布関数であり、プランク分布と呼ばれる。プランク分布は1章で黒体放射のスペクトルを説明する際にも出てきている。式(2.14)をボーズ・アインシュタイン分布と称する著書が多いが、本書では全粒子数が一定ではないボゾン(すなわちフォノンと光子)に話を限定する意図もあり、あえてプランク分布と呼ぶことにする。

このプランク分布は式(2.14)を見ればわかるように、非常にシンプルな曲線を描く。図2.4に有限温度の場合のプランク分布関数のエネルギー依存性を模式的に描いている。フォノンのエネルギーがゼロに近づくと、分布関数の値は無限大に発散するためこのような形状になる。当然のことではあるが、フォノンはボゾンであるためパウリの排他原理は働かないため分布関数の値は1を超える。特に、熱平衡状態のフォノンは $E = 0$ の状態に最も多く分布することになり、温度を下げると、その傾向がさらに強まる。

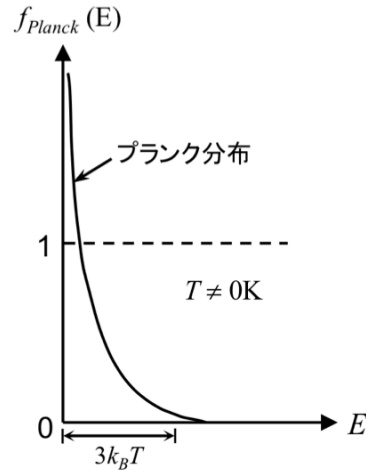


図 2.4 プランク分布関数のエネルギー依存性.

3 章 ボルツマン電子輸送論

固体の電子伝導特性を記述する**ボルツマン電子輸送論**を講述する。固体内の電子は、**電界による加速**と種々の**散乱による減速**を繰り返しながら、位相空間内を複雑に運動している。したがって、2 章で述べた熱平衡状態のように、電子の分布関数を簡単な数式で表すことはできないのである。本章では、非平衡状態の電子輸送を記述するために、位相空間で定義した分布関数に着目し、その分布関数が従う**ボルツマン輸送方程式**の定式化を行う。その応用例として、シリコン MOSFET の特性シミュレーションへ適用する際の**散乱過程**と**バンド構造**の取り扱いについて説明を行う。本章では対象を**古典粒子**に限定し、量子輸送並びに量子力学的粒子シミュレーションへの取り組みについては次の第 4 章で講述する。

3.1 古典粒子の運動方程式

1.5 節で述べたようにマクロな世界では、粒子の位置の期待値 $\langle x \rangle$ と運動量の期待値 $\langle p \rangle$ の間には、古典力学の基礎をなすニュートンの運動方程式と同じ関係が成立する。したがって、**トンネル効果**などの量子輸送効果が無視できる比較的大きなサイズのデバイスに対しては、次の**古典的運動方程式**を解くことで電子輸送を記述することができると思われる。

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad (1.40)$$

$$\frac{d \langle p \rangle}{dt} = \langle F \rangle \quad (1.42)$$

本書では位相空間を位置 x と波数 k で定義するため、上式の運動量 $\langle p \rangle$ を式(1.10)の関係を使って書き直すと

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\hbar k}{m} = v \quad (3.1)$$

$$\hbar \frac{dk}{dt} = F \quad (3.2)$$

となる。ここで F は外力であり、電子の速度 v は次式で定義した。

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (3.3)$$

また簡単化のため、これ以降は期待値の記号 $\langle \rangle$ は省略することにする。本章では、式(3.1)と(3.2)を基礎とする**古典的電子輸送論**、すなわちボルツマン電子輸送論の基礎と応用について解説を行う。

位相空間内の電子の運動

固体内の電子は、外力 $F = -eE$ (E は電界で時間とともに変化しないとする) による加速と**自由走行**後に発生する散乱による減速を繰り返しながら、位相空間内 (x, k) を複雑に運動している。ここで 1 個の電子に着目し、その運動の軌跡を求めるために、式(3.1)と(3.2)から dt 秒後の位置と波数を求める。ここで dt は十分に小さく、この期間は散乱は起こらないと仮定する。するとまず式(3.2)より、電界により電子の波数が次式のように変化する。

$$k(t + dt) = k(t) + \frac{F}{\hbar} dt \quad (3.4)$$

そして次に式(3.1)より、電子の位置は

$$\begin{aligned} x(t + dt) &= x(t) + \frac{\hbar}{m} \left[\frac{k(t) + k(t + dt)}{2} \right] dt \\ &= x(t) + \frac{\hbar}{m} \left[k(t) + \frac{F}{2\hbar} dt \right] dt \end{aligned}$$

$$= x(t) + \frac{\hbar k(t)}{m} dt + \frac{F}{2m} dt^2 \quad (3.5)$$

と変化する。すなわち、波数は dt の1次関数となり、位置は 2 次関数になることが分かる。したがって、1 個の電子に着目しその運動の軌跡を位相空間内で描くと図 3.1 のようになると想像できる。電子は負電荷 ($q = -e < 0$) をもつので、電界と逆方向に加速される ($F = -eE$)。実線は自由走行する電子の軌跡を表しており、破線は散乱が起こって電子の波数(運動量)が瞬間的に変化することを示している。この例では、電子の初期条件を $x(0) = k(0) = 0$ としている。自由走行する時間は一定ではなく散乱毎に変化するため、図 3.1 に示すように、散乱と散乱間の実線の長さ、すなわち**自由走行距離**も随時変化する。ちなみに、自由走行距離を長時間にわたり平均したものを**平均自由行程**と呼ぶ。固体内で発生する代表的な散乱過程には、**フォノン散乱**と**不純物散乱**がある。これら散乱現象の発生メカニズムや電子に与える影響等については、参考図書^{3, 5-8)}を紹介するので各自で調べ修得しておいていただきたい。後述の 3.3 節と 3.4 節で詳しく述べるが、フォノン散乱は、散乱前後で電子のエネルギーが変化する**非弾性散乱過程**と電子のエネルギーが殆ど変化しない**弾性散乱過程**に分けられる。一方、不純物散乱は弾性散乱過程に分類される。これら複数ある散乱過程の中でどの散乱過程が選ばれるかは各々の**散乱レート**の大きさに依存する。3.4 節では、**パルクシリコン**の散乱レートを用いて、実際に行われる散乱機構の選択方法について説明を行うことにしている。ところで、 $k < 0$ の状態に散乱された電子は、当初は電界による加速とは逆方向に走行するが、しばらくすると電界の加速と同方向に向きを変え時間とともに加速を続けていく。

図 3.1 は 1 個の電子の運動をイメージして描いたものであるが、固体中には無数の電子が存在し、通常それらは相関なく独立して運動していると考えて良い。したがって、電子毎に異なる軌跡を示すことになり、それらの時間平均を安定な状態(すなわち位置に依存しない定常状態)になるまで求めると、図 3.2 の実線に示すように $k = 0$ を中心

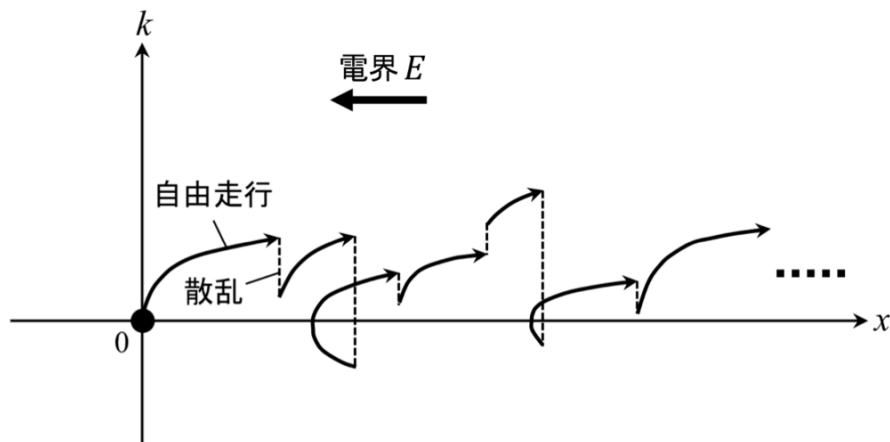


図 3.1 固体中の電子の位相空間 (x, k) 内での運動の軌跡のイメージ。電子は負電荷 ($q = -e < 0$) をもつため、電界と逆方向に走行する。実線は電界による自由走行、破線は散乱による波数(運動量)の瞬間的な変化を表している。

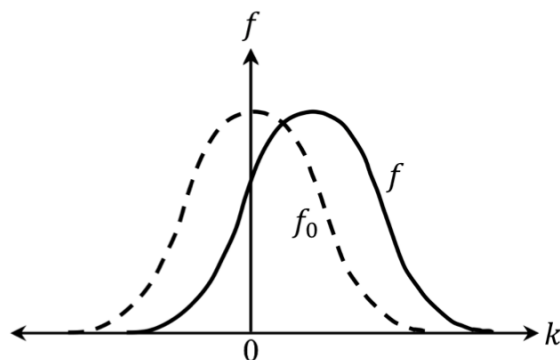


図 3.2 (実線) 電界が加えられたときの定常状態での非平衡分布関数。(破線) 熱平衡フェルミ・ディラック分布関数 f_0 。非平衡分布関数 f は $k = 0$ を中心にして非対称な形状を示す。

にして非対称な分布関数 f が得られる。図 3.2 の破線は熱平衡状態の電子の分布関数 f_0 であり、いわば式(2.11)のフェルミ・ディラック分布関数を波数空間で描いたものである。このように非平衡状態、すなわち電界などの外力が加えられた状況下では、波数空間で非対称な分布関数が形成され固体内を電流が流れるのである³⁾。

3.2 ボルツマン輸送方程式

3.1 節で述べたように、古典粒子は式(3.1)と(3.2)にしたがって位相空間内 (x, k) を運動する。デバイス内の電子分布は空間的に不均一となり、さらに一般的には時間にも依存するため、電子の分布関数は $f(k, x, t)$ と表記することにする。この分布関数 $f(k, x, t)$ が従う輸送方程式を導出する。

固体内で電子が状態を変化させる機構には 2 種類ある。1 つは電界による加速であり、もう 1 つは散乱による波数とエネルギーの瞬間的擾乱である。以下で行うことを簡単に説明すると、「時刻 t に、ある状態 (k, x) を電子が占有する確率 $f(k, x, t)$ が、微小時間 dt 内に電界と散乱によって変化する割合を求めよ」ということである。このとき、この微小時間 dt は十分に短いとし、その間の電子の速度は $v(t) = v$ で一定であると仮定する。この仮定を用いると、式(3.1)と(3.2)から dt 秒後の位置と波数は、それぞれ

$$x \rightarrow x + vdt \quad (3.6)$$

$$k \rightarrow k + \frac{F}{\hbar}dt \quad (3.7)$$

と変化することになる。したがって、1 つ目の機構である電界による分布関数の時間変化は図 3.3 のように描ける。この機構では、今注目している電子が dt 秒前の時刻 $(t - dt)$ にいた状態も、**決定論的運動方程式**(3.1)と(3.2)より確定させることができ、 $(k - F/\hbar dt, x - vdt)$ と求められる。その結果、時刻 t に状態 (k, x) に入ってくる電子の量(分布関数)は $f(k - F/\hbar dt, x - vdt, t - dt)$ となる。一方、時刻 $(t - dt)$ 秒に状態 (k, x) を占有していた電子 $f(k, x, t - dt)$ はすべて時刻 t にはその状態から出て行き、異なる状態 $(k + F/\hbar dt, x + vdt)$ へ移り変わる。したがって、時刻が $(t - dt) \sim t$ の dt 秒の間に、状態 (k, x) を占有する電子の量(分布関数)が変化する割合は次式のように表される^{3,5,6)}。

$$\left(\frac{\partial f(k, x, t)}{\partial t} \right)_{\text{drift}} = \frac{f\left(k - \frac{F}{\hbar}dt, x - vdt, t - dt\right) - f(k, x, t - dt)}{dt} \quad (3.8)$$

このように電界による電子分布関数の変化を表す項を**ドリフト項**と呼ぶ。上で説明したように、このドリフト項は電子の位相空間での状態変化を決定論的に記述することができるため、図 3.3 のように電子の軌跡は 1 本の直線で表すことができるのである。

式(3.8)の右辺に含まれる微小時間 dt は、いま十分に小さいと仮定しているので、右辺の分布関数はテイラー展開し、その 2 次以上の展開項は無視できるとすると、式(3.8)は次式のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f(k, x, t)}{\partial t} \right)_{\text{drift}} &= \frac{f(k, x, t) + \left[-\frac{F}{\hbar}dt \cdot \frac{\partial f}{\partial k} - vdt \cdot \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial t}dt \right] - \left[f(k, x, t) - \frac{\partial f}{\partial t}dt \right]}{dt} \\ &= - \left(\frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} + v \frac{\partial f}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

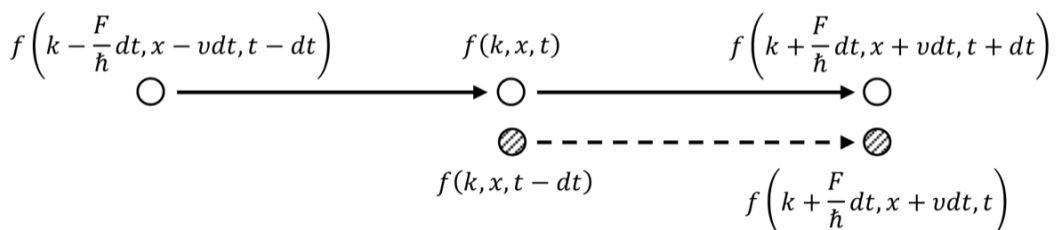


図 3.3 電界による微小時間 dt 内の分布関数の時間変化(ドリフト項)。

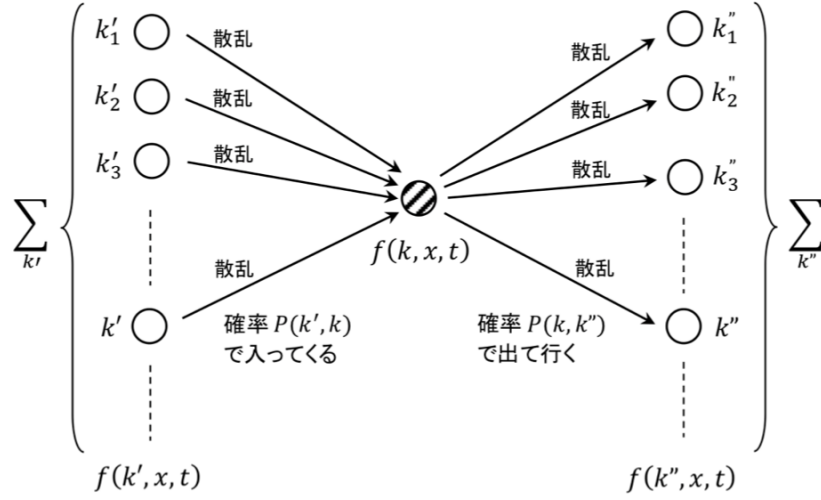


図 3.4 散乱による分布関数の時間変化(散乱項).

次に、もう 1 つの機構である散乱について考える。3.1 節ですでに述べたように、固体内ではフォノン散乱や不純物散乱をはじめとして様々な散乱現象が発生する。ある時刻において、ある 1 つの電子にどの散乱機構が発生するかを決めるには、その瞬間に電子が持つ運動エネルギーに影響を受けることや、また、散乱後の波数やエネルギーといった電子状態については基本的にランダムに決定されるため、散乱による分布関数の変化割合、すなわち**散乱項**を取り入れることは、一般的に複雑で骨の折れる作業となる。そこで上で述べた散乱による効果を散乱項として定式化する前に、散乱による電子分布関数の変化のイメージを図 3.4 に示しておく。いま注目しているのは、状態 (k, x) にいる電子である。散乱による状態変化は一瞬で完了するとし、ここでは散乱前後で時刻 t と位置 x は変化しないと仮定する^a。このため t と x の変数表記は省略することにする。まず、他の状態 k' から散乱によって状態 k に入ってくる電子は遷移確率 $P(k', k)$ が有限である限り可能であり、事実上、無数の遷移プロセスが存在する。一方、状態 k から散乱によって他の状態 k'' に出て行く電子も同様に、遷移確率 $P(k, k'')$ に支配され無数の遷移プロセスが存在する。ただし、状態 k に入ってくる電子ならびに状態 k から出て行く電子どちらに対しても、散乱後の状態がすでに他の電子に占有されている場合には、パウリの排他原理によって、その散乱過程は禁止されるという措置を施す必要がある。

上述した散乱による分布関数の変化の割合を式で書き表すと次のようになる^{3,6)}。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{scatt}} = \left\{ \sum_{k'} P(k', k) f(k') [1 - f(k)] - P(k, k') f(k) [1 - f(k')] \right\} \quad (3.10)$$

上式でたとえば右辺の 1 項目に現れる $f(k') [1 - f(k)]$ の因子は、状態 k に入ってくる電子量は、電子が散乱前に状態 k' に分布していた確率と、散乱後に状態 k が空でパウリの排他原理が作用しない確率の積に比例することを表している。もちろん 2 つの状態間の遷移確率 $P(k', k)$ にも直接的な影響を受ける。散乱項には無数の遷移プロセスが存在するため、式(3.10)の右辺は注目している状態 k 以外のすべての状態 k' で和を取っていることにも留意していただきたい。

以上でドリフト項と散乱項の各寄与(式(3.9)および(3.10))が求められたので、これらの総和を取ることで、分布関数のトータルの時間変化の割合 $\partial f / \partial t$ を以下のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{drift}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{scatt}} \\ &= - \left(\frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} + v \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \left\{ \sum_{k'} P(k', k) f(k') [1 - f(k)] - P(k, k') f(k) [1 - f(k')] \right\} \end{aligned}$$

^a デバイスサイズが微細化されると、散乱事象が完了するまでに要する有限の時間が、無視できなくなる可能性がある」と指摘されている。

上式を整理して書き直すと

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} + v \frac{\partial f}{\partial x} = \left\{ \sum_{k'} P(k', k) f(k') [1 - f(k)] - P(k, k') f(k) [1 - f(k')] \right\} \quad (3.11)$$

となる。上式が固体の電子伝導を記述する**ボルツマン輸送方程式**である。散乱項の遷移確率 $P(k', k)$ は**フェルミの黄金律**(量子力学)を用いて、各散乱機構ごとに計算される。また、パウリの排他原理に関する因子 $f(k') [1 - f(k)]$ は分布関数の2乗の項を含んでいるため、式(3.11)は非線形方程式となり実際に問題を解くことを困難にしている。半導体の場合は、分布関数の値が1よりも十分に小さくなることがあり、その場合は $f(k') [1 - f(k)] \approx f(k')$ 等と近似して線形方程式に帰着させることができ問題を大幅に簡単化できる⁶⁾。

ドリフト・拡散電流モデル

ボルツマン輸送方程式の散乱項に**緩和時間近似**を用いると、固体中を流れる**ドリフト電流密度**と**拡散電流密度**の式を導き出すことができる。いわゆる**ドリフト・拡散電流モデル**と呼ばれる電流の式である。ここではその概要を説明する。

まず、散乱が電子に与える影響を現象論的に考えてみる。図3.2に示したように、電界によって高エネルギー状態に加速された電子は、非弾性散乱を中心とした種々の散乱を受けて、その運動エネルギーを失い大きく減速させられる。すなわち固体中の散乱現象は、波数空間で $k = 0$ を中心にして非対称にドライブされた電子の分布関数 f を、元の熱平衡状態である対称な形 f_0 に復元させる役割を担っている。その復元に要する時間の目安を τ と表し(図3.5参照)、これを**緩和時間**と呼ぶことにする。この近似を採用すると、ボルツマン輸送方程式の散乱項は

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{scatt}} \approx - \frac{f(k, x, t) - f_0(k, x)}{\tau} \quad (3.12)$$

と表すことができる。一般に緩和時間は電子の波数 k に依存するが、ここでは簡単のため定数と仮定する。式(3.12)の右辺は $(f - f_0) \propto e^{-t/\tau}$ の時間変化を与えており、これを散乱項の緩和時間近似と呼んでいる。このときのボルツマン輸送方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} + v \frac{\partial f}{\partial x} \approx - \frac{f(k, x, t) - f_0(k, x)}{\tau} \quad (3.13)$$

となり、これは半導体を中心とする固体の電子伝導を記述する基本輸送方程式である。当然のことであるが、ポテンシャルエネルギー分布 $V(x)$ 中の電子のフェルミ・ディラック分布関数は、式(3.13)を満足することが示される^{3,5)}。その際、ポテンシャルエネルギー分布と力の間には $F = -\partial V / \partial x$ の関係が成り立っている。

次に電流密度を計算する。ここでは定常状態、すなわち $\partial f / \partial t = 0$ の条件下で電流密度を計算する。電流密度の定義は

$$j(x) = \frac{2(-e)}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar k}{m} f(k, x) dk \quad (3.14)$$

で与えられる。上式の計算には被積分関数に含まれる非平衡分布関数 $f(k, x)$ が必要になるが、それを緩和時間近

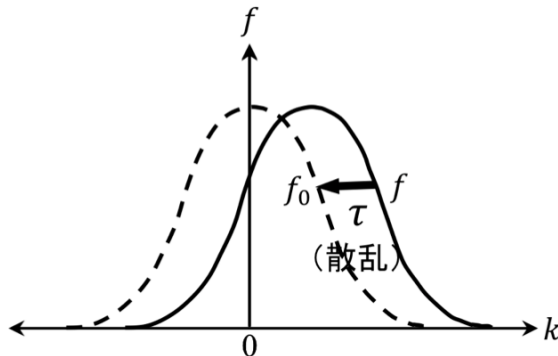


図 3.5 散乱項の役割.

似したボルツマン輸送方程式(3.13)から、電界 F に起因する項と分布関数の空間的勾配 $\partial f / \partial x$ に起因する項に分けて表現し、それぞれの積分を別々に計算することで 2 つの電流密度の式を求めることができる^{3,6)}。その結果、次のドリフト・拡散電流密度の式を導き出すことができる。

$$j(x) = ne\mu E + eD \frac{\partial n}{\partial x} \quad (3.15)$$

ここで n は電子密度 (1 次元) を表し、次式で定義される。

$$n(x) = \frac{2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(k, x) dk \quad (3.16)$$

式(3.15)の右辺の1項目がドリフト電流密度で、2 項目が拡散電流密度を表す。表現から分かるように、ドリフト電流は電界 E に比例し、一方の拡散電流は電子密度 n の勾配に比例して電流が流れる。なお、式(3.15)のドリフト・拡散電流の式は、モーメント法と呼ばれるエネルギー輸送を考慮したデバイス解析理論からも導出することが可能である。

電子移動度

式(3.15)において特に重要な変数が、ドリフト電流密度の式に現れる**電子移動度** μ である。 μ は固体中の電子の速度を決める大変重要な物理量であり、次式で定義される。

$$\mu = \frac{e\tau}{m} \quad (3.17)$$

電子の質量 m と緩和時間 τ 、そして電子の素電荷 e で決定される。表 3.1 に代表的な半導体の電子移動度と**正孔移動度**をまとめて示している。現在の LSI (半導体大規模集積回路) はシリコン (Si) が主流となって構成されているが、電子・正孔移動度で判断すると同じ**4 族元素**の**ゲルマニウム** (Ge) や、さらに電子移動度のみに注目すると**III-V 族化合物半導体**の**インジウムヒ素** (InAs) などが、次世代超高速 LSI 材料の有力な候補になることが分かる。

一方、拡散電流は **pn 接合**などのキャリアの濃度勾配が形成される半導体に特有の電流機構である。金属では基本的にドリフト機構によってのみ電流が流れる。このため金属では**オームの法則**が成り立つのである³⁾。拡散電流の係数に現れる変数 D は**拡散定数**と呼ばれ、電子移動度と次の関係を持つ。

$$D = \frac{k_B T}{e} \mu \quad (3.18)$$

これを**アインシュタインの関係式**と呼んでいる。

表 3.1 代表的な半導体の電子移動度および正孔移動度。

	Si	Ge	GaAs	InP	InAs
電子移動度 μ_e (cm ² /V·s)	1600	3900	9200	5400	40 000
正孔移動度 μ_h (cm ² /V·s)	430	1900	400	200	500

3.3 デバイス・シミュレーションへの応用

前節の議論から分かるように、ボルツマン輸送方程式を基礎とした一連の理論的枠組みは、現実のデバイス特性解析に向けた有効なツールを提供することが期待できる。ボルツマン輸送方程式の適用デバイスの一つが図 3.6 に示す**金属-酸化膜-半導体電界効果型トランジスタ** (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor: MOSFET) である。図 3.6 には MOSFET の幾何学的な 3 端子構造の説明に加えて、電子の加速・散乱現象⁹⁾とデバイス解析を行う際に不可欠となる境界での粒子の取り扱いについて模式的に描いている⁷⁾。シリコン MOSFET における電子の散乱現象については、不純物散乱とフォノン散乱が重要であり、その他に**ゲート絶縁膜とチャネル層の界面**に生じる原

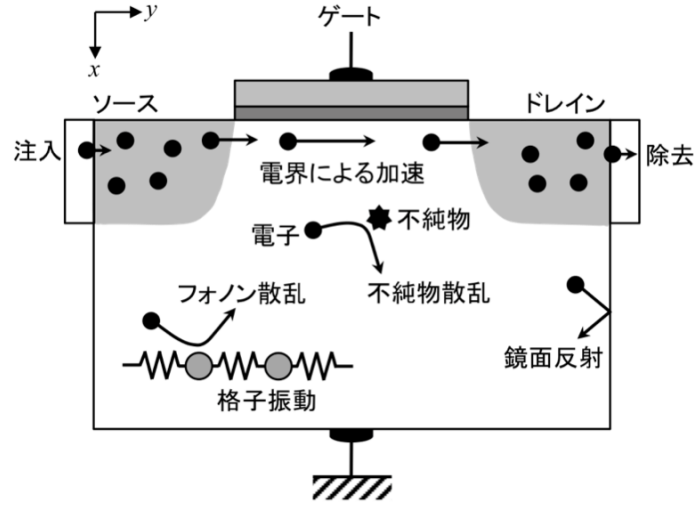


図 3.6 MOSFET の構造。デバイス内で起こる電子の加速と散乱現象についても模式的に描いている⁹⁾。

子レベルの凹凸によって発生する表面ラフネス散乱も重要となってくるが、これについては次の 4 章で述べることにして本節では特に考慮しない。n 型 MOSFET の ON 状態では、ドレインおよびゲートに電源電圧 V_{dd} を印加し、ゲート直下に静電結合とソースからの電子注入によって多数の電子を反転誘起させる。誘起された電子はソース/ドレイン間に形成された電界によってドレイン方向に加速され、途中、様々な散乱を受けながらソースからドレインに到達し電流が流れる。これをオン電流 (I_{on}) あるいは駆動電流と呼んでいる。n 型 MOSFET の典型的なドレイン電流－ゲート電圧 ($I_D - V_G$) 特性を図 3.7 に示す。一方、OFF 状態 ($V_D = V_G = 0$) ではゲート直下に反転誘起される電子の密度はほぼゼロとなり電流の値も無視できるレベルにまで低減する。これをオフ電流 (I_{off}) と呼ぶが、しきい値電圧近傍を解析対象とする場合には、図 3.7 に示す S 値 (サブスレッショルド係数) がオフ特性を表すことが多い。

上述した MOSFET の ON/OFF 制御は、ゲート電極と基板間の静電結合を利用して、チャネル内のポテンシャルエネルギーを上下移動させることで実現している。このゲート電極との静電結合の効果およびチャネルのポテンシャルエネルギーの計算には、次式のポアソン方程式が用いられる。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = -e[\Gamma(x, y) - n(x, y) + p(x, y)] \quad (3.19)$$

ここで、 $\Gamma(x, y)$ は不純物密度分布を表し、 $n(x, y)$ および $p(x, y)$ はそれぞれ電子密度分布と正孔密度分布である。 $\epsilon(x, y)$ は材料の持つ誘電率分布で、 $\phi(x, y)$ がこの方程式の解となる静電ポテンシャル分布である。3.2 節で述べたように、ポテンシャルエネルギー分布 $-e\phi(x, y)$ と力の間には $\mathbf{F} = -\nabla(-e\phi)$ の関係があり、さらに電子密度分布 $n(x, y)$ はボルツマン輸送方程式から得られる物理量である (正孔密度分布については直接輸送特性には関係ないので、熱平衡状態を仮定したボルツマン分布関数あるいはフェルミ・ディラック分布関数を用いて解析的に計算することが多い)。したがって、式(3.19)のポアソン方程式と式(3.11)のボルツマン輸送方程式 (正確には、2 次元空間

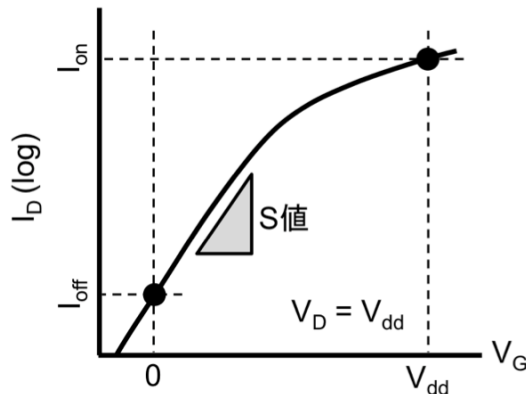


図 3.7 n 型 MOSFET の典型的な $I_D - V_G$ 特性。

(x, y) に拡張したボルツマン輸送方程式)は自己無撞着に解く必要がある。ポアソン方程式を自己無撞着に解くことは、量子物理学的に言うと、電子-電子相互作用をハートレー近似の範囲で取り入れることに相当する。電子デバイスの微細化が進むと、より高次の電子-電子相互作用(例:ハートレー・フォック近似や相関相互作用エネルギーなど)を考慮する必要性が出てくるかも知れない。

電子輸送と直接関係はないが、解析領域の端では粒子の取り扱いについて注意が必要になる⁷⁾。まず、ソースとドレインの両端では、各領域の境界部で電荷中性条件を満たすように粒子の注入や除去を行う。粒子を注入する際には、電極内は通常は熱平衡状態にあると仮定して電子のエネルギー分布を設定し、そこからバンド構造の特性を反映した形で電子の各方向の波数成分を決定するなど、電極とデバイス領域の接続が円滑で、かつデバイス特性に影響を与えないように配慮が必要である。一方、電極以外の境界では粒子を反射させ、常に解析領域に閉じ込めておく措置が必要である。ゲート絶縁膜とチャネル層の接触面以外の境界では、電子輸送特性に影響を与えないように粒子を鏡面反射させ、運動量やエネルギーを維持したまま解析領域に戻す処理が施される。

MOSFET のアンサンブル・モンテカルロ(EMC)法

ボルツマン輸送方程式を用いたデバイス・シミュレーションの計算フローチャートを図 3.8 に示す。この図は上から下へ時間が進むとしている。そして、得られた解(電子密度分布、ポテンシャル分布、電流値など)が定常状態と呼ばれる一定値に収束するまで、ボルツマン輸送方程式とポアソン方程式の数値解法を繰り返し実行する。したがって上記の解が十分に収束したことが確認できれば、前述した自己無撞着計算が達成されたことを自動的に保証してくれる。

図 3.8 ではボルツマン輸送方程式を直接解くのではなく、自由走行時間内の電子の運動をニュートンの運動方程式を数値的に解くことで求めている。自由走行後は、散乱レートに応じて粒子毎に選択された散乱機構にしたがって、電子の状態(運動量とエネルギー)が擾乱させられる。シリコンの場合、フォノン散乱機構は弾性散乱過程および非弾性散乱過程のどちらも、等方的な散乱を引き起こすことが知られている。すなわち散乱後の電子の波数は、すべての

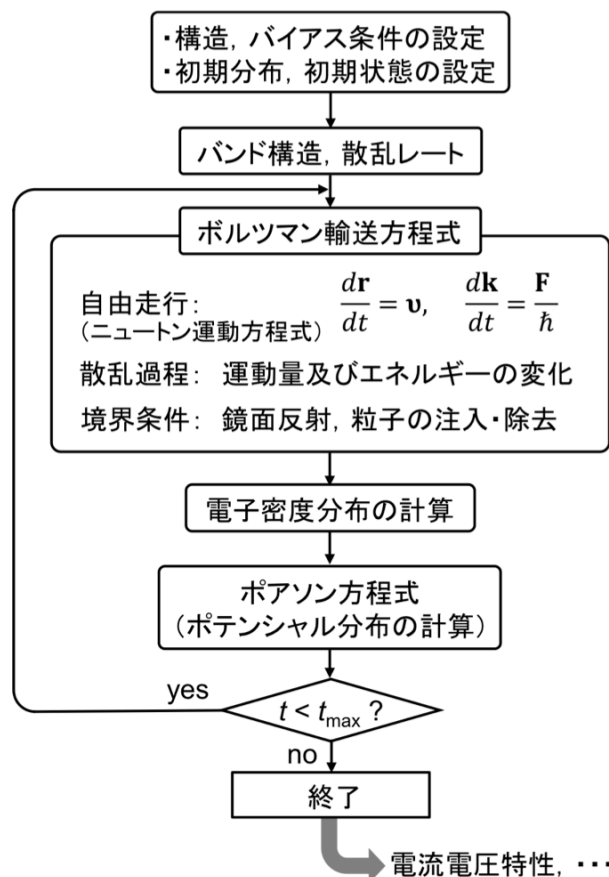


図 3.8 MOSFET のモンテカルロ・シミュレーションが実行する計算フローチャート。

方向が等しい確率で選択されるという特徴がある。これを**等方性散乱**と呼ぶ。ちなみにシリコンでは、電子と**音響フォノン**の相互作用が弾性散乱過程となる。一方、電子と**光学フォノン**の相互作用は非弾性散乱過程となるが、シリコンの非弾性フォノン散乱過程は複雑であり、電子の場合は伝導帯のバンド構造にも関連して、合計で 6 種類の非弾性散乱過程が存在する。これに関する詳しいことは文献[8,10]を参照していただきたい。

これに対して不純物散乱は、散乱前と逆の運動方向よりも、散乱前と同じ運動方向に散乱される確率の方が高くなるという性質がある。これを**非等方性散乱**と呼ぶ^{7,8)}。つまり、電子が結晶内の不純物に衝突しても、衝突前の電子の運動方向(今の場合ソース・ドレイン方向)と同じ方向に散乱される確率の方が優勢になるのである。この性質によって、ソースやドレイン内に高密度不純物が存在していても、電子輸送の観点では致命的な特性劣化を引き起こさない理由の一つと考えられている。以上、図 3.8 で紹介した計算方法を**モンテカルロ・シミュレーション**と言う⁷⁻⁹⁾。実際の MOSFET 内では、無数個に近い電子が解析領域内を動き回っており、図 3.8 で示した計算フローを全電子に対して実行すると、すべての計算が終了するまでに要する時間は非現実的な長さになる。そこで実際のモンテカルロ・シミュレーションでは、**超粒子**という技法を用いて、計算に用いる粒子数を低減させて(通常は数千～数万個)、計算時間の短縮化を図ることがある。超粒子の考え方は以下のようなものである。自由走行し散乱を受ける粒子は完全に 1 個の電子と考え、各粒子の運動をニュートンの運動方程式に従って計算する。しかし、粒子数を適当に設定した場合は、粒子数分布から算出される電子密度の値が、初期設定したデバイス内の電子密度の値から大きくずれてしまう。この電子密度のずれはポアソン方程式(3.19)の右辺に代入する電荷密度分布を非現実的なものにしてしまうため、ポアソン方程式の解、すなわちポテンシャル分布が発散して正しい輸送特性を得ることができなくなる。この電子密度のずれを解消する目的で各粒子に“適切な数量分の電荷”を担わせて、ポアソン方程式との収束解を得られるようにするのが**超粒子法**である。1 個の粒子に担わせる電荷量の設定方法については文献[7]に詳しく説明されている。

このように MOSFET のモンテカルロ・シミュレーションでは、多数個の粒子(正確には超粒子)を用いて計算を行うが、その計算が時間とともに進行するイメージを図 3.9 に示す。この図では左から右へ時間が進むとしている。用いている粒子数は N としている。電子-電子相互作用を考慮していない場合は、各粒子は独立して運動すると考えて良い。×印は散乱がその時刻で起こったことを表している。散乱機構の選択方法については後の 3.4 節で説明する。自由走行時間は全散乱レートを使って各粒子毎にランダムに決定される。縦の破線はポアソン方程式を解いたり、電子密度分布や電子の平均速度分布などを計算する時刻を表している。このように多数個の粒子を同時に並行して走行させる計算方法を、**アンサンブル・モンテカルロ(Ensemble Monte Carlo: EMC)法**と呼んでいる。

本書では図 3.8 で示したように、自由走行と散乱過程に分けてボルツマン輸送方程式を解く EMC 法を紹介したが、式(3.11)のボルツマン輸送方程式を**ブロック三対角化行列法**などの離散化手法を用いて、時間応答ではなく決定論的に式(3.11)の解を求める方法も可能である。その方法では時間応答を求める必要がないため計算時間が短縮でき

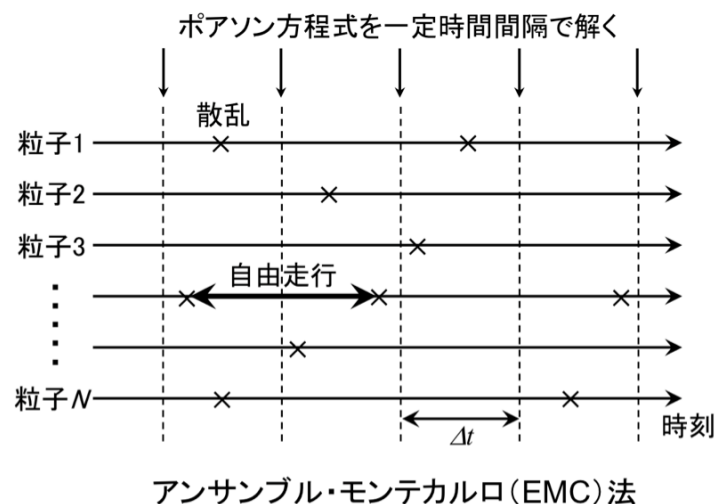


図 3.9 アンサンブル・モンテカルロ(EMC)法の計算の流れ。

る反面、非弾性散乱過程のように電子の運動エネルギーが散乱前後で大きく変化する場合には、ボルツマン輸送方程式の**離散化行列方程式**をエネルギー毎に独立して解くことができなくなるため、**離散化行列要素**を格納するためのメモリ領域を大きく取ったり、あるいは各エネルギーに対する離散化行列方程式を自己無撞着に解くことが必要になる。いずれの場合も計算量の膨大化が避けられないため、近似の導入など計算時間を短縮化する工夫が必要になってくる。余談になるが、このことは第4章のウィグナー輸送方程式にも当てはまる。将来の発展に期待したい。

以上、MOSFETのEMC法の全体像について説明してきたが、このEMC法の計算には、電子のバンド構造並びに各散乱過程の散乱レートを解析式で表現するか、あるいはテーブル化してメモリに格納しておくことが不可欠になる。次節ではまず、各散乱過程の説明と散乱レートに基づく散乱機構の選択方法について解説を行う。そしてその次の節では、シリコン半導体とガリウム砒素半導体を取り上げ、両バンド構造の特徴並びに相違点と、解析式バンドモデルの表現などについて解説を行う。

3.4 散乱過程

3.1節で述べたように、フォノン散乱には、散乱前後で電子のエネルギーが変化する非弾性散乱過程とエネルギーが変化しない弾性散乱過程が存在する。一方、不純物散乱は弾性散乱過程に属する。本節の前半では主に、弾性散乱過程と非弾性散乱過程の電子輸送に与える影響についてまとめ、後半では、モンテカルロ法において散乱機構がどのように選択されるのか、実際に計算された散乱レートをを用いて説明を行う。

まず、電子が置かれている状況と計算条件について説明する。今から対象とするのは、図3.9に示した多数の粒子の中のある1個の粒子である。その粒子の電界による加速と散乱現象を考える。もう少し具体的に述べると、たとえば“粒子1”に注目するとし、それが自由走行中に x 方向にかけられた一様電界 E によって加速され、その自由走行後に弾性散乱を受けた場合と非弾性散乱を受けた場合の電子の波数空間での遷移の様子について考えていく。電子のバンド構造は最も単純な**放物線バンド**($E = \hbar^2 k^2 / 2m$)を仮定する。今は一様電界中であるので位置の情報は必要なく省略する。

それでは、時刻が $t = 0$ で加速が始まるとして、自由走行中は散乱が起こらないので電子の波数は式(3.2)より

$$k(t) = k(0) + \frac{F}{\hbar}t \quad (t \leq \tau: \text{自由走行時間}) \quad (3.20)$$

と変化する。すなわち、自由走行中の電子の波数は、外力 F (電界)によって時間に比例して増加する。これを示したのが図3.10(a)の実線である。この結果はあくまで自由走行時間内で成り立つものであり、図中で示した2つの時刻(t_1, t_2)は $t_1 < t_2 < \tau$ の関係があるとする。 τ は自由走行時間を表す。このときの電子の運動エネルギーの変化を分散曲線上でプロットしたのが図3.10(b)である。式(3.20)と $E(k(t)) = \hbar^2 k(t)^2 / 2m$ の分散関係より、電子のエネルギーは時間の2次関数となって急激に増加することが分かる。次節でも説明を行うが、フォノン散乱レートはおおよそ散

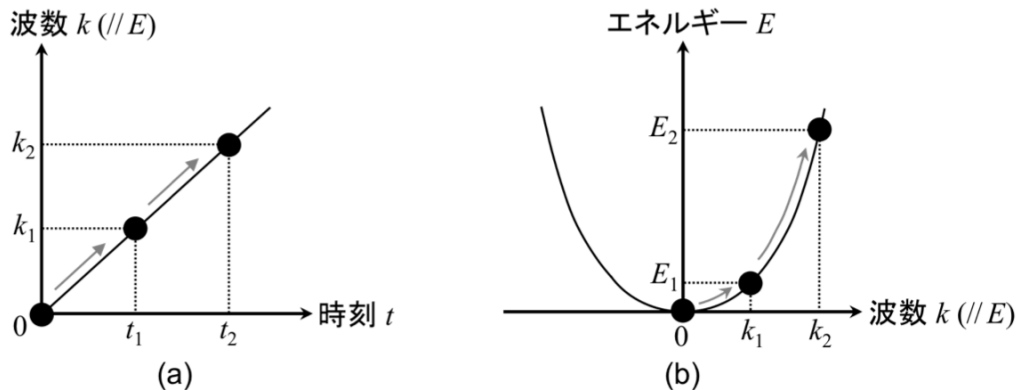


図 3.10 自由走行中の電子の加速⁹⁾。(a)波数と(b)エネルギーが増加する様子。電子のバンド構造は放物線バンド($E = \hbar^2 k^2 / 2m$)を仮定している。

乱後の状態密度(3次元電子ガスの場合、 $\propto \sqrt{E}$)に比例するため^{7,8)}、上述のように電子エネルギーが増加すると電子は一層散乱されやすくなる。したがって次に、電子のエネルギーが E_2 近傍まで増加したときに散乱が発生したと想定し、波数空間での電子遷移について考える。

弾性散乱過程と非弾性散乱過程

まず弾性散乱過程のみが起こった場合を考える。ここでの注意点は、弾性散乱の場合は散乱前後で電子のエネルギーは変化しないが、電子の波数は散乱前後で変化するという点である。つまり、運動量が変化するため、電子の運動方向は乱され、速度の低下など輸送特性の劣化は避けられない。その様子を描いたのが図 3.11 (a)である。ここでは作図の都合上、2次元の波数空間を用いて弾性散乱による電子遷移パターンを描いている(ちょうど MOSFET のチャンネル内には 2 次元電子ガスが形成されている)。グレーの色を付けた領域は、2次元放物線バンド $E = \hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/2m$ を表している。例として 3 通りの遷移パターンを示している。いずれのパターンも等エネルギー円上に遷移しており電子エネルギーは不変であるが、波数ベクトルは大きく変化することが確認できる。たとえば、散乱後(1)のパターンは散乱後の k_x 成分が散乱前のそれと正反対の値(すなわち $k'_x = -k_x < 0$)を取るため、散乱直後の電子は電界とは逆方向に走行し電子の平均速度は一旦ゼロ近傍まで減少する。これに対して(3)のパターンでは、電界方向に垂直な k_y 成分が大きく変化するのに対して、 k_x 成分は前述のパターン(1)よりも小さな変化量に抑えられている。したがって(3)の遷移パターンでは、平均速度の低下は相対的に弱くなると期待される。

次に非弾性散乱のみが起こった場合を考えてみよう。図 3.11(b)に前述と同様に 3 通りの遷移パターンを描いた。非弾性散乱では、電子が光学フォノンなどの高エネルギーフォノンを放出してエネルギーを失うため、いずれの遷移パターンでも散乱後の電子は等エネルギー円よりも下のエネルギー領域に遷移する(ちなみに実際の非弾性散乱過程には、発生確率は小さいがフォノンの吸収過程も存在する。その場合には、散乱後の電子エネルギーは増加するため散乱後の電子は等エネルギー円よりも上の領域に遷移する)。図 3.11 (b)では 3 つの遷移パターンとも同一のエネルギー量を失うと想定しているが、散乱後の電子はエネルギーだけでなく波数についてもゼロ近傍に集まる様子が確認できる。図 3.11 (a)と(b)を比較すると分かるが、弾性散乱ではそのような傾向は見られず、散乱後はむしろ電子が波数空間中に広がって分布するようになる。その原因はシリコンの弾性(および非弾性)フォノン散乱が等方性散乱であることによる。すなわち 3.3 節で述べたように、シリコン中の電子はすべての方向に等しく散乱されるという性質があり、散乱によってエネルギーを失わない弾性散乱の方が、波数空間での分布のバラツキがより顕著に現れることを示している。

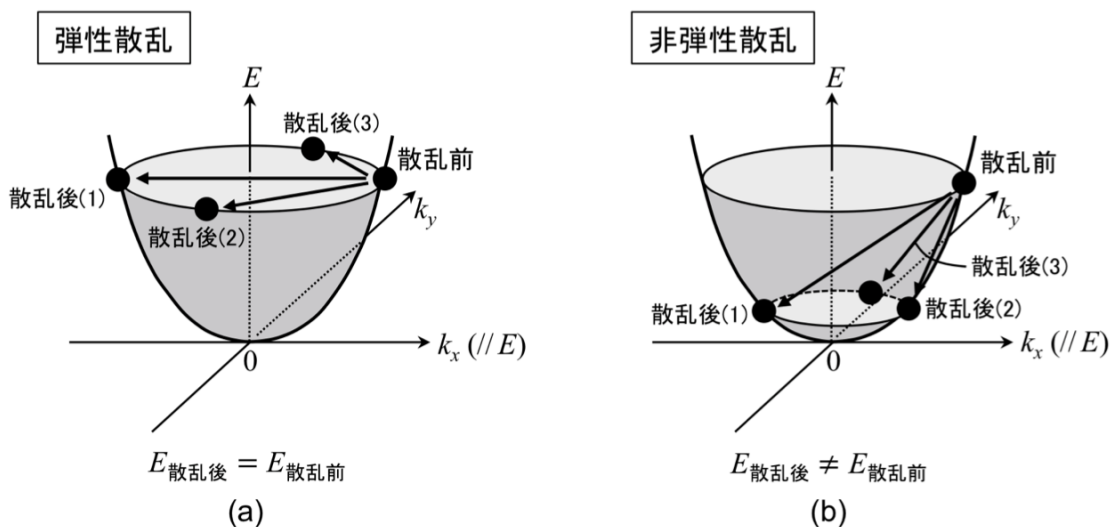


図 3.11 (a)弾性散乱後および(b)非弾性散乱後の波数空間における電子分布の模式図. 2次元の波数空間を用いて描いている. グレーの色を付けた領域が、2次元放物線バンド $E = \hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/2m$ を表している. (a), (b) どちらも、例として 3 通りの遷移パターンを描いている。

不純物散乱は弾性散乱過程で、かつ非等方性という性質を持っている^{7,8)}。したがって不純物散乱の場合は、図 3.11 (a)のパターンを基本として、散乱後の電子の多くが電界方向と同じ $k_x > 0$ の領域に偏在した形の分布になることが予想される。

散乱機構の選択方法

電子の自由走行後に、複数ある散乱機構の中からある一つの散乱機構を選択する方法を説明する。今の場合考慮する散乱機構は、(1)不純物散乱 (W_1)、(2)弾性フォノン散乱 (W_2)、(3)非弾性フォノン吸収散乱 (W_3)、そして(4)非弾性フォノン放出散乱 (W_4) の 4 つとする。まず、これら 4 種類の散乱レートを、シリコンに対して実際に計算した結果を図 3.12 (a)に示す。横軸は電子のエネルギーを表す。この図は 3 次元電子ガス(バルク電子)に対する計算結果であり、絶対温度は 300 K(室温)としている。計算に用いた散乱レートの式とパラメータの値は、文献[7,8,10]を参照していただきたい。不純物はドナーとし、その密度 N_D は $N_D = 10^{20} \text{cm}^{-3}$ とした。また電子密度 n は不純物密度 N_D と等しいとし、電荷中性条件が成り立つと仮定した。これらは、n 型 MOSFET のソース内とドレイン内の電子の状況を再現するための条件となっている。不純物散乱モデルはいわゆる **Brooks-Herring モデル**を採用した^{7, 8, 10)}。弾性フォノン散乱はエネルギーをゼロと近似した音響フォノンに基づくモデルを用いた。一方、非弾性フォノン散乱は合計で 6 種類の光学フォノンと音響フォノンが関連するモデルを採用し^{8,10)}、各非弾性フォノンのエネルギーは室温の熱エネルギーと同程度以上の値を持つため、電子はこれら非弾性フォノンの放出によりエネルギー緩和させられると考えて良い。また今回は、非弾性フォノンの吸収過程も考慮に入れており、先述の放出過程とは別の散乱機構として取り扱っている。図 3.12 (a)を見ると、不純物散乱以外の 3 種類のフォノン散乱レート(W_2, W_3, W_4)は、電子のエネルギーとともに増加することが分かる。これは図 3.10 に関する説明のところで述べたように、フォノン散乱レートがおおよそ散乱後の状態密度、すなわち 3 次元電子ガスの場合は $\sqrt{E}$ に比例することに起因する。つまり、遷移先の状態密度が大きいほど、その散乱過程は発生しやすくなるのである。一方、不純物散乱では散乱後の状態密度の他に、電子速度の約 2 乗に弱く逆比例する項が含まれているために、後者の効果によって、不純物の散乱レートの増加は抑えられる。これは直感的には、高エネルギーの電子、すなわち高速で走行する電子は不純物の傍を短時間で通り過ぎるため、不純物が発するクーロン力を十分に受ける前に不純物から遠ざかることを示唆している。

このように電子の散乱レートは、散乱の機構や電子のエネルギーによって大小関係が変化するが、当然のこととして、散乱レートの高い散乱機構ほど高い頻度で選択されるようにアルゴリズムを設定する必要がある。そこで一般的な EMC 法では、図 3.12 (b)に示すように、散乱レートの和を全散乱レートの最大値 Γ で規格化した散乱テーブルを作成

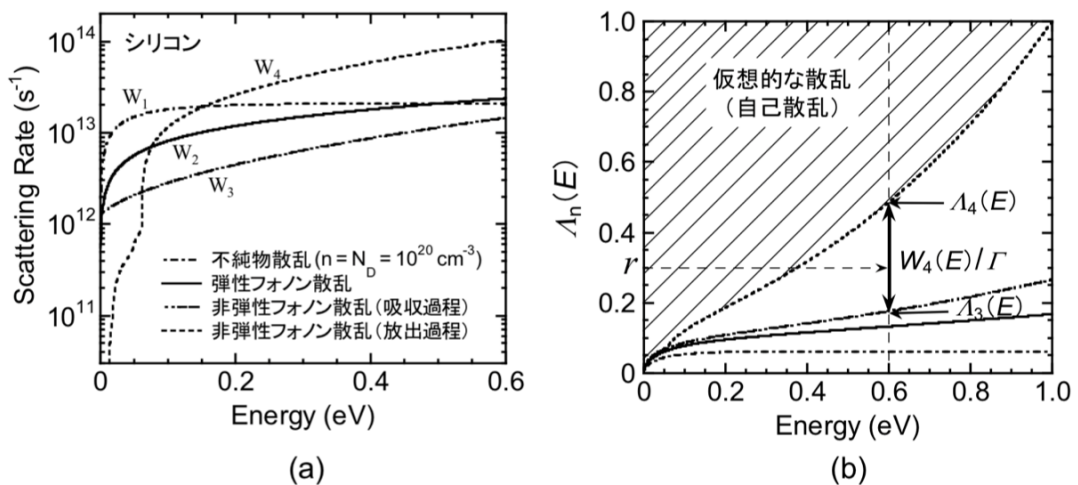


図 3.12 (a) シリコン中の 3 次元電子ガスに対する散乱レート。横軸は電子エネルギーを表す。 $T = 300 \text{ K}$ 。 W_1 : 不純物散乱、 W_2 : 弾性フォノン散乱、 W_3 : 非弾性フォノン吸収散乱、 W_4 : 非弾性フォノン放出散乱。 (b) 全散乱レートの最大値 Γ で規格化した各ステージの散乱レートの和。

し、それと [0~1] の間の任意の値をランダムに発生する**乱数発生関数**を用いて、上記の問題を解決している。図 3.12 (b)を得る手順は以下の通りである。

まず全散乱レートの和を取り、EMC 法を実行するにあたり電子が取りうるエネルギー範囲 ($0 \sim E_{max}$) で、全散乱レートの最大値 Γ を求める。式で表すと次式のようにになる。

$$\Gamma = \max \left(\sum_{i=1}^4 W_i(E) \right); \quad E = 0 \sim E_{max} \quad (3.21)$$

上式中の i は散乱機構を表すラベルで、 $i = 1$: 不純物散乱、 $i = 2$: 弾性フォノン散乱、 $i = 3$: 非弾性フォノン吸収散乱、そして $i = 4$: 非弾性フォノン放出散乱を表す。エネルギーの最大値 E_{max} は計算条件に合わせて設定する。MOSFET の場合、電子は印加したドレイン電圧に等価なエネルギー以上に高いエネルギーを持つことはあり得ないので、たとえば、ドレイン電圧(すなわち ON 電圧)を 0.6 V に決めると、エネルギーの最大値は余裕を見て、図 3.12 (b)に示すように $E_{max} = 1.0 \text{ eV}$ 程度に設定すれば良い。

次に、各ステージの散乱レートの和 ($\sum_{i=1}^n W_i(E)$, $n = 1, 2, 3, 4$) を、次式のように式(3.21)で求めた全散乱レートの最大値 Γ で規格化する。

$$\Lambda_n(E) = \frac{\sum_{i=1}^n W_i(E)}{\Gamma}, \quad n = 1, 2, 3, 4 \quad (3.22)$$

このようにして得られた結果を図 3.12 (b)に示している。この図では例として、エネルギーが 0.6 eV の電子がこの瞬間の計算対象となっている。このときに如何なる散乱機構が選択されるかを定めるために乱数 r を発生させ、その値が 0.3 であったとしている。そこで $r = 0.3$ を図中に描き入れると図 3.12 (b)の破線の矢印の位置になり、この瞬間では W_4 の非弾性フォノン放出散乱が選ばれることが分かる。すべての電子に対して上記の操作を実行することで、電子エネルギーや散乱レートの大小を反映した散乱機構の選択が可能となる。このように計算の核心部分において乱数を多く用いることから、カジノで有名な都市「モンテカルロ市」に因んで**モンテカルロ法**と呼ばれている。ここで図 3.12 (b)の $\Lambda_4(E)$ より上部の領域が斜線で塗りつぶされているが、この領域はたとえ選択されたとしても実際には散乱が発生しない取り扱いとする。この領域を**自己散乱領域**、あるいは**仮想散乱領域**と呼ぶ。この領域を追加することによって、全散乱レートをエネルギーに関係なく一定にすることができるようになり、自由走行時間の解析的表現も得られるようになる⁷⁻⁹⁾。

3.5 バンド構造

続いて、電子のバンド構造のモデル化について説明する。3.4 節の散乱過程でも用いたように、通常のモンテカルロ法では、電子のバンド構造を次式のような単一の等方的な放物線バンドで近似し、計算の簡略化を行うことが多い。

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} \quad (3.23)$$

しかし現実のバンド構造は**異方性**や**多谷構造**に加えて、**非放物線性**等を示すために、上述したような単純な放物線バンドでは、さまざまな不都合や限界があるのも事実である。本節では、まず、シリコン(Si)とガリウム砒素(GaAs)の**フルバンド構造**について復習し、両バンド構造の特徴と相違点について解説を行う。そして本節の後半では、**解析式バンド近似**について考えていく。伝導帯の異方性と多谷構造の表現方法について述べた後、**非放物線係数 α** の役割とその広範囲に及ぶ影響について述べていく。

フルバンド構造

図 3.13 に、**経験的擬ポテンシャル法**を用いて計算した(a)Siと(b)GaAs のフルバンド構造を示す³⁾。両者とも**面心立方格子の第一ブリルアンゾーン**(Brillouin Zone; BZ)の特殊点(L- Γ -X-U- Γ)に沿った分散曲線を描いている。今の場合、**スピン-軌道相互作用**は無視している。価電子帯はどちらも Γ 点に頂点を持ち、一方の**伝導帯**は Si は X 点近傍

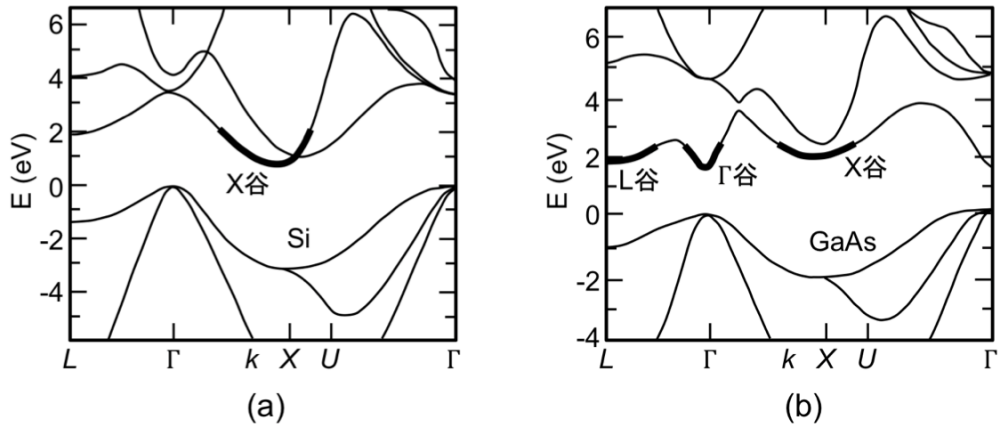


図 3.13 (a)Si と(b)GaAs のフルバンド構造. 経験的擬ポテンシャル法を用いて計算した. スピン-軌道相互作用は無視している.

にエネルギー最小値をとり、GaAs は Γ 点にエネルギー最小値をとることから、良く知られているように、Si は**間接遷移型**、GaAs は**直接遷移型**になることが分かる。価電子帯は安定した**結晶構造**を維持するために重要な役割を果たしている。Si と GaAs は、どちらも面心立方格子をベースとする**ダイヤモンド構造** (Si) 並びに**閃亜鉛鉱構造** (GaAs) という類似の結晶構造を取ることから、図 3.13 に示すように、両者の価電子帯は非常によく似た分散曲線を描いている。これに対して伝導帯は Si と GaAs で特徴が大きく異なる。Si の伝導帯は X 点近傍、より正確に述べると、X 点から Γ -X 間隔の 15%ほど Γ 点側に移動した点でエネルギーの最小値をとる。このことより通常、Si は X 点近傍にエネルギーの底、あるいは**エネルギーの谷**があると表現する。

伝導帯最下端付近の異方性と多谷構造

Si では上記の X 点近傍以外の谷はエネルギー的に大きく離れており、また遷移が禁止されている谷もあるため、実質的には X 点近傍のエネルギー谷にほとんどの電子が分布する。また図 3.13 (a)の太い実線で描いたように、この X 点近傍の谷は Γ -X 方向の曲線の曲率と、X-U 方向のそれが大きく異なっており、伝導帯のエネルギー最下端付近では、電子は異方性を示すことが読み取れる。実際に Si 伝導帯の最下端付近の**等エネルギー面**を描くと図 3.14 (a)のようになる。前述した異方性により、電子の**有効質量**は Γ -X 方向 ($\pm k_x$ 方向、 $\pm k_y$ 方向、 $\pm k_z$ 方向)は重く(曲率は小さく)、それに垂直な方向は軽く(曲率は大きく)なるため、等エネルギー面は図 3.14 (a)に示したように**回転楕円体構造**になる。また第一 BZ 内の X 点は $\pm k_x$ 方向、 $\pm k_y$ 方向、そして $\pm k_z$ 方向に存在するため、結局のところ、第一 BZ の境界から僅かに内側に入った所に回転楕円体構造で表される等価な 6 つのエネルギー谷が形成されることになる。これを多谷構造、あるいは**マルチバレー構造**と呼ぶ。

一方、GaAs の伝導帯は Γ 点がエネルギーの最下端であるが、図 3.13 (b)に示すように、L 点と X 点近傍にもエネ

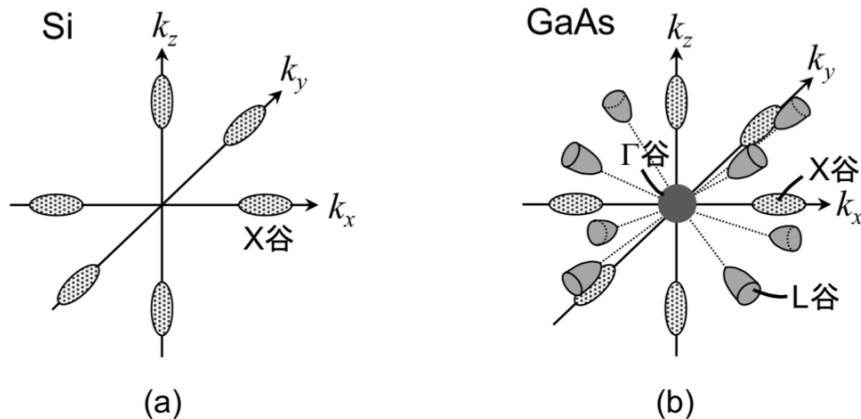


図 3.14 伝導帯最下端付近の等エネルギー面. (a) Si, (b) GaAs.

ルギー的に近い 2 つの谷が存在する。具体的なエネルギー差を記すと、 $E_{\Gamma L} = 0.323\text{eV}$, $E_{\Gamma X} = 0.447\text{eV}$ である¹⁰⁾。したがって GaAs では、電界によって簡単に L 谷や X 谷に電子が遷移する。一般に、L 谷と X 谷の電子の有効質量は Γ 谷のそれよりも重いため、この遷移が起こると電子の速度が減少し、いわゆる、**負性抵抗**を示すようになる(**ガン効果**)。GaAs 以外の他の III-V 族化合物半導体でも同様のガン効果が起こることが知られている。III-V MOSFET の電子輸送を議論する場合には、上位の L 谷や X 谷を考慮することが重要になる。GaAs の伝導帯の最下端付近の等エネルギー面を描くと図 3.14 (b)のようになる。 Γ 点は球対称であることから球状の等エネルギー面になるが、L 点と X 点は Si の X 点と同様に異方性を示すため、両谷ともに回転楕円体構造となる。ここで注意点を挙げるとすると、L 谷の中心点は第一 BZ のちょうど境界面上に配置されるので、第一 BZ の内側に属する L 谷は、図 3.14 (b)に描いたように全 L 谷のちょうど半分の体積を持つことになる。したがって、第一 BZ 内の L 谷の**谷縮重度**は $8 \times 1/2 = 4$ となる。L 谷の電子密度や電流密度などの計算の際には、上記の谷縮重度の取り扱いに注意が必要である。

解析バンドモデル

図 3.13 の波数空間を離散化して、 $E - k$ 関係をテーブル化しコンピュータのメモリに格納した後に、その大規模なデータ群と照合しながらモンテカルロ計算を行う方法を、**フルバンド・モンテカルロ法**という。この計算法は高精度である反面、計算時間は大規模になる。これに対して、図 3.13 のフルバンド構造で得られたエネルギー谷の特徴を解析式で近似し、通常のモンテカルロ法に異方性や多谷構造、そして非放物線性を取り入れる方法を**解析バンドモデル**と呼ぶ。ここでは X 点近傍の谷を例にとり、上記の解析バンドモデルについて説明を行う。

図 3.15 に X 点近傍の回転楕円体等エネルギー面の一つを示す。異方性を表すために、長軸方向の重い有効質量を m_l 、そして短軸方向の軽い有効質量を m_t と表すことにする。このとき、たとえば k_x 軸上の X 点近傍の 2 つの谷に対しては、上記の m_l と m_t を用いて、各々の回転楕円体のバンド構造を次式で表すことができる。

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_0)^2}{m_l} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_t} \right] \quad (k_x \text{ 軸上の } k_x > 0 \text{ 方向の X 点近傍谷}) \quad (3.24)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x + k_0)^2}{m_l} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_t} \right] \quad (k_x \text{ 軸上の } k_x < 0 \text{ 方向の X 点近傍谷}) \quad (3.25)$$

ここで k_0 は回転楕円体の中心を表し、Si の場合は $\Gamma - X$ 間隔の約 85% の点となる。 $k_y \leq 0$ 方向と $k_z \leq 0$ 方向の残り 4 つの X 点近傍の谷についても同様の解析式で表すことができる。電子はこれら 6 つの谷に均等に分布するので、粒子の初期分布・初期状態の設定の際には、各谷に配置する粒子の数を等しく設定する。また、各谷でバンド構造が異なることから、谷間フォノン遷移(非弾性フォノン散乱過程)が発生した場合には、遷移後に属する谷の情報(有効質量の組み合わせや波数空間での位置など)に更新する作業が必要になってくる。EMC 法にこれらの拡張を適切に行うことで、異方性と多谷構造については解析バンド近似の下でも適切な精度をもって取り入れることが可能である。

次に、バンドの非放物線性のモデル化について説明を行う。図 3.13 (b)で示した GaAs フルバンド構造の伝導帯最下端バンドを拡大して模式的に描いたものを図 3.16 (a)に示す。非放物線性とは、伝導帯のエネルギー谷部や価電子帯のエネルギー頂上部において、高波数領域になると電子や正孔の $E - k$ 関係が放物線バンドから外れる現象

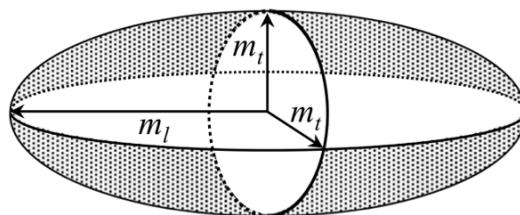


図 3.15 X 点近傍のエネルギー谷の異方性. m_l は回転楕円体の長軸方向の有効質量、 m_t はその短軸方向の有効質量を表す。

を表している。一般的には、放物線バンドの特徴である $E \propto k^2$ の関係から $E \propto k^1$ の関係に変更され、図 3.16 (b) の実線のように、放物線バンドよりも低エネルギー領域に分散曲線が下がってくる傾向が見られる。この影響を取り入れる方法として、非放物線係数 α を次式のように導入し、 $E - k$ 関係を求め直す方法が広く用いられている。

$$E(\mathbf{k})[1 + \alpha E(\mathbf{k})] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \gamma(\mathbf{k}) \quad (3.26)$$

上式を $E(\mathbf{k})$ について解くと

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\mathbf{k})} - 1}{2\alpha} \quad (3.27)$$

の関係が得られる。これより電子の群速度を求めると

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{1}{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\mathbf{k})}} \quad (3.28)$$

となり、非放物線性によって電子の速度は低下することが分かる。別の表現をすると、電子の有効質量が重くなるということもできる。

非放物線性は式(3.27)のように $E - k$ 関係を変更させるので、それに伴い、電子のエネルギー状態密度も影響を受ける。実際に式(3.26)より、エネルギー状態密度 $N(E)$ を求めると次式が得られる。

$$N(E) = \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{\gamma}}{4\pi^2 \hbar^3} (1 + 2\alpha E) \quad (3.29)$$

上式では、散乱によってスピンは保存されると仮定し、**スピン縮重度**の 2 は考慮に入れていない。式(3.29)より、非放物線性の因子 $(1 + 2\alpha E)$ によって状態密度が増加するために、非放物線性は散乱レートを増加させて散乱をより活性化させる役割を担っていると言える。一方、状態密度の増加は電子密度も増大させる。状態密度が小さいためにチャネル電子密度を十分に確保するには高ゲートバイアスが必要になることが問題視(**DOS ボトルネック**)されている III-V MOSFET では、一般に Γ 谷の非放物線係数 α_Γ は他の半導体材料よりも大きいと言われている。したがって、非放物線性を利用することで III-V MOSFET の DOS ボトルネックは致命的な問題にはならないことが指摘されている。以上のように、バンドの非放物線性は、MOSFET の様々な特性に影響を与えることから、解析バンドモデルにおいても、その適切なモデル化は不可欠である。非放物線性は、特に、III-V 族化合物半導体の伝導帯最下端谷 (Γ 谷) で顕著に現れる現象であるので、デバイス性能の最大化を目指す上で、その影響の解明は取り組むべき重要課題の一つと言える。

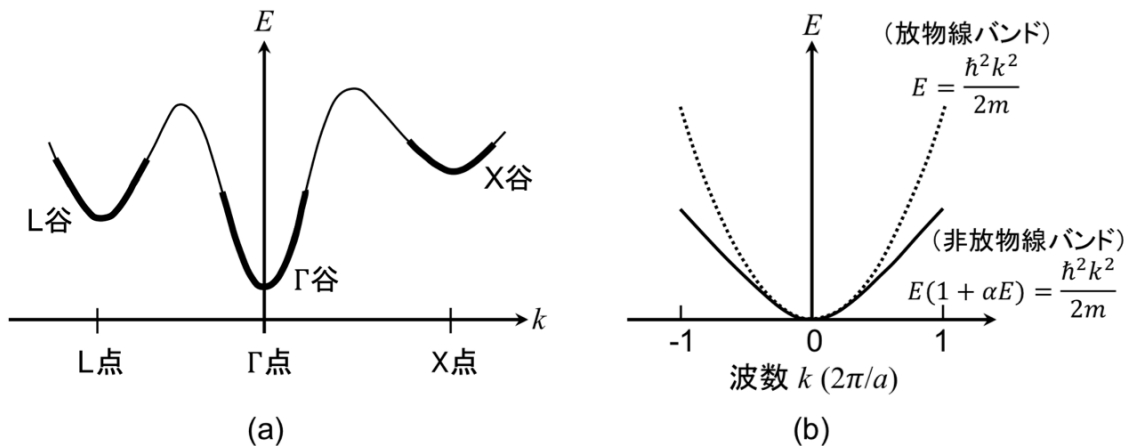


図 3.16 (a)GaAs フルバンド構造の伝導帯最下端バンドの拡大図. (b)解析バンドモデルで用いられる放物線バンド (点線)と非放物線バンド(実線)の比較。一般的には、放物線バンドの特徴である $E \propto k^2$ の関係から $E \propto k^1$ の関係に変更され、図(b)の実線のように、放物線バンドよりも低エネルギー領域に分散曲線が下がってくる傾向が見られる。

3.6 微細化シリコン MOSFET 内の非平衡分布関数の計算例

電子の分布関数と言うと我々は、フェルミ粒子に対して適用されるフェルミ・ディラック分布関数を想起する。その具体的な表現は式(2.9)で与えられ、フェルミエネルギーと電子エネルギー、そして絶対温度を用いて表すことができる。エネルギー空間や波数空間での形状についても、その数式表現から簡単に描くことができる。以上は主に 2 章で学んできた内容であるが、そこでも指摘したように、フェルミ・ディラック分布が成り立つのは熱平衡状態にある電子に対してであり、電圧を印加したような非熱平衡状態の電子に対しては、一般に分布関数を簡単な数式で表すことはできない。当然のことではないかとお叱りを受けそうであるが、本章ではその点を明確にした上で、その非平衡分布関数を求めるためのボルツマン輸送方程式並びにボルツマン電子輸送論について解説を行なった。本章の後半では、ボルツマン輸送方程式を具体的に解く方法の一つとして EMC 法について講述した。本章の終わりにあたって本節では、EMC 法を Si MOSFET に適用した例¹¹⁾を使って、実際の MOSFET 内で形成される非平衡分布関数の数値解を示し、ボルツマン電子輸送論の理解を深めるための参考情報として供与できればと考えている。

図 3.17 (a)に計算に用いた Si n 型 MOSFET のデバイス構造を示す。これはチャネルの上下に 2 つのゲート電極を持つ**ダブルゲート型 MOSFET**と呼ばれる新構造デバイスの 1 つであり、**DIBL (Drain Induced Barrier Lowering)**等の**短チャネル効果**の抑制に優れているなど、微細化に適したデバイス構造として実用化が期待されている。**チャネル長**は 8nm、**チャネル膜厚**は 3nm、そして**ゲート酸化膜厚**は 0.5nm の SiO₂とした。今回の例では、ドレイン電圧は 0.6V に固定し、ゲート電圧を変化させることで、ドレイン電流の ON/OFF 動作を実現させている。図 3.17 (b)に ON 電圧時のソースからドレイン方向への**ポテンシャル分布**を示している。これは Si/SiO₂ 界面における伝導帯の底のポテンシャルエネルギー分布に相当すると考えて良い。 $y = 10 \sim 18 \text{ nm}$ がチャネル領域に対応する。ポテンシャルエネルギーが最大となる位置、いわゆる**ボトルネック点**は $y_{\text{top}} = 11.5 \text{ nm}$ である。このときのデバイス内の電子の分布関数を計算した結果を図 3.17 (c)に示す。3.5 節で述べたように、Si 伝導帯は 6 つのエネルギー谷を X 点近傍に持っているが、図 3.17 (c)はその中の 1 つの谷に属する電子の分布関数を示したものである。そして、これが本章の目的としている位相空間 (y, k_y) 内の電子の非平衡分布関数の計算結果である。

チャネル内の分布関数の振る舞いを見やすくするため、図 3.17 (c)では、実空間の領域は $y = 10 \sim 22 \text{ nm}$ に限定して表示している(ソースとドレイン内の分布関数は極めて大きな値をとるため、表示基準をソースとドレインに合わ

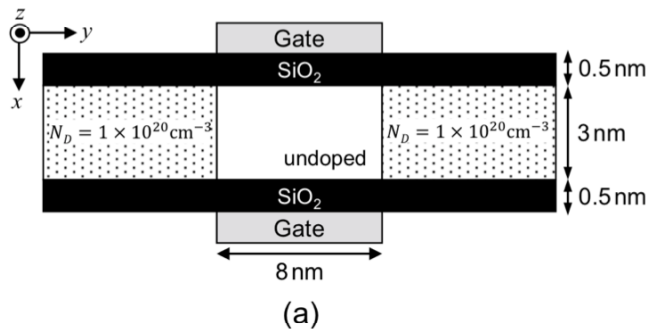
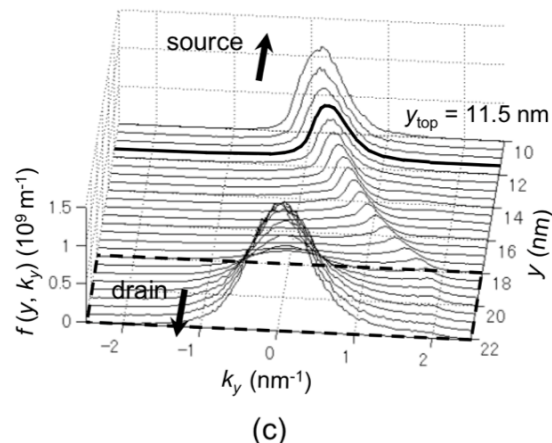
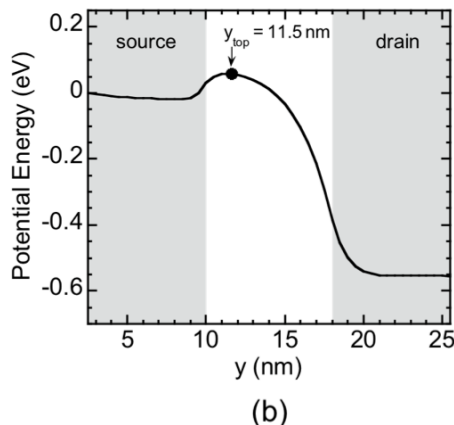


図 3.17 (a) ダブルゲート型 MOSFET. (b) ON 電圧時のポテンシャル分布. $y = 10 \sim 18 \text{ nm}$ がチャネル領域に対応する. (c) ON 電圧時のデバイス内の非平衡分布関数の計算結果. チャネル内での電子の加速と散乱によるエネルギー緩和の様子が描かれている¹¹⁾.



せるとチャネル部の結果が全く見えなくなってしまう)。図 3.17 (b)のポテンシャル分布と合わせて見ると、次のように興味深い現象が分布関数の振る舞いという形で視覚的に確認できる。まず、 $y_{\text{top}} (= 11.5 \text{ nm})$ よりも右側のチャネル内では電子は電界により加速されるはずであるが、同図(c)の分布関数を見ると、該当する領域で確かに分布関数のピークが高波数領域に移り電子が加速を受けているが、それと同時に分布関数自体が k_y 空間で広がっていく様子が得られている。これは加速によって電子の運動エネルギーが増大するとフォノン散乱が起りやすくなり、加速された電子が激しく**エネルギー緩和**し波数空間での電子分布に顕著な広がりを生じさせることによる。そしてドレイン内に入ると($y = 18 \sim 22 \text{ nm}$)、そこでは電界による加速は起こらないため、散乱による分布関数の緩和が徐々に進行し、ドレインの内部に深く入ったところでは左右対称となる熱平衡状態の分布関数、すなわちフェルミ・ディラック分布関数に近づく様子が観測される。

ボルツマン輸送方程式に基づく EMC 法は、現実のデバイスで起こっている電子輸送などの物理現象を、位相空間での非平衡分布関数の振る舞いとして視覚的に表現する能力に優れている。本節で紹介した例によってその一端が示されたが、これからはその長所を活かしたデバイス解析法の開発が展開されていくことを望んでいる。

4 章 ウィグナー電子輸送論

本章では、位相空間における量子力学的疑似分布関数、いわゆるウィグナー関数を導入し、その運動を記述する量子輸送方程式を基礎とした電子輸送論を解説する。さらにそれを応用したナノデバイスシミュレーション技術についても講述する。散乱については、3 章のボルツマン輸送方程式と同じ理論的枠組みで取り入れる。将来のナノデバイス開発への適用を念頭に置いて、電子の量子力学的輸送効果と原子レベルの散乱効果を精度良く、かつ効率的に取り入れることの重要性を議論していきたい。

4.1 ウィグナー関数理論

ウィグナー関数は相関グリーン関数と関係のある関数であるが、歴史的には、非平衡グリーン関数理論が生まれるずっと以前の1932年にユージン・ウィグナーにより導入されたものである¹²⁾。後述するように、ウィグナー関数は密度行列と親密な関係を持っており、さらに重要なこととして、古典ボルツマン分布関数との明確な類似性を示す。本節では、密度行列の量子力学的 Liouville 方程式をウィグナー変換することで、ウィグナー関数の満たす方程式を導出し、ウィグナー関数を密度行列の位相空間上での表現とみなす。

位置表示の密度行列

次式で定義される密度行列 $\rho(x, x', t)$ を導入する。

$$\rho(x, x', t) = \sum_j P_j \varphi_j(x, t) \varphi_j^*(x', t) \quad (4.1)$$

これは異なる位置での波動関数、 $\varphi_j(x, t)$ と $\varphi_j(x', t)$ を用いることで、位置に関する相関を取り入れた表現になっている。すなわち、式(4.1)で定義される位置表示の密度行列は、量子力学の本質的性質である波動関数の非局所性を記述する電子状態関数である。 P_j は多数の電子が存在する場合、状態 j を統計的にとる確率になる。 $\varphi_j(x, t)$ はその状態 j の一電子波動関数で、次のシュレディンガー方程式を満たす。

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_j(x, t)}{\partial t} = H(x, t) \varphi_j(x, t) \quad (4.2)$$

本書では、電子のハミルトニアン H は 1.3 節で定義した式(1.21)より、次の 1 次元有効質量ハミルトニアンで与えることにする。

$$H(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \quad (4.3)$$

ここで m は電子の有効質量を表し、 $U(x, t)$ はポテンシャルエネルギー分布を表す。

密度行列の時間的変化は、式(4.1)を時間微分し、それに一電子シュレディンガー方程式(4.2)を用いると以下のよう表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} &= \sum_j P_j \left[\frac{\partial \varphi_j(x, t)}{\partial t} \varphi_j^*(x', t) + \varphi_j(x, t) \frac{\partial \varphi_j^*(x', t)}{\partial t} \right] \\ &= \sum_j P_j \left[\frac{1}{i\hbar} H(x, t) \varphi_j(x, t) \varphi_j^*(x', t) + \varphi_j(x, t) \left(\frac{-1}{i\hbar} \right) H^*(x', t) \varphi_j^*(x', t) \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(x, t) - H^*(x', t)] \rho(x, x', t) \end{aligned} \quad (4.4)$$

ここで、 $H(x, t)$ および $H^*(x', t)$ はそれぞれ $\varphi_j(x, t)$ と $\varphi_j^*(x', t)$ のみに作用することに注意する。式(4.3)の有効質量ハミルトニアンを上式に代入すると、密度行列の運動方程式、すなわち密度行列の量子力学的 Liouville 方程式が次式のように求められる。

$$\frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) + U(x, t) - U(x', t) \right] \rho(x, x', t) \quad (4.5)$$

ここで、系の非局所性を強調するために、変数 x と x' を重心座標 $R = (x + x')/2$ と相対座標 $u = x - x'$ に変換する。このとき微分演算子は次のように変形される。

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial}{\partial u}, \quad \frac{\partial}{\partial x'} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\partial}{\partial u} \quad (4.6)$$

さらに上式より

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x'^2} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial}{\partial R} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} \quad (4.7)$$

となる。したがって、密度行列の量子力学的 Liouville 方程式(4.5)を、重心座標 R と相対座標 u を用いて書き直すと次式となる。

$$i\hbar \frac{\partial \rho\left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2}\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2 \rho\left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2}\right)}{\partial R \partial u} + \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \rho\left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2}\right) \quad (4.8)$$

ここで、簡単のため時間の変数 t は省略している。

ウィグナー関数の定義

ウィグナー関数は、上記で導入した位置表示の密度行列を相対座標に関するフーリエ変換した関数として次式で定義される¹²⁾。

$$f_w(k, R) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho\left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2}\right) e^{-iku} du \quad (4.9)$$

一方、密度行列は、ウィグナー関数の波数 k に関する逆フーリエ変換として次式のように表される。

$$\rho\left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2}\right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_w(k, R) e^{iku} dk \quad (4.10)$$

式(4.9)から分かるように、ウィグナー関数は位相空間 (k, R) で定義された電子の量子統計関数である。しかしながらウィグナー関数は実数値関数ではあるが、負の値を取り得ることが知られている。古典的極限では、分布関数、すなわち電子の存在確率が負になることはあり得ないことから、ウィグナー関数は厳密には“分布関数”と呼ぶには適していない。したがって上記の混乱を避けるために、式(4.9)の関数は、“ウィグナーの疑似分布関数”あるいは単純に“ウィグナー関数”と呼ぶべきであろう。本書では、より単純な“ウィグナー関数”と呼ぶことにする。

さて、ウィグナー関数が負値を取ることの物理的意味について考察しておこう。先ほども述べたように、古典的描像では、分布関数は負の値になることはあり得ない。したがって、ウィグナー関数が負値を取る場合には、その電子系が古典的描像ではなく量子的描像、たとえばトンネル効果や干渉効果が観測可能な状態にあると解釈することができる。また、ウィグナー関数は位置と波数(運動量)の関数で定義されているが、不確定性原理によれば、両者、すなわち位置と運動量を同時に決めることはできないとされている。ウィグナー関数は、通常は時間発展に連れて局所的な位置と運動量の軌跡のなごりは消えて、位相空間内で広がり各セルの平均座標と平均運動量で密度行列を表現したものになる。したがって、ウィグナー関数は位相空間上で完全に局在化した位置と運動量の関数になることは防がれており、いわゆる不確定性原理に矛盾する関数にはならないと考えられている。

ウィグナー輸送方程式

ウィグナー関数の振る舞いを支配する運動方程式、いわゆるウィグナー輸送方程式 (Wigner Transport Equation: WTE) は、式(4.8)の密度行列の運動方程式を相対座標 u でフーリエ変換することで求められる。ここでは結果の式のみを示すことにして、導出過程の詳細については文献[13]をご参照いただきたい。

$$\frac{\partial f_w(k, R)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_w(k, R)}{\partial R} = Q f_w(k, R) \quad (4.11)$$

上式がウィグナー輸送方程式(WTE)である。右辺に現れる $Q f_w(k, R)$ は量子発展項(quantum evolution term)と呼ばれ、次式で与えられる。

$$Q f_w(k, R) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(R, k - k') f_w(k', R) \quad (4.12)$$

この項は、非局所ポテンシャル項 $V(R, k - k')$ とウィグナー関数 $f_w(k', R)$ の積を波数積分した形となっている。非局所ポテンシャル項は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} V(R, k - k') &= i \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-i(k-k')u} \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \\ &= 2 \int_0^{\infty} du \sin[(k - k')u] \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.13)$$

式(4.13)は、電子に作用する実効的なポテンシャルは、その電子が存在する位置の局所的なポテンシャルだけでなく、空間的に十分に離れた位置のポテンシャルの寄与まで入った形で決まることを表している。これが非局所ポテンシャル項と呼ばれる所以であり、本節の冒頭でも述べたように、量子力学の本質的な性質である波動関数の非局所性がもたらす項となっている。非局所ポテンシャル項 $V(R, k - k')$ が量子力学的効果を含んだ表現になっていることから、式(4.11)は量子力学的ボルツマン方程式とも呼ばれる。次節で詳しく説明するように、 $\hbar$ を 0 とする古典的な極限では、式(4.11)は 3 章で導出した古典ボルツマン輸送方程式に完全に一致することが示される。 $V(R, k - k')$ 項の数値離散化法については、後の 4.3 節で詳述する。

さて、式(4.11)の両辺を波数 k で積分した式は、電子密度 $n(R)$ と電流密度 $j(R)$ を次のように定義すると、連続の式になることを示すことができる。

$$n(R) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f_w(k, R) \quad (4.14)$$

$$j(R) = 2e \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f_w(k, R) \quad (4.15)$$

これらの定義は、古典的な分布関数によるものと全く同じ表現になっており、ウィグナー関数が量子力学的疑似分布関数と呼ばれるゆえんである。上の 2 式の定義から連続の式が得られることを、少し詳しく説明しておこう。式(4.11)の両辺を波数 k で積分するが、それを省略せずに書くと次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{dk}{2\pi} f_w(k, R) + \frac{\partial}{\partial R} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f_w(k, R) &= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{dk'}{2\pi} V(R, k - k') f_w(k', R) \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} f_w(k', R) \int \frac{dk}{2\pi} i \int du e^{-i(k-k')u} \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} f_w(k', R) i \int du e^{ik'u} \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \int \frac{dk}{2\pi} e^{-iku} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} f_w(k', R) \int du e^{ik'u} \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \delta(u) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} f_w(k', R) [U(R) - U(R)] \\ &= 0 \end{aligned}$$

上式の右辺は $\int Q f_w(k, R) dk / 2\pi = 0$ 、つまり量子発展項の波数積分はゼロになるという重要な結論を表している。上式の左辺に式(4.14)の電子密度と式(4.15)の電流密度の定義式を代入すると、次の 1 次元の連続の式が導かれる。

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{e} \frac{dj}{dR} = 0 \quad (4.16)$$

4.2 ウィグナー輸送方程式の基本的性質

ウィグナー輸送方程式は量子力学的ボルツマン方程式とも呼ばれていることから分かるように、古典ボルツマン輸送方程式との類似性が強い。その性質を利用して、古典輸送モデルに量子補正を加える表現が提案されている。「量子補正ドリフト拡散法」や「量子補正モンテカルロ法」と呼ばれており、従来の計算資源を有効に活用できることから多大の関心を集めている^{10,13)}。本節では、ウィグナー輸送方程式の基本的な性質について説明する。ウィグナー関数理論をより深く理解するための一助となれば幸甚である。

量子発展項 Qf_w の微分表現

前節では、非局所ポテンシャル項 $V(R, k - k')$ は量子力学的効果を含んだ重要な項であることを述べたが、本節では、その非局所ポテンシャル項を相対座標 u に関してテイラー展開することで、量子力学的効果を引き起こす量子補正項を明確化させ、古典ボルツマン輸送方程式との相違点について論述する¹²⁾。

テイラー展開を行う非局所ポテンシャル項を再度以下に記す。

$$V(R, k - k') = i \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-i(k-k')u} \left[U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) \right] \quad (4.17)$$

上式中のポテンシャルエネルギー分布 $U(R + u/2)$ と $U(R - u/2)$ を相対座標 u に関してテイラー展開すると次のようになる。

$$U\left(R + \frac{u}{2}\right) = U(R) + \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(u/2)^{\alpha+1}}{(\alpha+1)!} \frac{d^{\alpha+1}U(R)}{dR^{\alpha+1}} \quad (4.18)$$

$$U\left(R - \frac{u}{2}\right) = U(R) + \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(-u/2)^{\alpha+1}}{(\alpha+1)!} \frac{d^{\alpha+1}U(R)}{dR^{\alpha+1}} \quad (4.19)$$

これら2式の両辺を引き算すると

$$U\left(R + \frac{u}{2}\right) - U\left(R - \frac{u}{2}\right) = 2 \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{u}{2}\right)^{2\alpha+1}}{(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \quad (4.20)$$

となるので、これを式(4.17)に代入すると、非局所ポテンシャル項は次式のように微分形で表すことができる。

$$\begin{aligned} V(R, k - k') &= 2i \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2\alpha+1}}{(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \int_{-\infty}^{\infty} du u^{2\alpha+1} e^{-i(k-k')u} \\ &= 2i \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(1/2)^{2\alpha+1}}{(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{1}{i^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}}{\partial k'^{2\alpha+1}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-i(k-k')u} \right) \\ &= 4\pi i \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{2i}\right)^{2\alpha+1}}{(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}}{\partial k'^{2\alpha+1}} \delta(k - k') \end{aligned} \quad (4.21)$$

ただし、上式の導出の過程で次の関係を用いた。

$$\int_{-\infty}^{\infty} du u^{2\alpha+1} e^{-i(k-k')u} = \frac{1}{i^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}}{\partial k'^{2\alpha+1}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-i(k-k')u} \right) = \frac{2\pi}{i^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}}{\partial k'^{2\alpha+1}} \delta(k - k') \quad (4.22)$$

式(4.21)を量子発展項(式(4.12))に代入すると

$$Qf_w(k, R) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} 4\pi i \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{2i}\right)^{2\alpha+1}}{(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}}{\partial k'^{2\alpha+1}} \delta(k - k') f_w(k', R)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2i}{\hbar} \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(1/2i)^{2\alpha+1}}{(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}f_w(k,R)}{\partial k^{2\alpha+1}} \\
&= \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(-1)^\alpha}{4^\alpha(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}f_w(k,R)}{\partial k^{2\alpha+1}}
\end{aligned} \tag{4.23}$$

となる。したがって、ウィグナー輸送方程式は次式のように微分表現で表すことができる¹²⁾。

$$\frac{\partial f_w(k,R)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_w(k,R)}{\partial R} - \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(-1)^\alpha}{\hbar 4^\alpha(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}f_w(k,R)}{\partial k^{2\alpha+1}} = 0 \tag{4.24}$$

式(4.11)–(4.13)と式(4.24)は完全に等価な輸送方程式である。

ここで式(4.24)の左辺第3項の和を零次の成分($\alpha = 0$)と1次以上の成分($\alpha \geq 1$)に分けて表すと

$$\frac{\partial f_w(k,R)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_w(k,R)}{\partial R} - \frac{1}{\hbar} \frac{dU}{dR} \frac{\partial f_w}{\partial k} + \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\alpha+1}}{\hbar 4^\alpha(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}f_w(k,R)}{\partial k^{2\alpha+1}} = 0 \tag{4.25}$$

と書くことができる。上式の左辺第2項と第3項はそれぞれ、古典ボルツマン輸送方程式と同じ拡散項とドリフト項を表しており、このことから『左辺第4項が量子補正項である』ことが分かる。その左辺第4項は、ポテンシャルエネルギー分布 $U(R)$ が位置 R の2次関数以下の場合、 R による3次微分、5次微分、7次微分、... によってゼロになる、つまり量子補正項はゼロになることが分かる。

古典的極限 ($\hbar \rightarrow 0$)

ウィグナー輸送方程式の古典的極限 ($\hbar \rightarrow 0$) を考える。このとき電子は粒子として振る舞うと考えて、波数 k ではなく運動量 p を用いることにする。そこで式(1.10)の関係 ($p = \hbar k$) を用いて式(4.25)を変形すると

$$\frac{\partial f_w(p,R)}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f_w(p,R)}{\partial R} - \frac{dU}{dR} \frac{\partial f_w}{\partial p} + \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\alpha+1} \hbar^{2\alpha}}{4^\alpha(2\alpha+1)!} \frac{d^{2\alpha+1}U(R)}{dR^{2\alpha+1}} \frac{\partial^{2\alpha+1}f_w(k,R)}{\partial p^{2\alpha+1}} = 0 \tag{4.26}$$

となる。上式で $\hbar \rightarrow 0$ とすると左辺第4項が零となり、古典ボルツマン輸送方程式に一致する。

ウィグナー関数のモーメント(0次, 1次)

本節で議論するモーメントの定義を次式に示す。

$$\langle k^n \rangle = \int \frac{dk}{2\pi} k^n f_w(k,R) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \tag{4.27}$$

上式の定義から分かるようにモーメントは無数に存在するが、特に低次元のモーメントが重要である。0次のモーメント $\langle k^0 \rangle$ は電子密度、1次のモーメント $\langle k^1 \rangle$ は電子速度あるいは電流密度、そして2次のモーメント $\langle k^2 \rangle$ は電子エネルギー密度に対応する。ここでは、0次と1次のモーメントを理想的条件の下で定式化し、ウィグナー関数の性質について理解を深める助けとなるよう議論を展開する。

計算条件は絶対温度は0 Kとする。このとき、密度行列に含まれる状態 j をとる確率は統計的に1とすることができる。まず、このときの0次のモーメントを求めると次のようになる。

$$\begin{aligned}
\langle k^0 \rangle &= n(R) = \int \frac{dk}{2\pi} f_w(k,R) \\
&= \int \frac{dk}{2\pi} \int \rho\left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2}\right) e^{-iku} du \\
&= \int \frac{dk}{2\pi} \int \sum_j \varphi_j\left(R + \frac{u}{2}\right) \varphi_j^*\left(R - \frac{u}{2}\right) e^{-iku} du \\
&= \sum_j \int du \left\{ \varphi_j\left(R + \frac{u}{2}\right) \varphi_j^*\left(R - \frac{u}{2}\right) \int \frac{dk}{2\pi} e^{-iku} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_j \int du \left\{ \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) \delta(u) \right\} \\
&= \sum_j \varphi_j(x) \varphi_j^*(x)
\end{aligned} \tag{4.28}$$

上式は各位置(x)で各量子準位(j)の確率密度を足し合わせた表現になっており、 $T = 0 \text{ K}$ での電子密度分布を計算する標準的な式と一致している。

次に、1 次のモーメントを求める。少々複雑な式の変形を伴うが、なるべく省略しないで記すと次のようになる。

$$\begin{aligned}
\langle k^1 \rangle &= \int \frac{dk}{2\pi} k f_w(k, R) \\
&= \int \frac{dk}{2\pi} k \int \rho \left(R + \frac{u}{2}, R - \frac{u}{2} \right) e^{-iku} du \\
&= \int \frac{dk}{2\pi} k \int \sum_j \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) e^{-iku} du \\
&= \sum_j \int du \left\{ \left(\int \frac{dk}{2\pi} k e^{-iku} \right) \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) \right\} \\
&= \sum_j \int du \left\{ i \frac{\partial}{\partial u} \left(\int \frac{dk}{2\pi} e^{-iku} \right) \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) \right\} \\
&= i \sum_j \int du \frac{\partial}{\partial u} \left\{ \delta(u) \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) \right\} \\
&= i \sum_j \frac{\partial}{\partial u} \left\{ \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) \right\} \Big|_{u=0} \\
&= i \sum_j \left\{ \frac{\partial \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right)}{\partial u} \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right) \Big|_{u=0} + \varphi_j \left(R + \frac{u}{2} \right) \frac{\partial \varphi_j^* \left(R - \frac{u}{2} \right)}{\partial u} \Big|_{u=0} \right\}
\end{aligned}$$

ここで、 $R + u/2 = x$ および $R - u/2 = x'$ であることを用いると、

$$\begin{aligned}
&= i \sum_j \left\{ \frac{\partial \varphi_j(x)}{\partial x} \frac{dx}{du} \varphi_j^*(x') + \varphi_j(x) \frac{\partial \varphi_j^*(x')}{\partial x'} \frac{dx'}{du} \right\} \Big|_{u=0 (x=x')} \\
&= \frac{i}{2} \sum_j \left\{ \frac{\partial \varphi_j(x)}{\partial x} \varphi_j^*(x) - \varphi_j(x) \frac{\partial \varphi_j^*(x)}{\partial x} \right\}
\end{aligned} \tag{4.29}$$

となる。したがって上式に $\hbar/m$ を掛けて、速度に関するモーメント($\langle \hbar k/m \rangle$)を計算すると

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\hbar k}{m} \right\rangle &= \frac{i\hbar}{2m} \sum_j \left\{ \frac{\partial \varphi_j(x)}{\partial x} \varphi_j^*(x) - \varphi_j(x) \frac{\partial \varphi_j^*(x)}{\partial x} \right\} \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \sum_j \left\{ \varphi_j(x) \frac{\partial \varphi_j^*(x)}{\partial x} - \frac{\partial \varphi_j(x)}{\partial x} \varphi_j^*(x) \right\}
\end{aligned} \tag{4.30}$$

という式が得られる。これは1章の1.4節で述べた確率流密度 $\mathbf{S}$ の式に一致している。すなわち、ウィグナー関数の1次のモーメントは、量子力学的な電流密度に対応する物理量を与えることが分かる。

このように0次と1次のモーメントを実際に計算することにより、ウィグナー関数は、電子の波動関数と密接に関連した量子統計関数であることが実感できるものと期待している。

4.3 非局所ポテンシャル項の数値離散化法

ウィグナー輸送方程式を再度まとめて以下に示す。

$$\frac{\partial f_w(k, x)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_w(k, x)}{\partial x} = Q f_w(k, x) \quad (4.11)$$

$$Q f_w(k, x) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(x, k - k') f_w(k', x) \quad (4.12)$$

$$V(x, k - k') = 2 \int_0^{\infty} du \sin[(k - k')u] \left[U\left(x + \frac{u}{2}\right) - U\left(x - \frac{u}{2}\right) \right] \quad (4.13)$$

上式では便宜上、重心座標 R を通常的位置変数 x で表現し直している。ウィグナー輸送方程式を数値的に解く場合、位相空間 (x, k) 、すなわち実空間と波数空間を、図 4.1 に示すように有限の幅で離散化する必要がある。本節では、式(4.13)の非局所ポテンシャル項に**離散フーリエ変換**を適用した場合の離散化法について説明を行う。離散フーリエ変換を用いた離散化スキームでは、実空間と波数空間の離散化条件の間に強い相関が現れるため、両空間の離散化には慎重な取り扱いが必要になる。本節では、従来に報告された離散化法¹³⁻¹⁵⁾に比べて自由度が高く、実際のナノデバイスへの応用に適した離散化法を紹介する¹⁶⁾。なお、ウィグナー輸送方程式の離散化手法は未だ改善の余地が残されており、今後も新しい離散化法の提案が行われていくものと期待している。

実空間の離散化

位相空間の分割幅 Δ_x と Δ_k は、離散フーリエ変換を用いるため一定にすることが必須になる。それでは実空間の離散化から説明を始める。まず、位置に関しては、デバイス領域 $(0 \leq x \leq L)$ を均一な分割幅 Δ_x を用いて次のように離散化する。

$$x \in \{0, \Delta_x, 2\Delta_x, \dots, L\} \quad (4.31)$$

このときの全分割点数は $N_x = L/\Delta_x + 1$ と一意に決まる。一方、相対座標 u の離散化については、以下で述べるように、従来の離散化法¹³⁻¹⁵⁾に比べて自由度の高い方法を採用している。従来の方法では、相対座標 u は $U(x \pm u/2)$ という形で入ってくるため、式(4.31)で設定した位置 x の離散化点とポテンシャル分布 U の離散化点が一致するようにするためには、

$$u \in \{0, 2\Delta_x, 4\Delta_x, \dots, 2N_u\Delta_x\} \quad (4.32)$$

と、位置 x の 2 倍の距離 $2\Delta_x$ でサンプリングしていた。ここで、 N_u は相対座標 u の任意の分割数を表す。このように u をサンプリング周期 $2\Delta_x$ で離散化するので $U(x + u/2) - U(x - u/2)$ を u でフーリエ変換したポテンシャル項(4.13)は、波数空間で $2\pi/2\Delta_x$ の周期をもつようになる。したがって波数空間の領域は $-\pi/2\Delta_x \leq k \leq \pi/2\Delta_x$ となり、またその分割幅は $\Delta_k = \pi/N_u\Delta_x$ と決められる。 N_k は波数空間の分割数である。この方法は数学的には全く問題はないが、波数空間の領域が実空間の分割幅 Δ_x に依存する、具体的には逆比例して広がるために、波数空間の領域を広く

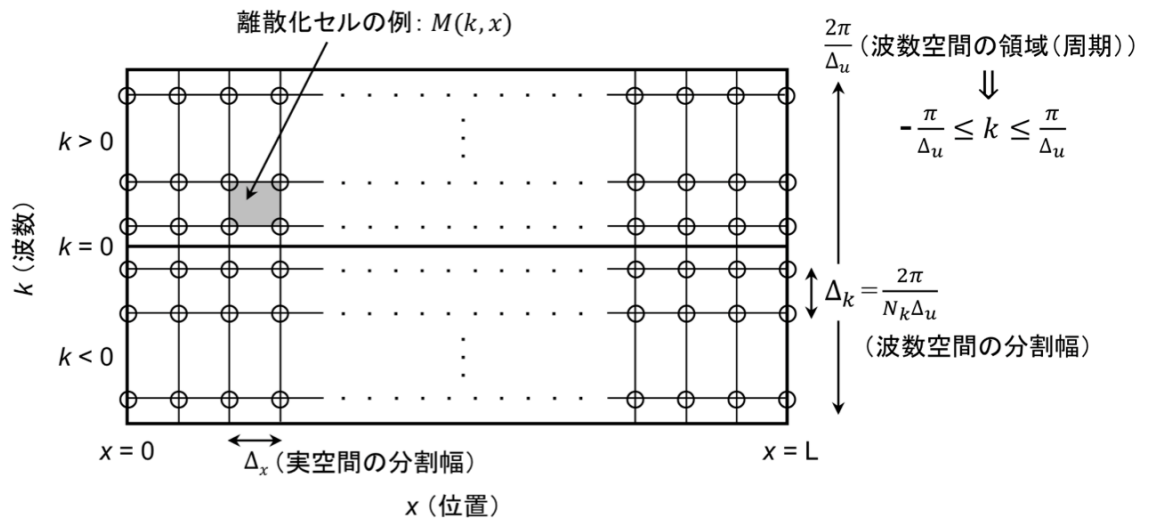


図 4.1 位相空間の離散化. 横軸は位置、縦軸は波数を表す。 Δ_x および Δ_k はそれぞれ、位置と波数の分割幅を示す。

とる必要がある場合^{b)}には、実空間の分割幅を細かく設定しないといけなくなる。この場合、位相空間全体の分割数が増え計算量が膨大になるために、できれば実空間の分割幅を変化させることなく、波数空間の領域と分割幅を任意に設定できる離散化法が望まれる。そこで、新たな近似の導入は必要となるが、上述したような波数空間の離散化を任意に行える手法を考案したので以下で説明する¹⁶⁾。

アイデアはいたって単純である。ポテンシャル分布 U の離散化点を式(4.31)の位置 x の離散化点に一致させることは諦めて、相対座標の離散化を、実空間の分割幅 Δ_x とは無関係に以下のように行うという考え方である。

$$u \in \{0, \Delta_u, 2\Delta_u, \dots, N_u\Delta_u\} \quad (4.33)$$

ここで Δ_u は相対座標の分割幅で、 N_u は分割数を表す。この Δ_u を Δ_x とは独立したパラメータにすることで、後で詳しく述べるように、 Δ_u と離散フーリエ変換の関係にある波数空間の離散化を任意に実行できるようにすることができる。しかし上記の方法では、 $n\Delta_x \pm i\Delta_u/2$ の位置でのポテンシャル分布の値が求められないという問題が生じる。この問題点は、その位置のポテンシャルの値を隣接する両側の 2 点間の値で補間して与えるという方法で解決することができる。これは近似にはなるが、MOSFET では図 3.17(b)に示すように、ソースからドレイン方向のポテンシャル分布は連続的であつ滑らかに変化するので、通常の計算条件では大きな問題にはならないと考えている。

波数空間の離散化

相対座標 u の離散化を式(4.33)、すなわちサンプリング周期 Δ_u で離散化する場合、波数空間の領域は $2\pi/\Delta_u$ の周期をもつので、その領域の広さは $-\pi/\Delta_u \leq k \leq \pi/\Delta_u$ となる。この領域を任意の分割点数 N_k で、次のように離散化する。

$$\begin{aligned} k(j) &= \left\{ -\frac{\pi}{\Delta_u} + \frac{2\pi}{N_k\Delta_u} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right\} \\ &= \left\{ \frac{2\pi}{\Delta_u} \left(\frac{j - 1/2}{N_k} - \frac{1}{2} \right) \right\}, \quad j = 1, 2, \dots, N_k \end{aligned} \quad (4.34)$$

このとき波数空間の分割幅は $\Delta_k = 2\pi/N_k\Delta_u$ である。上式では分割点数 N_k は偶数であるとし、 $k_x = 0$ をまたいでその正と負の要素数が同じになるように離散化している^{13,14)}。

以上では、 N_u と N_k はともに任意の整数としている。 N_u と N_k の関係については様々な議論があり、それぞれの値を実際のシミュレーションで与えるための基準となる公式は今の所存在していない。 N_k については計算結果が変化しない程度に十分に大きな値を設定し、 N_u については次の関係式^{13, 16)}を参考にして決めることになる。

$$N_u = \frac{1}{2} N_k \quad (4.35)$$

非局所ポテンシャル項の離散化

上記で述べた実空間と波数空間の離散化スキームを用いて、式(4.13)の非局所ポテンシャル項の離散化式を求める。 k と k' の離散化指標を j と j' とし、 x の離散化指標を n として、それらを V の添字に表すことにすると

$$V_{n,j-j'} = 2\Delta_u \sum_{i=0}^{N_u} \sin[i(j-j')\Delta_k\Delta_u] \left[U\left(n\Delta_x + \frac{i\Delta_u}{2}\right) - U\left(n\Delta_x - \frac{i\Delta_u}{2}\right) \right] \quad (4.36)$$

となる。これを量子発展項 $Qf_w(k, R)$ に代入すると

$$Qf_w(k, x) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} \frac{\Delta_k}{2\pi} V_{n,j-j'} f_{j',n}$$

^{b)} 有効質量の重いチャネル材料を採用した場合や高いドレイン電圧を印加した場合など、電子の波数が領域 $-\pi/2\Delta_x \leq k \leq \pi/2\Delta_x$ を越えてしまう場合。

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} \frac{2}{N_k} \sum_{i=0}^{N_u} \sin[i(j-j')\Delta_k\Delta_u] \left[U\left(n\Delta_x + \frac{i\Delta_u}{2}\right) - U\left(n\Delta_x - \frac{i\Delta_u}{2}\right) \right] f_{j',n} \\
&= -\frac{1}{\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} \bar{V}_{n,j-j'} f_{j',n}
\end{aligned} \tag{4.37}$$

となる。ここで $\Delta_k = 2\pi/N_k\Delta_u$ の関係を使った。これより、離散化した非局所ポテンシャル項 $\bar{V}_{n,j-j'}$ を以下の式で表すことにする。

$$\bar{V}_{n,j-j'} = \frac{2}{N_k} \sum_{i=0}^{N_u} \sin[i(j-j')\Delta_k\Delta_u] \left[U\left(n\Delta_x + \frac{i\Delta_u}{2}\right) - U\left(n\Delta_x - \frac{i\Delta_u}{2}\right) \right] \tag{4.38}$$

なお上式で $\Delta_u = 2\Delta_x$ とすれば、従来の離散化法と同じ表現が得られることが容易に確認できる。定常状態のウィグナー輸送方程式を**ブロック三対角型の行列方程式**で表し、**ガウスの消去法**などを用いて解く場合には、式(4.11)の左辺第2項の離散化が必要になる¹³⁾が、これについては付録Aで説明を行なっている。

4.4 ウィグナー・モンテカルロ(WMC)法

ここまで電子の散乱効果については考慮してこなかった。ウィグナー輸送方程式を実際のナノデバイスに適用するには、散乱過程を考慮することが不可欠になる。次式に散乱項 $Cf_w(k, x)$ を、ボルツマン輸送方程式との類推により形式的に付け加えたウィグナー輸送方程式を記す。

$$\frac{\partial f_w(k, x, t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_w(k, x, t)}{\partial x} = Qf_w(k, x, t) + Cf_w(k, x, t) \tag{4.39}$$

本書では、 $Cf_w(k, x, t)$ は3章のボルツマン輸送方程式で定式化した散乱項 $(\partial f/\partial t)_{\text{scatt}}$ と同じ理論的枠組みで取り入れることにする。そのことを明記するために、式(4.39)を「**ウィグナー・ボルツマン輸送方程式**」と呼ぶことがある。式(4.39)の表現は、**インコヒーレント輸送**を記述する非平衡グリーン関数理論から直接導出することも可能であり、その場合は、右辺の散乱項の具体的な表現を得ることができる¹⁷⁾。

ウィグナー輸送方程式を具体的なデバイスへ適用する試みが本格的に始められたのは1980年代に入ってからである^{14, 15)}。式(4.11)-(4.13)に前節で一部説明した有限差分法に基づく離散化を実行し(加えて付録A参照)、まず2重障壁構造の共鳴トンネルダイオードに適用して、負性抵抗が再現されることの実証からポアソン方程式との自己無撞着計算、さらには電流の過渡応答解析まで、活発な研究活動が繰り広げられた。その後、量子細線トランジスタや量子井戸構造半導体レーザへの適用も進められ、量子サイズ構造半導体デバイスの量子輸送の解明に貢献してきた¹³⁾。しかしながら著者の理解では、さらなる汎用性に欠けていたことや、実験結果および他の計算手法との対応が必ずしも良くないこと、さらに電子の散乱過程を物理モデルに立脚しない緩和時間近似で取り入れていたこと等の理由から、計算手法の開発・検討が一段落ついた頃から、その研究活動も沈静化することとなった。

そのような状況の中で最近、ウィグナー輸送方程式(4.39)をモンテカルロ法で解くアルゴリズム「**ウィグナー・モンテカルロ(WMC)法**」が提案された¹⁸⁻²²⁾。その詳細は後ほど述べていくが、従来の手法に比べてWMC法は、粒子モデルに電子の波動性を取り入れることが可能であること、非平衡グリーン関数法など他の計算手法との対応が良いこと、またモンテカルロ法の強みである微視的物理モデルに基づく散乱過程のモデル化が可能であることなどの利点から、現実的かつ新規のナノデバイスシミュレーション技術として再び注目を集めている。ゲート長が本格的なナノスケール領域に突入したMOSFETへの適用も報告されており^{21, 22)}、サブスレッショルド時の**ソース・ドレイン間直接トンネリング**の評価などに力を発揮している¹⁰⁾。現時点でWMC法は大きく分けて2つの方法があり、米国アリゾナ州立大学のシフレン(L. Shifren)ら¹⁸⁾によって提案された各粒子に**affinity(アフィニティ)**と呼ばれる変数を新たに設定する方法と、オーストリア工科大学のネヂャルコフ(M. Nedjalkov)ら¹⁹⁾によって提案された非局所ポテンシャル項を散乱項として取

り扱う方法がある。後者の方法は、ポテンシャル分布を緩やかに変化する(slow)成分とヘテロ接合等の急峻に変化する(fast)成分に分離し、その fast 成分を予め散乱確率に組み込む手法となっているため、ポテンシャル分布の自己無撞着性を厳密に取り入れた解法とはなっていない。一方、前者の方法は、フランス・パリ大学のクエルリオズ(D. Querlioz)ら²⁰⁻²²⁾によって完全自己無撞着計算法へと発展させられ、また著者ら¹⁰⁾はパリ大学の改良型手法を、新チャネル材料として期待されている III-V MOSFET へ適用しソース・ドレイン間直接トンネリングの問題を定量的に議論している。本節では、シフレン - クエルリオズらの affinity 法を採用し、その計算技術の詳細について説明を行なっていく。次の 4.5 節では、WMC 法をシリコンナノワイヤ MOSFET (SNW-MOSFET) へ適用した結果を紹介する。SNW-MOSFET のような新型ナノ構造のチャネルを有するデバイスでは、電子の量子輸送効果と原子レベルの散乱効果を高精度に取り入れた解析が欠かせないことを指摘するとともに、計算の安定化の実現と原子論との融合が WMC 法の課題となってくることを述べていきたい。

新しい粒子変数 affinity

4.1 節で述べたように、ウィグナー関数は負値を取る。古典的描像では電子の存在確率が負になることはあり得ないことから、ウィグナー関数が負値をとる場合は量子干渉が起きていると解釈される。WMC 法では、この量子干渉現象を粒子モデルで記述するために、粒子の変数に新たに affinity と呼ばれる変数を導入する¹⁸⁾。すなわち、粒子の状態を表す変数として、従来の位置 x_i と波数 k_i に加えて、新しい変数 affinity A_i を追加し、これら 3 つの変数を持つ粒子の集合としてウィグナー関数を次式のように定義する¹⁸⁾。

$$f_w(k, x, t) = \sum_i \delta(x - x_i(t)) \delta(k - k_i(t)) A_i(t) \quad (4.40)$$

ここで Σ は全粒子 ($i = 1, 2, \dots, N$) で和を取ることを意味する。式(4.40)から分かるように、 A_i は系の全電荷分布に対して一つの粒子が持つ重みに対応している。ここで、 A_i に対する時間発展式を求めるために、図 4.1 の離散化された位相空間内の 1 つのセル $M(k, x)$ に属する粒子に対して式(4.40)の定義を表現し直すと、

$$f_w(k, x, t) = \sum_{i \in M(k, x)} A_i(t) \quad (4.41)$$

と書き改めることができる¹⁶⁾。ウィグナー輸送方程式(4.39)と対比するために上式を時間微分すると

$$\frac{\partial f_w(k, x, t)}{\partial t} = \sum_{i \in M(k, x)} \frac{dA_i(t)}{dt} \quad (4.42)$$

となるので、これより式(4.39)と(4.42)を比較すると、 A_i に時間変化をもたらす可能性のある因子は、当然のことながら次式の右辺に現れる 3 つ項になる。

$$\sum_{i \in M(k, x)} \frac{dA_i(t)}{dt} = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_w(k, x, t)}{\partial x} + Q f_w(k, x, t) + C f_w(k, x, t) \quad (4.43)$$

上式の右辺第 1 項は古典ボルツマン輸送方程式の拡散項と同じであるから、後述の通りこれは古典 MC 法と同様に取り扱うとして上式からは取り除く。右辺第 3 項の散乱項についても本書では古典ボルツマン輸送方程式と同じ理論的枠組みで取り入れるため、古典 MC 法と同じ手法で取り扱うとして上式からは取り除く。したがって A_i を時間変化させる因子は量子発展項 $Q f_w(k, x, t)$ のみとなり、その運動方程式を記すと次式となる^{16, 20)}。

$$\sum_{i \in M(k, x)} \frac{dA_i(t)}{dt} = Q f_w(k, x, t) \quad (4.44)$$

ここで

$$Q f_w(k, x, t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(x, k - k') f_w(k', x, t) \quad (4.45)$$

である。

次に、位置 x_i と波数 k_i の運動方程式が必要である。上で述べた通り、拡散項については古典 MC 法と同じ取り

扱いにするため、位置の運動方程式は古典論と同じく次式とする。

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\hbar k}{m} \quad (4.46)$$

一方、古典 MC 法では粒子に働く力となるポテンシャルエネルギー $U(x)$ の影響は、WMC 法では式(4.44)と(4.45)で述べたように、非局所ポテンシャル項 $V(x, k - k')$ を通して A_i の時間変化に使われるため、古典論とは異なり、粒子に働く力はゼロになる。すなわち、波数の運動方程式は

$$\frac{dk_i}{dt} = 0 \quad (4.47)$$

となる²¹⁾。上式は、粒子の速度は一定の等速運動を行うことを表している。しかし実際には散乱が起こった場合に波数の変化が生じる。

本節のまとめとして、WMC 法で解く自由走行時間中の粒子の運動方程式をまとめると次の 3 式となる²¹⁻²³⁾。

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\hbar k}{m} \quad (4.46)$$

$$\frac{dk_i}{dt} = 0 \quad (4.47)$$

$$\sum_{i \in M(k, x)} \frac{dA_i(t)}{dt} = Qf_w(k, x, t) \quad (4.44)$$

ただし

$$Qf_w(k, x, t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} V(x, k - k') f_w(k', x, t) \quad (4.45)$$

である。 Qf_w の数値解法は 4.3 節で述べた有限差分法に基づく離散化法を採用する。

以上が affinity を用いた WMC 法の概略である。本手法における粒子輸送のイメージは古典論と大きく異なっている。それを簡潔に述べると『等速運動(ドリフトなし)する各粒子の A_i の変化によって輸送と量子効果を記述する』と言えることができる。この A_i を導入した粒子を「**擬粒子**」と呼ぶことにする。

擬粒子の注入

従来の古典 MC 法は、すべての粒子の affinity は常に“1”とする場合 ($A_i(t) = 1$) に対応する。これは離散化セル内に粒子が見つければ、そのセル内の粒子数を“1 個”カウントすることを意味している。これに対して WMC 法では、上述したように A_i の値が時間とともに変化し、“1”以外の実数値だけでなく負値も取るようになる。これによってウィグナー関数が負値を取り得るという性質を表現しているのである。

さて繰り返しになるが、WMC 法では式(4.44)～(4.47)に従って各粒子の時間発展を計算する。各粒子の運動は、 A_i を持つこと以外は古典粒子と同様に取り扱うため、それらは位相空間上では点粒子と考えるのが自然である。ところが数値計算を実行する場合、前項で述べたように、位相空間を離散化し微小なセルの集合で表すため、計算の途中では粒子が全く存在しない「**空のセル**」が出てくる可能性がある。このことは古典 MC 法では特に問題にならないが、WMC 法では以下に述べる理由から本質的な問題を引き起こす。

ここでは MOSFET やダイオードのように、電子が 2 つの電極間を走行するデバイスを考える。このとき従来の古典 MC 法では、左右の電極から、**電荷中性条件**を満たすように熱平衡状態の古典粒子 ($A_i = 1$) を注入させる。この様子を描いたのが図 4.2 (a)である。一方、WMC 法では、このような電極からの古典粒子の注入に加えて、量子発展項の要請から、空のセルに対して特定の条件下では、 $A_i = 0$ の擬粒子を注入する必要がある。その詳細を図 4.2 (b)に描いている。同図を用いて、上述した「空のセル」問題について説明する。

4.1 節の最後で述べたように量子発展項の波数積分は必ずゼロになる。このことは式(4.44)より、 A_i の時間変化を波数方向の全セルで足し合わせるとゼロになるという条件を課すことになる。ここでもし図 4.2 (b)に示すように、粒子が

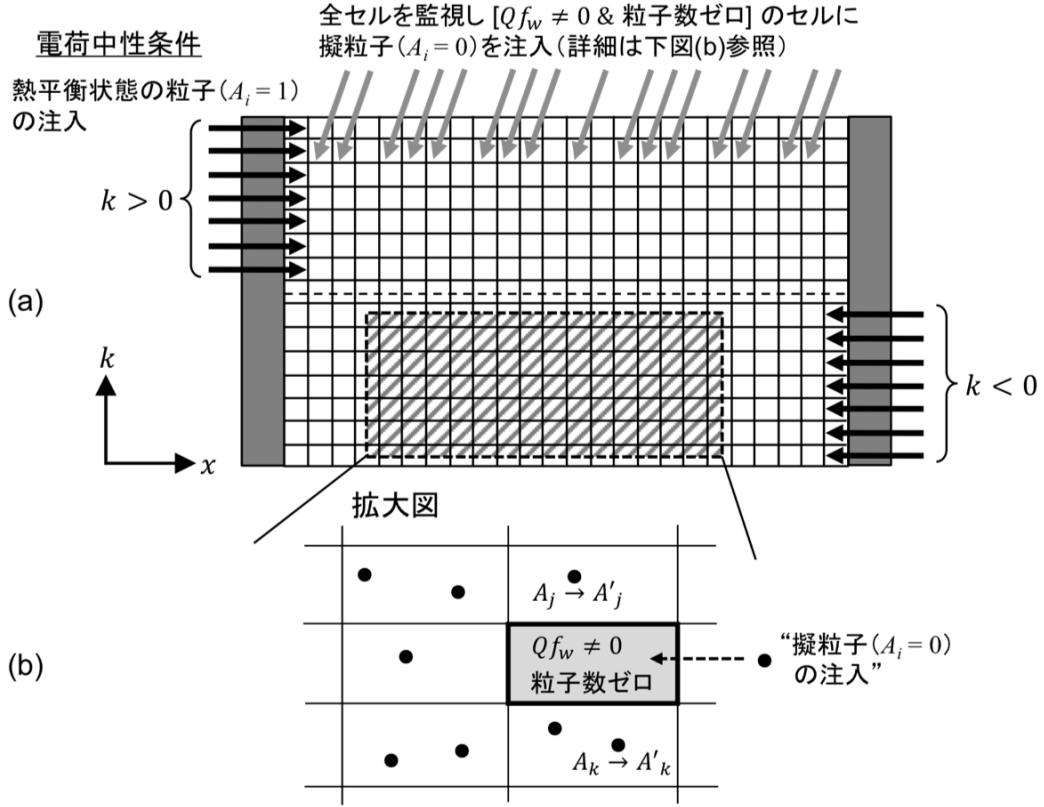


図 4.2 古典粒子および擬粒子の注入. (a)古典 MC 法では、左右の電極から、電荷中性条件を満たすように熱平衡状態の古典粒子 ($A_i = 1$) を注入する. (b)WMC 法では「空のセル」に対して特定の条件下では、 $A_i = 0$ の“擬粒子”を注入する.

全く存在しないセルがあったとする。そのセルの Qf_w の値がゼロである場合には A_i の時間変化もゼロになるため、たとえそのセルに粒子がいなくても問題はない。しかし Qf_w が有意の値 ($\neq 0$) を取るにも関わらず粒子がない場合には、本来取り入れるべき A_i の時間変化成分を見逃してしまい、その結果として、「 A_i の時間変化の波数方向の総和がゼロ」という条件が成立しなくなる。したがって、

$$Qf_w \neq 0 \text{ かつ 粒子数がゼロ} \quad (*)$$

のセルが見つかった場合は、 $A_i = 0$ の擬粒子を複数注入して、そして式(4.44)を用いてそれらの A_i を計算するという操作が必要となる²⁰⁾。ここで、注入する擬粒子の A_i をゼロとする理由は以下の通りである。上記(*)の条件に該当するセルに擬粒子を注入する目的は、 A_i の時間変化を計算するためであり、 A_i の値自体はどのような値でも構わない。ただし、擬粒子の注入によって電子密度等の物理量に影響があってはならないため、本アプローチでは $A_i = 0$ の擬粒子を注入することになっている。

条件(*)の一つ目の条件 $Qf_w \neq 0$ を判別する基準について議論する²³⁾。式(4.44)より、 Δt 秒間の affinity の時間変化は次式で計算される。

$$A_i(t + \Delta t) - A_i(t) = \frac{1}{n} \Delta t \times Qf_w(k, x, t + \Delta t) \quad (4.48)$$

ただし n はセル $M(k, x)$ 内の擬粒子の数を表す。 A_i は通常 1 に近い値をとるので、もし上式の右辺の値が 0.01 (= 1%) よりも大きいならば、 A_i の時間発展、つまり $A_i(t + \Delta t) - A_i(t)$ は無視することができなくなる。したがって、そのようなセルには $A_i = 0$ の擬粒子を注入する必要があると判断する。以上の考察から $\Delta t \times [Qf_w(k, x, t + \Delta t)] > 0.01n > 0.01$ となり、整理すると次式の条件式が得られる^{16,23)}。

$$|Qf_w(k, x, t)| > \frac{0.01}{\Delta t} \text{ (s}^{-1}\text{)} \quad (4.49)$$

ここで Δt は MC 計算の時間間隔に対応する。実際に WMC 法を**共鳴トンネルダイオード**に適用し、系統的に擬粒子の注入条件を変更しながら条件式(4.49)との対応を調べたところ、式(4.49)の**判別条件**はシミュレーション結果とも良い一致を示すことが確認できている。本節の最後に紹介する共鳴トンネルダイオードの計算結果では、上記(*)の判別条件を使用していることを述べておく。一方、(*)の条件に合致したセルが見つかった場合に、そこに注入する擬粒子の数をいくつにするか、についても検討が必要である。現時点では経験的に 10 個程度の擬粒子の注入が必要であることが分かっている。これについては今後、理論的な検討がなされることを期待したい。

最後に注入される擬粒子の affinity 以外のパラメータの与え方について述べておく。これについても検討の余地が残されているが、本書では最も単純な以下の方法で各種パラメータを与えた。まず、擬粒子の位置と波数には、離散セルの中心位置と中心波数を用いた。

$$k_x = k \quad (4.50)$$

$$x = x \quad (4.51)$$

電子の輸送方向に垂直な方向の波数については、平均エネルギーが熱エネルギーに等しいと仮定して次式を用いて与える。

$$k_y = \sqrt{2mE_y/\hbar} = \sqrt{2m[-k_B T/2 \times \ln(r)]/\hbar} \quad (4.52)$$

$$k_z = \sqrt{2mE_z/\hbar} = \sqrt{2m[-k_B T/2 \times \ln(r)]/\hbar} \quad (4.53)$$

ここで r は $[0, 1]$ の乱数である。計算対象が 2 次元電子ガスや 1 次元電子ガスに代われば、擬粒子の注入パラメータも電子の自由度に応じて修正していく必要がある。

物理量の計算

WMC 法は多粒子モンテカルロ法に基づく計算法であるので、各種物理量の計算には**多粒子統計**の考え方をを用いることができる¹⁸⁾。すなわち物理量 Q の計算は次式のようになる。

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_i A_i Q_i}{\sum_i A_i} \quad (4.54)$$

ここで Q は電子速度や電子エネルギー等の物理量を表す。一方、デバイス内の全電子数は次式で与えられる。

$$N_{\text{electrons}} = \sum_i A_i \quad (4.55)$$

Affinity は 1 より小さく負値も取り得ることから、計算に用いられる擬粒子の数 N は上記の全電子数 $N_{\text{electrons}}$ よりも相当に大きな値となる。電流密度は **Ramo-Shockley の定理**にしたがって、次式のように電子速度の平均操作によって求められる。

$$I(t) = \frac{q}{L} \sum_i A_i(t) v_i(t) \quad (4.56)$$

ここで L はデバイス長を表す。

WMC 法のフローチャート

WMC 法のフローチャートを図 4.3 に示す。3 章で示した古典 MC 法のフローチャート(図 3.8)との違いを明示するために、WMC 法で新たに追加または修正された項目の背景をグレーで示している。それらを箇条書きすると次のようになる。

- (1) 自由走行中の外力をゼロ(等速運動)にする
- (2) affinity の計算ループを追加する
- (3) 位相空間内の空のセルに擬粒子 ($A_i = 0$) を注入する

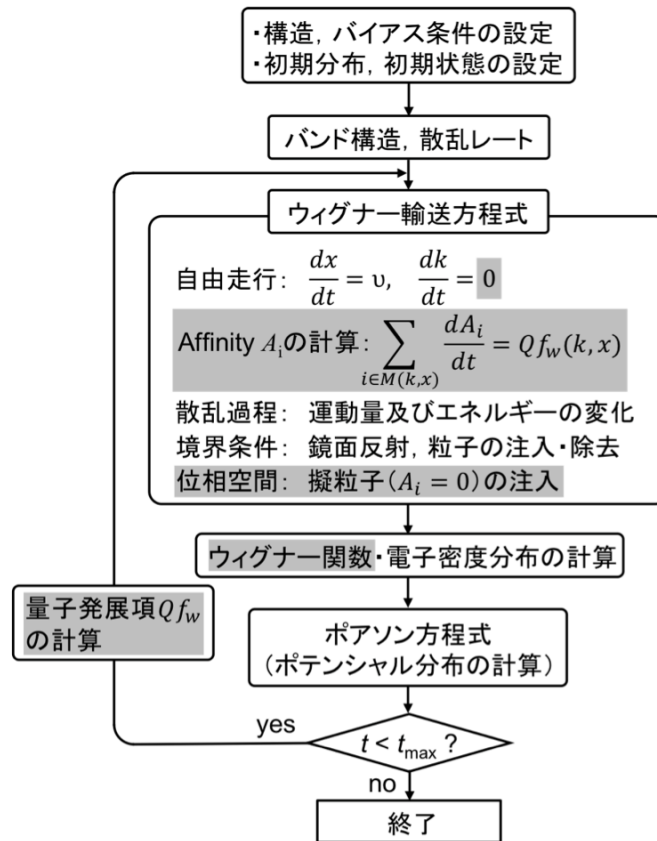


図 4.3 WMC 法の計算フローチャート. 古典 MC 法にはなく WMC 法で新たに追加・修正された項目を、背景をグレーにして強調している.

- (4) ウィグナー関数の計算ループを追加する
- (5) 量子発展項の計算ループを追加する

このように WMC 法は古典 MC 法の多くの部分をそのまま利用することができ、新たに上記の 5 つのパートを追加または修正することで、量子輸送効果を取り入れた MC 計算が可能になる。また、図 4.3 に記載されている通り、WMC 法においてもポアソン方程式を自己無撞着に解いている。そこで得られたポテンシャル分布は粒子に働く力 F ではなく、非局所ポテンシャル項に取り込まれて量子発展項となり、粒子の affinity 計算に用いられる。実際の WMC 計算では、量子発展項を用いた計算に入る前に、まず古典 MC 法を実行し、ある程度デバイス内の様々な物理量が評価できる状態にまで計算を進めた後に、ウィグナー関数と量子発展項を用いた WMC 計算に移行させる。古典 MC 計算を行う時間は 0.2ps 程度であり、全体の計算時間に与える影響は殆どない。

共鳴トンネルダイオードへの応用

WMC 法を 2 重障壁構造の共鳴トンネルダイオードへ適用した結果を紹介する²³⁾。図 4.4 は AlGaAs / GaAs / AlGaAs で構成される共鳴トンネルダイオードの構造を示したもので、図中には計算に用いたパラメータの値も記している。2 つの障壁層が AlGaAs であり、中央の量子井戸層と両側の電極部が GaAs でできている。共鳴トンネルダイオードでは、2 つの障壁に挟まれた中央の井戸層に量子準位が形成される。電圧を印加して電極から注入される電子のエネルギーをこの量子準位エネルギーに一致させると、共鳴的にトンネル効果が発生し電極間を大きな**トンネル電流**が流れる。しかし、電圧をさらに増加させ共鳴条件から外れるとトンネル電流は殆ど流れなくなる。このとき有限の温度では、障壁の上を電子が熱的に飛び越える**熱放出電流**が流れるが、共鳴トンネル電流がこの熱放出電流よりも十分大きい場合には、電流－電圧特性に**負性抵抗**が現れる。GaAs/AlGaAs 等の化合物半導体は有効質量が軽いいため、大きな**共鳴トンネル電流**を流すことが可能であり、実際に室温の実験でも負性抵抗が観測されている。したがって図 4.4 の共鳴トンネルダイオードは WMC 法の妥当性を検証するのに適していると考え採用することにした。

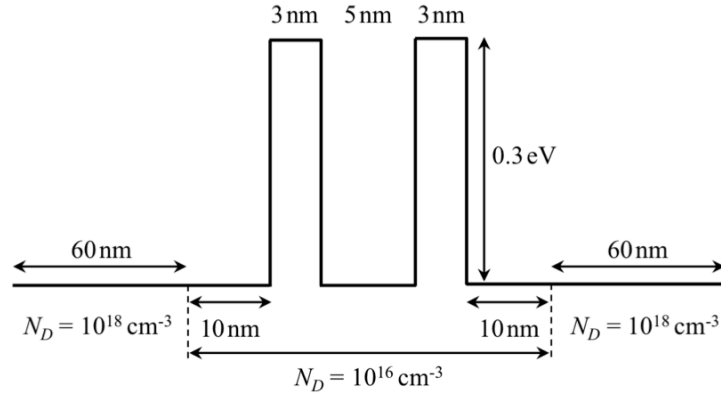


図 4.4 共鳴トンネルダイオードの計算モデル. AlGaAs/GaAs/AlGaAs 2 重障壁構造を用いた. 図中に記した数字は計算に用いたパラメータ値を示す.

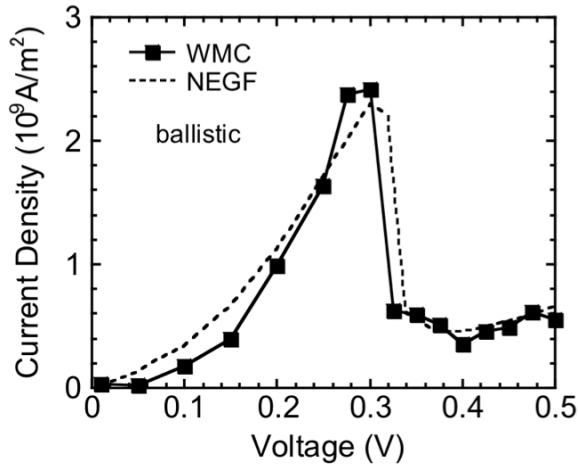


図 4.5 Ballistic 輸送下での電流－電圧特性. 非平衡グリーン関数 (NEGF) 法²⁴⁾の計算結果を破線で示す.

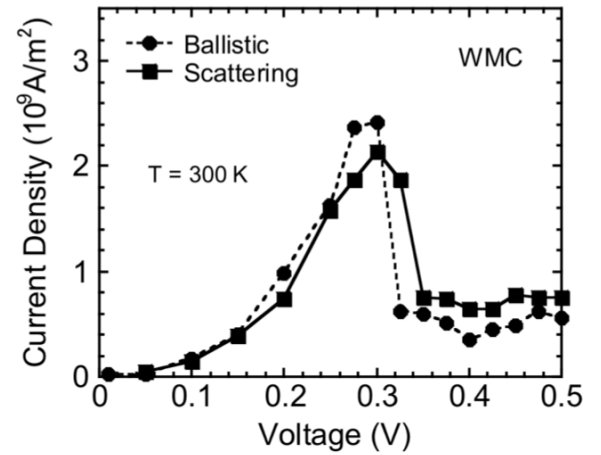


図 4.6 Ballistic 輸送下と scattering 輸送下の電流－電圧特性の比較. WMC 法を用いて計算した.

図 4.4 の構造は 2 重障壁層の両側に厚さ 10 nm のスペーサ層を設けている。このスペーサ層を含む厚さ 31 nm の領域をデバイス領域と呼ぶことにする。温度はすべて絶対温度 300 K とし、考慮した散乱過程は、不純物散乱、音響フォノン散乱および有極性光学フォノン散乱である。また、 Γ バレーの輸送のみを考慮した。

まず、デバイス領域の散乱を無視した状況下での計算を行った。これを“ballistic (弾道的)”と称する。図 4.5 に、ballistic 輸送下での電流－電圧特性を示す。図には比較のために、同じ条件下で非平衡グリーン関数 (NEGF) 法²⁴⁾を用いて計算した結果を破線でプロットしている。両手法ともに明瞭な負性抵抗が得られている。WMC 法の結果はデータにバラつきが見られるものの、ピーク電流値およびバレー電流値ともに NEGF 法と良い一致を示しており、量子トンネル現象が精度良く計算されていることが分かる。

次に、デバイス領域の散乱を考慮した現実の状況下での計算を行った。散乱を考慮した場合、NEGF 法では計算量が膨大になるため、以降の計算では WMC 法のみを用いている。図 4.6 は、ballistic 輸送下と散乱を考慮した輸送下 (scattering) の電流－電圧特性の比較を示す。散乱によってピーク電流値が減少し、逆にバレー電流値が増加している。すなわち、散乱によって量子トンネル効果が弱められ負性抵抗が減少するという妥当な結果になっている。このように WMC 法では、計算時間を大幅に増やすことなく散乱の効果を取り入れられるという利点がある。このことは、MOSFET など、ナノスケール領域に微細化されても散乱が依然として重要な役割を果たすデバイスの輸送特性を調べる場合、WMC 法が有効な解析手法になり得ることを示唆している。

図 4.7 は、共鳴状態 ($V = 0.3 \text{ V}$) と非共鳴状態 ($V = 0.4 \text{ V}$) での電子密度分布とポテンシャル分布を示す。共鳴状態では、中央の量子井戸内に電子密度の極大ピークが見られるが、これは 2 つの障壁間で電子波が共鳴を起こし閉じ込められていることを表している。一方、非共鳴状態では、量子井戸内の電子密度は大きく減少し、その代わりに、

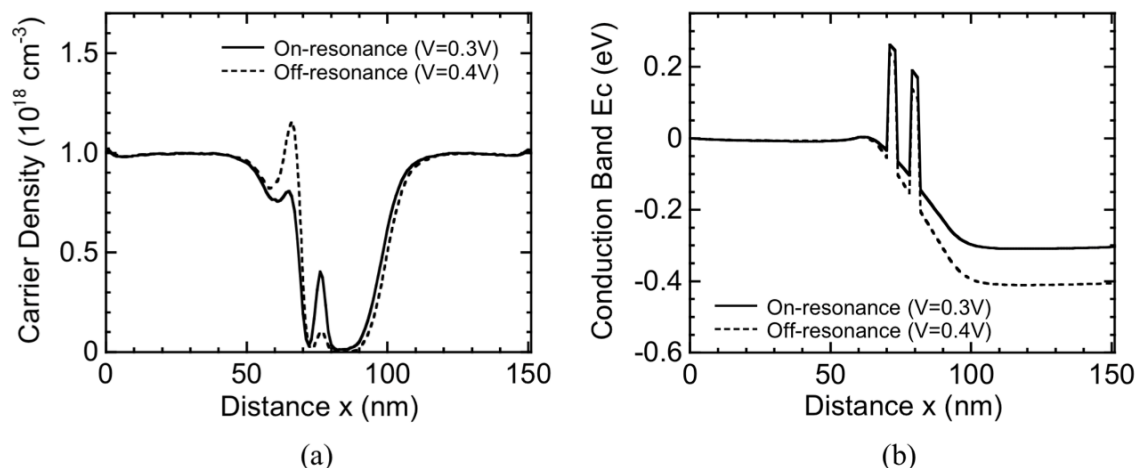


図 4.7 共鳴状態 ($V = 0.3 \text{ V}$) と非共鳴状態 ($V = 0.4 \text{ V}$) での (a) 電子密度分布と (b) ポテンシャル分布。

左側障壁の直前で電子密度の蓄積が起こっている。これは非共鳴状態であるために、電子がトンネルできずに障壁から跳ね返されて、左側障壁の手前に形成される 3 角形ポテンシャル井戸 (図 4.7(b) 参照) に電子が溜まってできたものである。このように WMC 法は、共鳴トンネル効果を自己無撞着計算の下で正確に記述することができる。以上より、WMC 法は量子輸送効果と散乱効果を高精度に取り入れた解析が可能であることが実証された。次節ではこの WMC 法を、**ナノワイヤ型 MOSFET** に適用した結果を紹介する。

4.5 シリコンナノワイヤ MOSFET の WMC シミュレーション

米国インテル社は 2012 年に Fin FET を搭載した CPU の製造を開始すると発表し大きな注目を集めた²⁵⁾。なぜならば、トランジスタの発明以来初めて、**立体構造のトランジスタ**が実用化されるという画期的な出来事であったからである。Fin FET の究極の構造の一つが**ゲートオールアラウンド (GAA) 型ナノワイヤ FET**と言われており、その実用化に向けて世界中で活発な研究開発が行われている。

ゲートオールアラウンド型シリコンナノワイヤ MOSFET

著者らが計算の対象としたゲートオールアラウンド (GAA) 型 Si ナノワイヤ MOSFET (SNW-MOSFET) の幾何学的構造を図 4.8 (a) に示す¹⁰⁾。この MOSFET は、チャンネルの全周囲がゲート電極に覆われているため、ゲートの静電制御力が増大し、微細化 MOSFET で問題となる DIBL 等の短チャンネル効果の抑制に優れた構造となっている。その一方で、GAA 型ナノワイヤデバイスではすべての面が酸化膜層で覆われているため、図 4.9 に示すようにキャリアの輸送方向に**チャンネル膜厚の揺らぎ**が生じる^{26,27)}。チャンネル膜厚がキャリアの**波動関数の空間的閉じ込め広がり**よりも厚

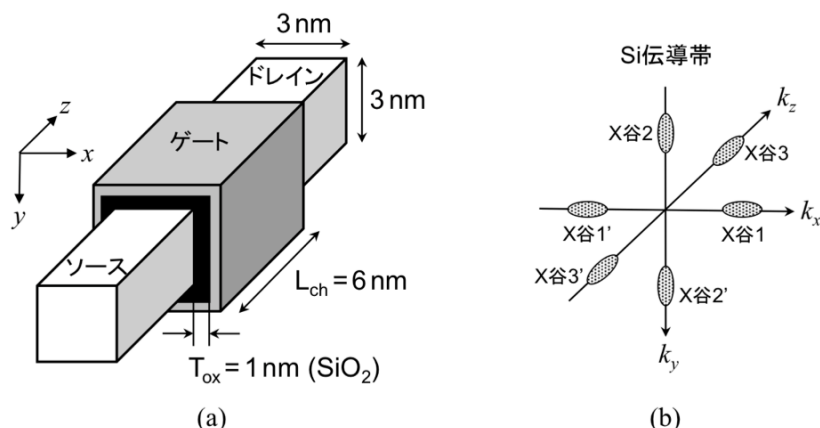


図 4.8 (a) GAA 型 Si ナノワイヤ MOSFET の構造。チャンネル長は 6 nm、断面形状は正方形とし 1 辺の長さは 3 nm とした。ゲート絶縁膜は SiO_2 とし、その厚さは 1 nm とした。 (b) Si 伝導帯の X 谷近傍の等エネルギー面。

い場合には、この膜厚揺らぎの影響は無視できるが、逆に波動関数の空間的閉じ込め広がりよりも細い極細チャネルの場合には、これが輸送方向に量子準位の揺らぎを生じさせキャリアを激しく散乱させることになり、深刻な移動度低下を引き起こすことが報告されている^{26,27)}。また、チャネル長の縮小が進むとチャネル方向の量子輸送効果が顕在化するとされており²⁸⁻³⁰⁾、例えば SNW-MOSFET ではチャネル長が 6~8 nm 以下に縮小されると、オフ時にソース・ドレイン直接トンネリング(SDT)が起こりサブスレッショルド特性が劣化すると予測されている³¹⁾。このように、チャネル長が 10 nm 以下に微細化され、さらに GAA 等の新型構造が導入されるようになると、これまでは無視されてきた量子輸送効果や散乱効果が電気特性に顔を出すようになる。本節では、これまで説明してきた WMC 法をチャネル長が 6 nm の GAA 型 SNW-MOSFET に適用し、上記の問題に関して得られた知見を中心に紹介していく³²⁾。

図 4.8 (a)にはデバイスのサイズも記載している。ナノワイヤの断面形状は正方形とし、1辺の長さは 3 nm とした。閉じ込め面方位は(100)と(010)とし、チャネル方向は<001>とした。伝導帯のバンド構造は、バルクシリコンの回転楕円体を用いたため、図 4.8 (b)に示すように、6 つの X 谷を、それぞれ等価な X 谷 1-1'、X 谷 2-2'、および X 谷 3-3' の 3 つのグループに分け、計算量の削減を行った。

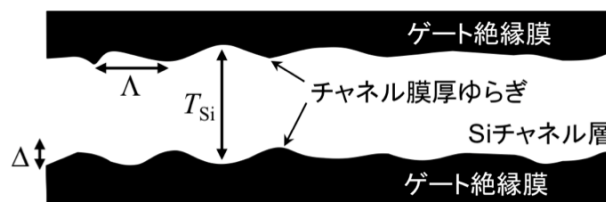


図 4.9 キャリア輸送方向のチャネル膜厚揺らぎ^{26,27)}。極細チャネルの場合には量子準位の空間揺らぎが生じキャリアが強く散乱されるため移動度の低下が引き起こされる。

3 次元マルチサブバンド WMC 法

ここで実際に用いた計算方法について説明する。ナノワイヤ MOSFET を解析する場合、3 次元 (3D) のポアソン方程式と 3 次元のウィグナー輸送方程式を自己無撞着に計算する必要がある。しかし、3 次元のウィグナー輸送方程式を近似を用いることなく解くには、莫大な計算量が必要になることから、現在のコンピュータ能力では現実的ではない。そこで、ナノワイヤ構造はソースからドレインまで均一な断面サイズを有しており、各量子化サブバンドは独立していると仮定し、図 4.10 に示すような計算の効率化を図った。3 次元のウィグナー輸送方程式を解く代わりに、ナノワイヤ断面内には 2 次元 (2D) シュレディンガー方程式を、そして輸送方向には 1 次元 (1D) WMC シミュレーションを行うことにする。2D シュレディンガー方程式からは、輸送方向の 1D サブバンド分布と 2D 電子密度分布が得られるので、その 1D サブバンド分布を WMC 法のポテンシャル分布 $U(z)$ に代入し電子の量子輸送特性を解析するとともに、シュレデ

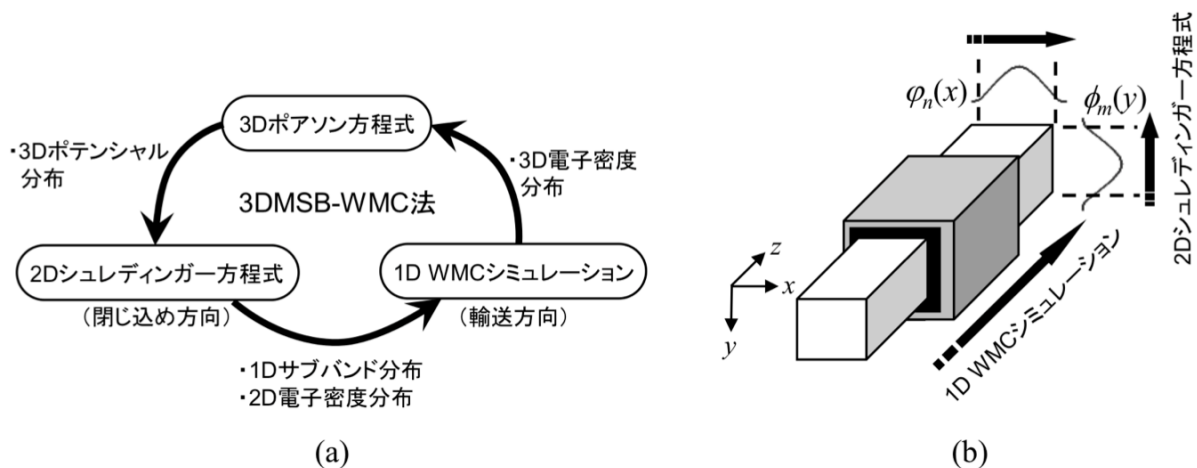


図 4.10 3 次元マルチサブバンド-WMC (3DMSB-WMC) 法. (a)自己無撞着計算ループ. (b)閉じ込め方向(x, y)には 2D シュレディンガー方程式、輸送方向(z)には 1D WMC シミュレーションが実行される。

インガー方程式から得られた 2D 電子密度分布と結合させてデバイス全域の **3D 電子密度分布**を求める。その結果を 3D ポアソン方程式に代入し解くことで、デバイス全域のポテンシャル分布が得られるので、それを用いて再び 2D シュレディンガー方程式を解く。以上の作業を解が十分に収束するまで時間ステップを回す。これを **3 次元マルチサブバンド-WMC (3DMSB-WMC) 法**と呼ぶ。上記の方法は、**マルチゲート構造 MOSFET** に対する古典 MC 法では標準的に用いられる手法であり¹⁰⁾、ソースからドレインまで均一なチャンネル構造を有している場合、計算精度も高く良い近似になっていることが確認されている。

散乱機構は、音響フォノン散乱 (AP scattering)、非有極性谷間フォノン散乱 (IP scattering)、不純物散乱 (II scattering) 及び表面ラフネス散乱 (SR scattering) を考慮した¹⁰⁾。表面ラフネス散乱は、**遷移行列要素を Generalized Prange-Nee term**で表現するモデルを用いた^{10, 33)}。ただし、 $\Delta = 0.1 \text{ nm}$ および $\Lambda = 1.3 \text{ nm}$ とした。このモデルには、図 4.9 で説明した**チャンネル膜厚揺らぎによる散乱の効果**も取り入れられている。したがって、ダブルゲート構造やナノワイヤ構造に対応できる表面ラフネス散乱モデルであることを強調しておく。図 4.8 (a) のナノワイヤ MOSFET に対する散乱レートを図 4.11 に示す。各散乱過程の散乱レートの式やパラメータの値については文献[10]を参照にされたい。図 4.11 は**基底サブバンド**に対するもので、ソース内で計算した結果を示している。また、散乱レートは厳密には電圧にも依存するが、その影響は無視できる範囲であった。ちなみに図 4.11 では、ゲート電圧は 0.3 V 、ドレイン電圧は 0.01 V としている。**1D 電子ガス**の状態密度を反映して、エネルギーとともに減少する曲線となっていることに注目していただきたい(図 3.12 (a) の 3D 電子ガスのものと比較するとその違いが良く分かる)。また、基底サブバンドから **1 次高次サブバンド**への遷移 ($1 \rightarrow 2$) が生じ始めるエネルギーで、1D 電子ガスの特徴であるノコギリ波状の鋭い立ち上がりが見られる。今回は断面サイズが 3 nm と非常に細いナノワイヤを用いているので、低エネルギー領域では表面ラフネス散乱が最大の散乱レートを示している。これには上述したチャンネル膜厚揺らぎによる散乱成分も含まれていることを強調しておきたい。断面サイズが大きいナノワイヤ MOSFET や平面構造のマルチゲート MOSFET、例えば 3.6 節で紹介したダブルゲート型 MOSFET では、表面ラフネス散乱の散乱レートが今回のように最大になることは通常は有り得ない。つまり、今回用いた図 4.8 (a) の GAA 型 SNW-MOSFET では、チャンネル膜厚揺らぎによる散乱成分を含む**表面ラフネス散乱の影響**が極めて大きいデバイスとなっている。したがって次項では、表面ラフネス散乱の影響が GAA 型 SNW-MOSFET の電気特性、特に、量子輸送特性にどのように現れるかに注目して解析を行った³²⁾。

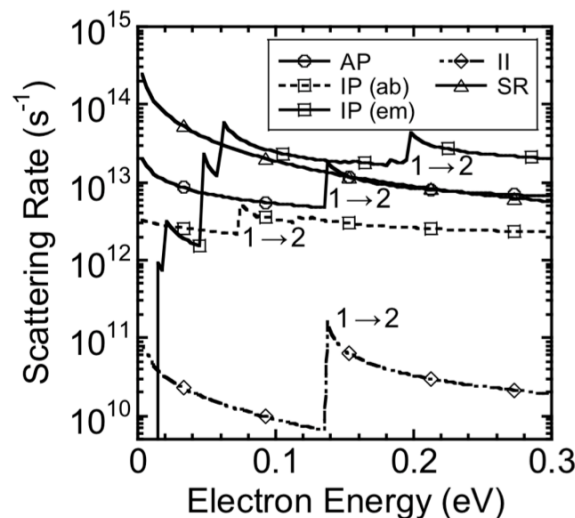


図 4.11 ナノワイヤ MOSFET (図 4.8 (a)) に対する各散乱機構の散乱レート。AP: 音響フォノン散乱、IP: 非有極性谷間フォノン散乱 (ab=吸収過程、em=放出過程)、II: 不純物散乱、および SR: 表面ラフネス散乱。計算条件は本文を参照されたい。1D 電子ガスの状態密度を反映して、エネルギーとともに減少する曲線となっている。さらに基底サブバンドから 1 次高次サブバンドへの遷移 ($1 \rightarrow 2$) が生じ始めるエネルギーで、1D 電子ガスの特徴であるノコギリ波状の鋭い立ち上がりが見られる¹⁰⁾。

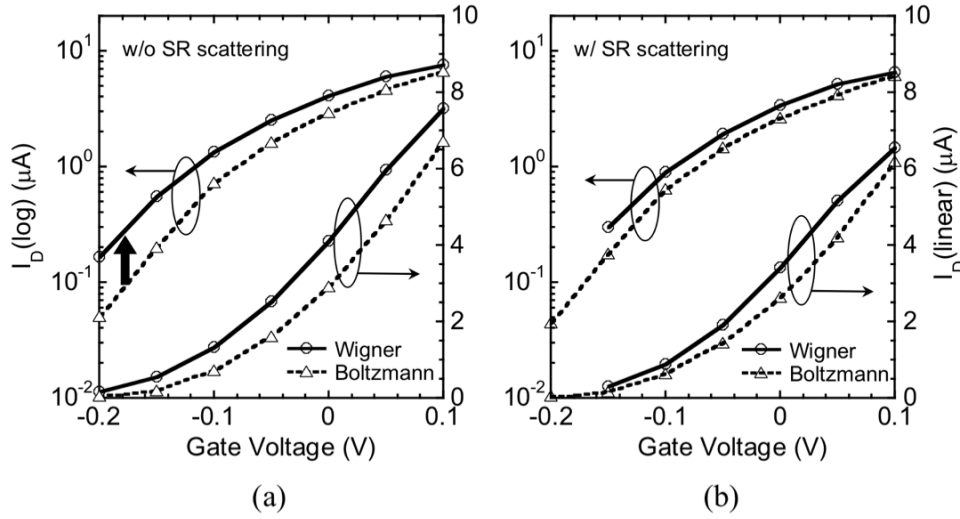


図 4.12 GAA 型 SNW-MOSFET の $I_D - V_G$ 特性の計算結果. $V_D = 0.2 \text{ V}$. 表面ラフネス散乱を(a)無視した場合と (b)考慮した場合. 左側および右側の縦軸はそれぞれ I_D を対数表示と線形表示している. 古典 MC 法の結果を破線でプロットしている.

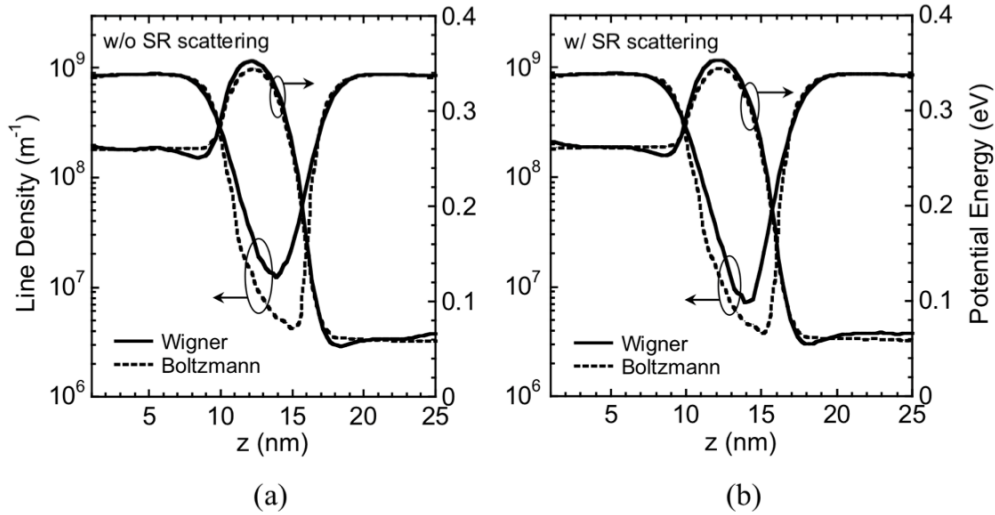


図 4.13 基底サブバンドエネルギー分布と線電子密度分布の計算結果. $V_G = -0.15 \text{ V}$. 表面ラフネス散乱を(a)無視した場合と(b)考慮した場合. $z = 10 \sim 16 \text{ nm}$ がチャネル領域を表す. 古典 MC 法の結果を破線でプロットしている.

ソース・ドレイン直接トンネリングへの表面ラフネス散乱の影響

まず、ドレイン電流－ゲート電圧 ($I_D - V_G$) 特性の計算結果を図 4.12 に示す。ドレイン電圧は $V_D = 0.2 \text{ V}$ とした。ここで、(a)は表面ラフネス散乱を無視した結果で、(b)は表面ラフネス散乱を考慮した結果を示す。量子輸送効果を見るために、量子輸送を無視した古典 MC 法 (Boltzmann) の結果も破線でプロットしている。古典 MC 法とは、図 4.10 で説明した 3DMSB-WMC 法の 1D WMC シミュレーション部分を、従来の 1D 古典 MC シミュレーションに変更した計算方法である。したがって古典 MC 法においても断面内の 2D 量子閉じ込め効果は考慮されている。図 4.12 (a)の結果を見ると、**サブスレッショルド領域**で量子論の電流値が大幅に増大していることが分かる。この原因については後ほど詳しく説明するが、ソース・ドレイン間直接トンネリング (SDT) によるものである。これに対して同図(b) の結果ではサブスレッショルド電流の増大が比較的小さな増加量に抑えられている。このことはつまり電子の散乱が増えると(今の場合、表面ラフネス散乱を考慮すると)、ソース・ドレイン電極間の量子干渉効果が弱まり SDT によるサブスレッショルド電流の増大が抑制されることを示唆している。このことを別の特性で見るために、サブスレッショルド領域に近い $V_G = -0.15 \text{ V}$ での**基底サブバンドエネルギー分布と線電子密度分布**の計算結果を図 4.13 に示す。 $z = 10 \sim 16 \text{ nm}$ がチ

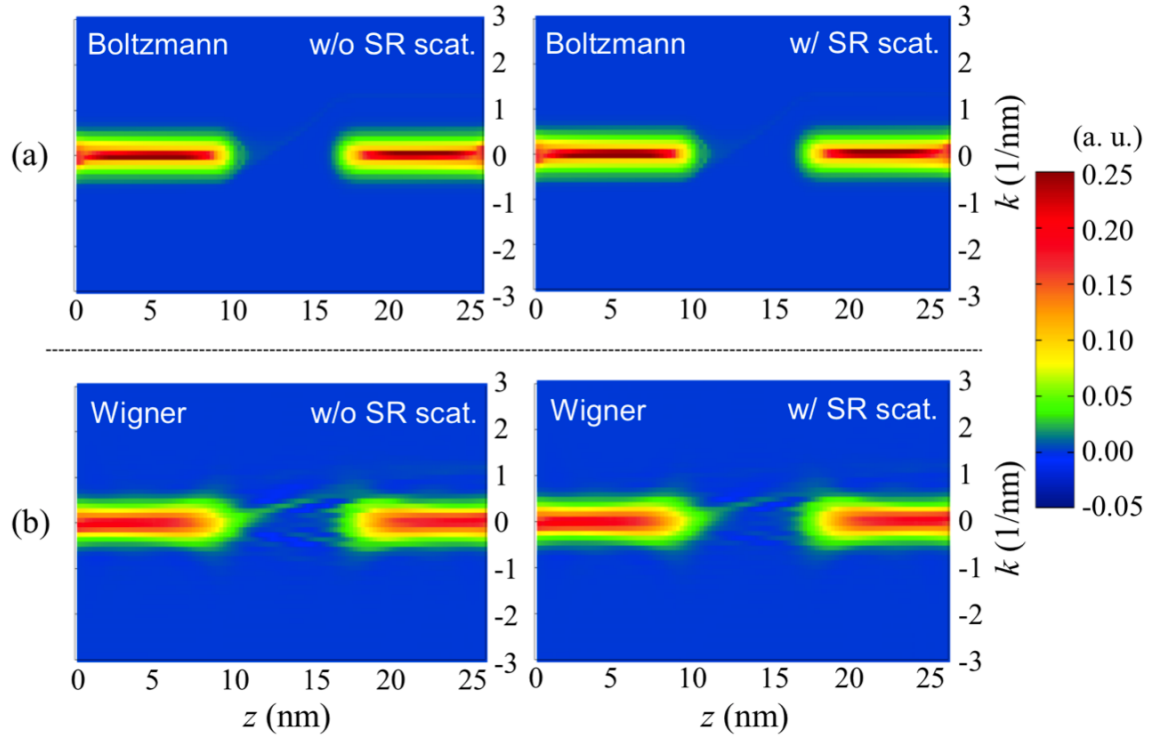


図 4.14 (a)古典 MC 法と(b)WMC 法で得られた位相空間における電子分布関数. $V_G = -0.15$ V. (左図)表面ラフネス散乱無視した場合. (右図)表面ラフネス散乱を考慮した場合. 図(b)におけるチャンネル内の干渉模様が表面ラフネス散乱の有無によって変化する様子に注目していただきたい.

チャンネル領域で、その左側がソース領域、右側がドレイン領域となっている。(a)と(b)のどちらの場合も、古典 MC 法と WMC 法で基底サブバンドエネルギー分布はほぼ同じであるが、チャンネル内の線電子密度は WMC 法の方が明らかに大きくなっている。これは SDT によるチャンネル電子密度の増大を表している。しかしながら図 4.13 (a)と(b)を比較すると、表面ラフネス散乱を考慮した同図(b)の方でチャンネル電子密度の増大が抑制されているのが分かる。この結果もまた、電子の散乱が増えると、SDT の影響が顕在化し難くなることを表している。

以上はサブスレッショルド電流についての議論であるが、次に $V_G = 0.1$ V 付近のオン電流値について見ていこう。図 4.12 (a)と(b)の比較より、古典 MC 法と WMC 法ともに、表面ラフネス散乱を考慮した(b)の方が、オン電流値が減少している。すなわち、電子の散乱が増えると SDT が抑制されサブスレッショルド特性は改善されるが、その一方で、電子移動度は減少するためオン特性が劣化するとの予測は変わることはない。このチャンネル膜厚揺らぎによる散乱の効果は、原子レベルのモデル化や条件に依存することから、実験結果による検証などを通じて今後より詳細な検討が望まれる。

最後にもう一度、サブスレッショルド時の位相空間の分布関数を観察してみる。図 4.14 に、(a)古典 MC 法と(b)WMC 法で計算した電子分布関数を示す。この図は横軸が実空間で縦軸が波数空間を表している。バイアス条件は図 4.13 と同じである。(a), (b)ともに左図が表面ラフネス散乱を無視した結果で、右図が表面ラフネス散乱を考慮した結果を示す。(a)の古典 MC 法の結果では、 $z = 10 \sim 16$ nm のチャンネル領域には電子はほとんど存在しない。このため表面ラフネス散乱の影響もほとんど観測されない。一方、(b)の WMC 法では、SDT による干渉模様が現れている。そして左右の図を比較すると、右図の表面ラフネス散乱を考慮した方が干渉模様が弱められることが確認できる。これが、 $I_D - V_G$ 特性や線電子密度分布で見られた SDT の抑制を生じさせた原因である。以上の結果より、電子の散乱は量子干渉効果を弱め、断面サイズが数 nm の Si ナノワイヤ MOSFET では SDT の影響をある程度抑制する効果があることが分かった。

WMC 法は、図 4.12 (b)からも分かるように、低ゲートバイアス時の計算結果が不安定になり信頼性の高い結果を得ることが難しい場合がある。WMC 法の信頼性を向上させるには、このような数値的安定性の改善だけでなく、有効

質量近似を必要としない原子論(例、**密度汎関数理論**)との融合や、量子論的散乱レートの導入が課題となってくるであろう。また、将来の革新的デバイスの開発環境には「**量子ダイナミックス**」を解析・視覚化できる能力が不可欠になってくる。本書ではそこまで触れることはできなかったが、「ウィグナー関数理論」は原理的に当該能力を兼ね備えた輸送理論になっている。量子ダイナミックスの解析を実行するには、計算技術のさらなる高度化・高速化が不可欠であり、**並列計算の導入**をはじめとして**計算科学**の知恵も取り入れた研究の展開が求められると予想している。

付録 A 有限差分法による離散化

ウィグナー輸送方程式を有限差分法に基づいて離散化し、その行列方程式を直接解くアプローチを紹介する^{13, 14, 31)}。簡単のため定常状態の解析に限定する。式(4.11)の右辺の量子発展項と式(4.13)の非局所ポテンシャル項の離散化については 4.3 節で説明しているので、ここでは式(4.11)の左辺第 2 項の離散化について説明する。関数 f の空間微分項を有限差分で近似する場合、そこで無視される次数に応じて計算精度が変化する。今、位置の分割点番号 $n + 1$ での関数をテイラー展開表示すると

$$f(n+1) = f(n) + f'(n)\Delta_x + \frac{f''(n)}{2}\Delta_x^2 + \frac{f'''(n)}{6}\Delta_x^3 + \frac{f''''(n)}{24}\Delta_x^4 + \dots \quad (\text{A.1})$$

となる。この式より $f'(n) = \partial f(n)/\partial x$ を求めると

$$f'(n) = \frac{f(n+1) - f(n)}{\Delta_x} - \frac{f''(n)}{2}\Delta_x - \frac{f'''(n)}{6}\Delta_x^2 - \frac{f''''(n)}{24}\Delta_x^3 - \dots \quad (\text{A.2})$$

が得られる。上式の右辺第 2 項以降、すなわち Δ_x の 1 次以上の項を無視すると $f'(n)$ の近似式として次式が得られる。

$$\boxed{f'(n)|_{\text{FDS}} \approx \frac{f(n+1) - f(n)}{\Delta_x}} \quad (\text{A.3})$$

式(A.3)を FDS (First-order Differencing Scheme)と呼ぶことにする。

次に、近似の次数を上げるために、 $n + 2$ での関数をテイラー展開表示すると

$$f(n+2) = f(n) + f'(n)(2\Delta_x) + \frac{f''(n)}{2}(2\Delta_x)^2 + \frac{f'''(n)}{6}(2\Delta_x)^3 + \frac{f''''(n)}{24}(2\Delta_x)^4 + \dots \quad (\text{A.4})$$

となる。そこで、式(A.4)−4×式(A.1)を計算すると

$$f(n+2) - 4f(n+1) = -3f(n) - f'(n)(2\Delta_x) + \frac{2f'''(n)}{3}(\Delta_x)^3 + \dots$$

より、

$$f'(n) = \frac{-3f(n) + 4f(n+1) - f(n+2)}{2\Delta_x} + \frac{f'''(n)}{3}\Delta_x^2 + \dots \quad (\text{A.5})$$

が得られる。上式の右辺第 2 項以降、すなわち Δ_x の 2 次以上の項を無視すると $f'(n)$ の近似式として次式が得られる。

$$\boxed{f'(n)|_{\text{SDS}} \approx \frac{-3f(n) + 4f(n+1) - f(n+2)}{2\Delta_x}} \quad (\text{A.6})$$

式(A.6)を SDS (Second-order Differencing Scheme)と呼ぶことにする。

さらに、近似の次数を上げるために、今度は $n - 1$ での関数をテイラー展開表示すると

$$f(n-1) = f(n) - f'(n)\Delta_x + \frac{f''(n)}{2}\Delta_x^2 - \frac{f'''(n)}{6}\Delta_x^3 + \frac{f''''(n)}{24}\Delta_x^4 + \dots \quad (\text{A.7})$$

となる。式(A.4)−6×式(A.1)+2×式(A.7)を計算すると

$$f(n+2) - 6f(n+1) + 2f(n-1) = -3f(n) - 6f'(n)\Delta_x + \frac{f''''(n)}{2}(\Delta_x)^4 - \dots$$

より、

$$f'(n) = \frac{-2f(n-1) - 3f(n) + 6f(n+1) - f(n+2)}{6\Delta_x} + \frac{f''''(n)}{12}\Delta_x^3 - \dots \quad (\text{A.8})$$

が得られる。上式の右辺第 2 項以降、すなわち Δ_x の 3 次以上の項を無視すると $f'(n)$ の近似式として次式が得られる。

$$f'(n)|_{\text{TDS}} \approx \frac{-2f(n-1) - 3f(n) + 6f(n+1) - f(n+2)}{6\Delta_x} \quad (\text{A.9})$$

式(A.9)を TDS (Third-order Differencing Scheme)と呼ぶことにする。ちなみに式(A.9)の TDS は、次式の関係が成り立つことから、CDS (Central Differencing Scheme)と SDS を 2:1 の比で合成させた差分スキームと見なすこともできる。

$$f'(n)|_{\text{TDS}} = \frac{2}{3} \frac{f(n+1) - f(n-1)}{2\Delta_x} + \frac{1}{3} \frac{-3f(n) + 4f(n+1) - f(n+2)}{2\Delta_x} \quad (\text{A.10})$$

上述した 3 種類の微分スキーム、すなわち、FDS、SDS 及び TDS をウィグナー輸送方程式(4.11)の左辺第 2 項に適用する。その際、左右の電極で与える境界条件との接続を得るために $k_x > 0$ 、すなわち左側電極から右方へ伝わる電子波に対しては後進差分を、逆に $k_x < 0$ の右側電極から左方へ伝わる電子波に対しては前進差分を用いる必要がある^{13, 14)}。その結果、ウィグナー輸送方程式の有限差分表現は、各微分スキームに対して次のように表されることになる³¹⁾。

■FDS (First-order Differencing Scheme)

$$\frac{\hbar k(j)}{m\Delta_x} \begin{cases} f_{j,n+1} - f_{j,n}, & k(j) < 0 \\ f_{j,n} - f_{j,n-1}, & k(j) > 0 \end{cases} + \frac{1}{\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} \bar{v}_{n,j-j'} f_{j',n} = 0 \quad (\text{A.11})$$

■SDS (Second-order Differencing Scheme)

$$\frac{\hbar k(j)}{m(2\Delta_x)} \begin{cases} -3f_{j,n} + 4f_{j,n+1} - f_{j,n+2}, & k(j) < 0 \\ 3f_{j,n} - 4f_{j,n-1} + f_{j,n-2}, & k(j) > 0 \end{cases} + \frac{1}{\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} \bar{v}_{n,j-j'} f_{j',n} = 0 \quad (\text{A.12})$$

■TDS (Third-order Differencing Scheme)

$$\frac{\hbar k(j)}{m(6\Delta_x)} \begin{cases} -2f_{j,n-1} - 3f_{j,n} + 6f_{j,n+1} - f_{j,n+2}, & k(j) < 0 \\ 2f_{j,n+1} + 3f_{j,n} - 6f_{j,n-1} + f_{j,n-2}, & k(j) > 0 \end{cases} + \frac{1}{\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} \bar{v}_{n,j-j'} f_{j',n} = 0 \quad (\text{A.13})$$

キャリア密度と電流密度の離散化

キャリア密度と電流密度の離散化は、次の離散化された連続の式を満たすように行う。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{j \left(n + \frac{1}{2} \right) - j \left(n - \frac{1}{2} \right)}{\Delta_x} \quad (\text{A.14})$$

ここで、キャリア密度の離散化式を

$$n(n) = \sum_j \frac{\Delta_k}{2\pi} f_{j,n} \quad (\text{A.15})$$

と定義すると、離散化されたウィグナー輸送方程式(A.11)–(A.13)が連続の式(A.14)を満たすためには、電流密度の離散化式は次のようになる。

■FDS

$$j \left(n + \frac{1}{2} \right) = e \frac{\Delta_k}{2\pi} \left[\sum_{k(j)<0} \frac{\hbar k(j)}{m} f_{j,n+1} + \sum_{k(j)>0} \frac{\hbar k(j)}{m} f_{j,n} \right] \quad (\text{A.16})$$

■SDS

$$j \left(n + \frac{1}{2} \right) = e \frac{\Delta_k}{2\pi} \left[\sum_{k(j)<0} \frac{\hbar k(j)}{m} (3f_{j,n+1} - f_{j,n+2}) + \sum_{k(j)>0} \frac{\hbar k(j)}{m} (3f_{j,n} - f_{j,n-1}) \right] \quad (\text{A.17})$$

■ TDS

$$j\left(n + \frac{1}{2}\right) = e \frac{\Delta_k}{2\pi} \left[\sum_{k(j) < 0} \frac{\hbar k(j)}{3m} (5f_{j,n+1} - f_{j,n+2} + 2f_{j,n}) + \sum_{k(j) > 0} \frac{\hbar k(j)}{3m} (5f_{j,n} - f_{j,n-1} + 2f_{j,n+1}) \right] \quad (A.18)$$

参考文献

- [1] 佐藤勝彦、「量子論」を楽しむ本、PHP 文庫、2000 年.
- [2] 広江克彦、趣味で量子力学、理工図書、2015 年.
- [3] 土屋英昭、ナノ構造エレクトロニクス入門、コロナ社、2013 年.
- [4] 芦田正巳、統計力学を学ぶ人のために、オーム社、2006.
- [5] 阿部龍蔵、電気伝導、培風館、1969 年.
- [6] 御子柴宣夫、半導体の物理、培風館、1991 年.
- [7] 富澤一隆、半導体デバイスシミュレーション、コロナ社、1996 年.
- [8] 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.*, vol. 55, no. 3, pp. 645-705, 1983.
- [9] 森伸也、モンテカルロシミュレーションの基礎、応用物理学会関西支部セミナー、2015 年.
- [10] H. Tsuchiya and Y. Kamakura, *Carrier Transport in Nanoscale MOS Transistors*. Wiley, Singapore, 2016.
- [11] H. Tsuchiya, K. Fujii, T. Mori, and T. Miyoshi, “A quantum-corrected Monte Carlo study on quasi-ballistic transport in nanoscale MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 53, no. 12, pp. 2965-2971, 2006.
- [12] E. Wigner, “On the quantum correction for thermodynamic equilibrium,” *Phys. Rev.*, vol. 40, pp. 749-759, 1932.
- [13] 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 年.
- [14] W. Frensley, “Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device,” *Phys. Rev. B*, vol. 36, no. 3, pp. 1570-1580, 1987.
- [15] N. Klusdahl, A. Krizan, D. Ferry, and C. Ringhofer, “Self-consistent study of the resonant-tunneling diode,” *Phys. Rev. B*, vol. 39, no. 11, pp. 7720-7735, 1989.
- [16] S. Koba, *Development of Monte Carlo Simulators for Integrated Nanoscale Devices*. Doctoral Dissertation of Graduate School of Engineering, Kobe University, 2014.
- [17] H. Tsuchiya and T. Miyoshi, “Nonequilibrium Green’s function approach to high-temperature quantum transport in nanostructure devices,” *J. Appl. Phys.*, vol. 83, no. 5, pp. 2574-2585, 1998.
- [18] L. Shifren, C. Ringhofer, and D. K. Ferry, “A Wigner function-based quantum ensemble Monte Carlo study of a resonant tunneling diode,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 50, no. 3, pp. 769-773, 2003.
- [19] M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, and D. Ferry, “Unified particle approach to Wigner-Boltzmann transport in small semiconductor devices,” *Phys. Rev. B*, vol. 70, 115319, 2004.
- [20] D. Querlioz, P. Dollfus, V.-N. Do, A. Bournel, and V. Nguyen, “An improved Wigner Monte-Carlo technique for the self-consistent simulation of RTDs,” *J. Comput. Electron.*, vol. 5, no. 4, pp. 443-446, 2006.
- [21] D. Querlioz, J. Saint-Martin, K. Huet, A. Bournel, V. Aubry-Fortuna, C. Chassat, S. Galdin-Retailleau, and P. Dollfus, “On the ability of the particle Monte Carlo technique to include quantum effects in nano-MOSFET simulation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 54, no. 9, pp. 2232-2242, 2007.
- [22] D. Querlioz and P. Dollfus, *The Wigner Monte Carlo Method for Nanoelectronic Devices*. Wiley, New York, 2010.
- [23] S. Koba, R. Aoyagi, and H. Tsuchiya, “Quantum transport simulation of nanoscale semiconductor devices based on Wigner Monte Carlo approach,” *J. Appl. Phys.*, vol. 108, p. 064504, 2010.
- [24] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge Univ. Press, 1995.
- [25] C. Auth, C. Allen, A. Blattner, D. Bergstrom, M. Brazier et al., “A 22nm high performance and low-power CMOS technology featuring fully-depleted tri-gate transistors, self-aligned contacts and high density MIM capacitors,” in *Symp. VLSI Tech. Dig.*, 2012, pp. 131-132.
- [26] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue, “Interface roughness scattering in GaAs/AlAs

- quantum wells,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 51, no. 23, pp. 1934-1936, 1987.
- [27] 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,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2002, pp. 47-50.
- [28] H. Kawaura, T. Sakamoto, and T. Baba, “Observation of source-to-drain direct tunneling current in 8 nm gate electrically variable shallow junction metal-oxide-semiconductor field-effect transistors,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 76, no. 25, pp. 3810-3812, June 2000.
- [29] J. Wang and M. Lundstrom, “Does source-to-drain tunneling limit the ultimate scaling of MOSFETs?,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2002, p. 707-710.
- [30] H. Wakabayashi, T. Ezaki, M. Hane, T. Ikezawa, T. Sakamoto, H. Kawaura, S. Yamagami, N. Ikarashi, K. Takeuchi, T. Yamamoto, and T. Mogami, “Transport properties of sub-10-nm planar-bulk-CMOS devices,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2004, p. 429-432.
- [31] Y. Yamada, H. Tsuchiya, and M. Ogawa, “Quantum transport simulation of silicon-nanowire transistors based on direct solution approach of the Wigner transport equation,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 56, no. 7, pp. 1396-1401, July 2009.
- [32] 平井佑昂, 土屋英昭, 小川真人, “サブ 10 nm チャネル長 Si ナノワイヤ MOSFET の量子輸送シミュレーション”, 第 63 回応用物理学会春季学術講演会, 19a-S223-11, 2016 年 3 月 19 日.
- [33] S. Barraud, “Dissipative quantum transport in silicon nanowires based on Wigner transport equation,” *J. Appl. Phys.*, vol. 110, p. 093710, Nov. 2011.