量子ダイナミクス法による量子干渉トランジスタ
の電子波束と電場・磁場による制御*廣瀬 一 弥^{*1}, 加藤 征 三^{*2}Quantum Dynamics Analysis of Electron Wave Packet Behaviors
in Quantum Interference Transistor Controlled by Electric
and/or Magnetic Fields

Kazuuya HIROSE and Seizo KATO

Numerical simulations using the time-dependent quantum dynamics are carried out on the electron wave packet behaviors through a GaAs quantum interference transistor (QUIT). In order to trace the respective electron wave packets passing through the two hyper fine channels of QUIT, an attempt to introduce their relative phase difference results well in solving the equation system of time-dependent quantum dynamics in terms of one dimensional finite difference scheme. The performance as QUIT strongly depends on the interference characteristics of two wave packets, and the interference is well controlled with the aid of externally impressed external electric and/or magnetic fields. The simulation results show the possibility that GaAs QUITs are potential devices which operate as 0-1 controller with ultra high speed and accuracy due to the optimum electric and/or magnetic fields. The present QD simulation may contribute to practical designing and fabricating of QUIT devices.

Key Words: Wave Packets' Behavior, Quantum Dynamics, Quantum Interference Transistor

1. 緒 言

現在実用化に供せられている半導体デバイスの集積回路はシリコン Si で作成されているが近年の日覚ましい技術開発によりその演算動作速度は材料のもつ限界値にまでほぼ達しつつある。そのため、半導体材料の分野ではより動作速度の速い材料や機構の開発が要請されている⁽¹⁾。この課題をブレイクスルーして次世代のデバイスとしての高性能化や新機能化を実現する手段として超格子⁽²⁾の効果を利用することが注目され、学会・産業界をあげて精力的に研究が進んでいる。ここでいう超格子とは積層構造をもつ半導体薄膜の厚みが極めて薄く、そこを伝導する電子の量子力学的波長がその膜層と同程度以上のレベルになったものを指し、この超格子効果によって、イオン化した不純物と電子が分離されるため、電子移動度に及ぼす不純物散乱の影響が小さくなることが期待される。

しかし、超格子効果を利用したトランジスタの性能解析にはもはや古典力学が適用できず、新たに量子力

学に基づく理論を実用的観的から適用していく必要があるが、その量子力学に基づく理論的解析は十分行われていないため超格子効果の動作特性の詳細も解明されていない。

一般に集積回路の実用的性能はおもに処理速度、消費電力、耐環境性などで評価されるが、第一義的には処理速度が重要であることから、本研究ではまず、超格子効果をもつデバイスが従来の Si デバイスより超高速であるという要件を考慮して、デバイス内の電子の走行速度を解析することを試みた。電子走行速度を大きくするには、加速を短時間で行うことができる電子移動度および走行時間を短縮化できる電子ピーク速度を増加させる必要がある。このため、それに対応できる材料としてガリウム・ヒ素系を選び、その電子の走行速度を求値することにした。GaAs を解析対象とした理由は、Si に比し約 5 倍の電子移動度と約 2 倍の電子ピーク速度⁽²⁾をもつことから超高速半導体デバイス材料として最適と思われるからである。GaAs 系の超高速半導体デバイスの実用的応用として、電子波束の位相差制御性を利用した量子干渉トランジスタ(QUIT: Quantum Interference Transistor)が考えられる。すなわち、QUIT は外部から低電圧で電子の位相差を確実に 0-1 制御でき、将来的には

* 原稿受付 1998 年 6 月 24 日。

^{*1} 正員, 三重大学大学院(〒514 8507 津市上浜町 1515)。^{*2} 正員, 三重大学工学部。

E-mail: seizo@mach.mie-u.ac.jp

磁場でも制御が可能である利点がある。この電場・磁場による制御機構に関する解明も工業的には意義がある。

本研究においては量子ダイナミクス(Quantum Dynamics: QD)法を使用した。この手法は基本方程式として時間に依存したシュレーディンガー方程式を用いるものであり、電子のような量子的粒子の運動をシミュレートするには最適と思われる。これによって非定常状態の波動関数をはじめ種々物理量の時間依存性が解明でき、3Dアニメーションで可視情報化することもできる。したがって、QUIT 内での電子波束の挙動解明ができるとともに、電場・磁場による電子波束の制御とこれに伴うデバイス内の平均電子走行速度制御の可能性を具体的に検討でき、超高速半導体デバイスの設計支援に資することが期待される。

2. QUIT 内の電子波束位相差の支配式

量子干渉トランジスタ QUIT は図1に示したようなデバイス構造を有している。ソース領域から出た電子はデバイス内に適切に設けられたポテンシャル障壁によって二分割され、それぞれチャンネル1, 2を通過した後ドレン領域において分割された二つの電子波束が干渉する。電子の波動関数を ϕ とすると、 ϕ は電磁界がまったく存在しないときの波動関数 ϕ' を用いて以下のように表すことができる⁽³⁾。チャンネル1の波動関数 ϕ_1 とチャンネル2の波動関数 ϕ_2 は積分経路依存性を考慮すると、チャンネル1と2を通過してきた電子はベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ とスカラーポテンシャル ϕ を用いて、それぞれ次のように表すことができる。

$$\phi_1 = \exp\left\{ie \int_{r_1} (\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \phi dt)/\hbar\right\} \phi'_1 \quad \cdots \cdots (1)$$

$$\phi_2 = \exp\left\{ie \int_{r_2} (\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \phi dt)/\hbar\right\} \phi'_2 \quad \cdots \cdots (2)$$

ここで、添字1と2はそれぞれチャンネル1と2に対する値を示す。 $\mathbf{r}$ は経路、 $\hbar$ は $\hbar/2\pi$ (ただし、 h はプランク定数)である。 ϕ_1 と ϕ_2 との相対位相差は

Fig.1 General QUIT structure

$$\arg\{\phi_1\} - \arg\{\phi_2\} = \arg\{\phi'_1\}$$

$$- \arg\{\phi'_2\} + \left(\frac{e}{\hbar}\right)\Theta \quad \cdots \cdots (3)$$

$$\Theta = \iint_S \{\mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} + \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r}dt\} \quad \cdots \cdots (4)$$

で表すことがわかる。ここで $\arg\{\phi'_1\} - \arg\{\phi'_2\}$ は電磁界が存在しないときの位相差であり、式(4)の Θ は四次元フラックスである。電磁界が磁界のみであるときには、 Θ は経路面積 S における全波束に等しい。また、 $\mathbf{B}$ は磁場、 $\mathbf{E}$ は電場をそれぞれ表している。

二つの電子波束 ϕ_1 と ϕ_2 のドレン領域における干渉は、電子検出確率の増減や、確率の空間分布である干渉じまの移動として実際には観測される。これら確率の増減や干渉じまの移動は 2π を周期として周期的に生じる。式(3)は、フラックス Θ が変化したとき、 $\hbar/e$ を周期として電子波干渉が観測されることを示している。このようなポテンシャルを介して生じる電子波束の干渉現象である AB 効果は電子ビームホログラフィーによって実験的に検証されている。また、AB 効果は、III-V 族半導体電子井戸構造内の二次元電子などについても観測されていることを考えると、GaAs 以外でもより高速なデバイス性能達成が期待される。

本 QD シミュレーションでは、まず ϕ_1 と ϕ_2 の波束挙動の解析とそれらの干渉特性を明らかにする。次に外部からの電場および磁場の印加に伴う AB 効果によって生じるゲート領域における波束の位相変化を求め、デバイス性能としての超高速の 0-1 制御の可能性を検討する。

3. 量子ダイナミクス法の概要

量子ダイナミクス法は量子力学的粒子の運動挙動を粒子の波束の振る舞いとしてその時間発展を計算する手法である。この量子力学的粒子が時間に依存したシュレーディンガー方程式によって記述される⁽⁴⁾⁻⁽⁶⁾。

図1に示す QUIT を二次元で取扱うと

$$\begin{aligned} \phi(x, y, t + \Delta t) = & \phi(x, y, t - \Delta t) \\ & + \left(\frac{i\hbar}{m^*}\right) \left\{ \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} \right\} \{ \phi(x + \Delta r, y, t) \\ & + \phi(x - \Delta r, y, t) + \phi(x, y + \Delta r, t) \\ & + \phi(x, y - \Delta r, t) - 4\phi(x, y, t) \} \\ & - \left(\frac{i2\Delta t}{\hbar}\right) V(x, y) \phi(x, y, t) \quad \cdots \cdots (5) \end{aligned}$$

で表される。ここで、 ϕ は波動関数、 m^* は有効質量、 $\hbar = h/2\pi$ はディラック定数(プランク定数/2π)、 Δr は格子間距離、 Δt はタイムステップ、 V はポテンシャルである。この際、結晶中を運動する電子の状態は

原子の影響を受けているが、原子が規則的な配列をしている場合、電子は真空中の静止質量 m_0 とは異なる有効質量 m^* をもつ自由粒子のように振る舞い、また外部からの電場や磁場の作用に対しても有効質量 m^* の粒子として応答することを考慮している。式(5)により電子がエネルギーと関係づけられるので、電場や磁場などをエネルギー、すなわちポテンシャルとして扱うことのほうが力として扱うよりも有意義である。

初期条件として初期波束を次式のようなガウス波束

$$\phi(x, Y, t=0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp\left\{i(k_x x + k_y y) - \alpha\left(\frac{x^2 + y^2}{2}\right)\right\} \quad \dots\dots\dots (6)$$

として与えることにする。ここに、 $\alpha=8/\omega^2$ はガウス分布の決定するパラメータ、 ω は初期波束の高さの $1/e$ における全幅である。また、 k_x と k_y は x 軸方向と y 軸方向のそれぞれの運動量であり、次式の関係がある。

$$\frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} = E_0 \quad \dots\dots\dots (7)$$

ここに、 E_0 は初期エネルギーである。また、電子の有効質量 m^* は電子の静止質量を m^* とすると、ガリウム・ヒ素中では $m^*=0.6068 \times m_0[\text{a.u.}]$ で与えられる⁽⁶⁾。図2には本計算対象とした二次元QUITの寸法をa.u.単位で表している。また、時間ステップを $\Delta t=0.1$ a.u.、格子間距離を $\Delta r=10.0$ a.u.、初期波束の x 方向の運動量を $p_{ax}=0.0158$ a.u.、初期波束の y 方向の運動量を $p_{ay}=0$ a.u.、ポテンシャル障壁をGaAsとGaAlAsのエネルギー差を想定して0.05 a.u.、ドレン電圧を $V_d=110.22 \times 10^{-5}$ a.u.とそれぞれ置いた。なお、波束のAB効果を誘起するゲート電圧 $V_g=0 \sim 36.74 \times 10^{-5}$ に変化させた。ここで、チャンネルサイズ、初期運動量、ポテンシャル障壁、ドレン電圧、ゲート電圧に対して採用した数値はBandyopadhyayらの値⁽⁷⁾を参考にして決めた。ま

Fig. 2 QUIT size for QD simulations

た、チャンネルを電子がバリスティックに走行しなければならないので、動作電圧を光学フォノンのエネルギー ($30 \text{ mV} \approx 110.22 \times 10^{-5} \text{ a.u.}$) より小さくしなければならない。採用した寸法は標準的のサイズと考えられる。ここでは、固定境界条件を用いて電場のみの計算を行った。

4. 電子波束の干渉挙動

図3は電子がポテンシャル障壁に衝突してチャンネル1と2にへ分かれる瞬間の ϕ_1 と ϕ_2 を示す。ソースから投入されたガウス形の電子波束式(6)がポテンシャル障壁によってチャンネル1と2へ対称的に分かれる様子をよくシミュレートしていることがわかる。

図4は外部から印加されるゲート電圧 V_g によって誘起されるAB効果を示したものである。図4は波束の平均速度 v_x の経過時間に対する変化として表している。時刻 $t=2500$ a.u. で電子がチャンネル1と2に分かれることが、ゲート電圧 $V_g=0$ a.u. と $V_g=36.74 \times 10^{-5}$ a.u. における速度の違いによりわかる。しかし、その速度差は顕著に大きくならない。それは、チャンネル1とチャンネル2の電子波束が外部電場 V_g が印加される前に、ポテンシャル障壁や壁面でそれらの位相が変化してしまうため、外部電場による効果的な

Fig. 3 Probability density distributions of two electronic wave packet

Fig. 4 Mean wave packet velocities in the course of time under electric fields

位相制御が阻害されることによると思われる。しかし、外部電場によって量子干渉効果が誘起されることが検証された。

5. チャネルの量子細線化

5.1 計算方法の概要 ポテンシャル障壁との衝突や電場・磁場の外部ポテンシャルによって電子波束の振動周期が非常に短くなる結果、振動による位相の不安定化を増進されることが予知される。これを避けてドレン領域における波束干渉の効果を促進させるために、チャネル幅を 160 a.u. $\approx$ 80 Å から GaAs の格子定数に近い 10 a.u. $\approx$ 5.6 Å へ量子細線化することを考えた。このことにより、電子波束の挙動を一次元近似することができ、計算負荷を抑え電場・磁場などのポテンシャルの影響をより直接的に調べることができる。そこで、図 5 のような構造の QUIT を計算することにした。

この量子細線化はポテンシャル障壁との衝突や外部ポテンシャルによって電子波束の振動周期が非常に短くなり、ドレン領域での波束干渉の効果が期待される。そこで QD 計算するのに際して、このデバイスを図 6 のように、ソース領域、ゲート領域、ドレン領域を分離し、特にドレン領域では y 軸方向の振動などを排除するため位相差制御が可能で最も計算容易な系に置き換えることを試みた。

既述したように量子細線化することにより、チャネル 1 と 2 の電子波束 ϕ_1 と ϕ_2 は一次元近似が可能となるため、図 6 に示したように計算領域をソース、ゲート、ドレンの各領域に分離して計算を行った。この際、相対位相差 Θ を用いるとドレン領域で得られる電子波束 ϕ はゲート領域における二つの電子波束 ϕ_1

と ϕ_2 との間に

$$|\phi|^2 = |\phi_1 + \phi_2|^2 = 2|\phi_1|^2 \{1 + \cos(\Theta)\} \quad \dots\dots\dots (7)$$

の関係式で表すことができる。

ここでは、三次元因子の外部磁場を二次元因子である電場と同様に式 (7) に適用することができるために式 (4) で定義した四次元フラックス Θ を再び導入する。この Θ とは電場・磁場を印加する前の位相差と印加後の位相差との相対位相差であることを考えると、式 (4) から三次元因子磁場 $\mathbf{B}$ と二次元因子電場 $\mathbf{E}$ が一次元因子である相対位相差 Θ でともに表せることがわかる。この際、電場・磁場を印加する前の位相差を零とすると相対位相差は位相差に等しくなる。ここで適用される時間に依存したシュレーディンガー方程式は式 (5) と同様に、

$$\begin{aligned} \phi(x, t + \Delta t) = & \phi(x, t - \Delta t) + \left(\frac{i\hbar}{m^*} \right) \left\{ \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} \right\} \\ & \times \{ \phi(x + \Delta r, t) + \phi(x - \Delta r, t) - 2\phi(x, t) \} \\ & - \left(\frac{i2\Delta t}{\hbar} \right) V(x) \phi(x, t) \quad \dots\dots\dots (8) \end{aligned}$$

で表される。これによって量子干渉トランジスタにおける電子の振る舞いに関するシミュレーションを行うことができる。この際、初期波束として運動方向などを決定する虚数項を有するガウス波束⁽⁴⁾

$$\begin{aligned} \phi(x, y, t=0) \\ = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp \left[ik_x(x - x_0) - a \left(\frac{(x - x_0)^2}{2} \right) \right] \quad \dots\dots\dots (9) \end{aligned}$$

を与えた。計算に際しては、時間ステップを $\Delta t = 1$ a.u., 格子間距離を $\Delta r = 10.0$ a.u., 波数を $k_x = 0.04692$ a.u. に設定し、ゲート領域に外部ポテンシャルとして電圧(電場)を $V_g = (0, 54.2, 108.4) \times 10^{-5}$ a.u. と変

Fig. 5 Revised QUIT with fine channels

Fig. 6 Simplified model of QUIT

Fig. 7 Mean velocities of electron wave packets in the course of time under the optimum electric fields' control

Fig. 8 Mean velocities of electron wave packets in the course of time under the optimum magnetic fields' control

化させた。また、磁場 $B_g = 0, 0.157, 0.314$ a.u. と変化させて計算を行った。

5.2 計算結果と考察 図8と図9は電子波束の平均速度 v_x [a.u.] の経過時間に対する変化を、電場 V_g と磁場 B_g をそれぞれ外部印加した場合について示したものである。図8, 9より明らかのように、図4と異なり、適切に電場および磁場を印加することにより平均波束流速に著しい差異をもたらすことができ、0-1制御が可能であることを明らかに検証している。また、相対位相差 Θ が零と 2π となる外部ポテンシャル(電圧および磁場)のとき電子波束は強め合い、 Θ が π となる外部ポテンシャル(電圧および磁場)のとき打ち消し合うことがわかる。さらに、波束の平均速度が零になる時間が約 $8000 \text{ a.u.} \approx 0.2 \text{ ps}$ であることから、素子性能としてのスイッチング時間が 0.2 ps 程度と非常に高速に動作することもわかる。実際のデバイスに適用した場合でも遅くとも 2 ps が期待できよう。この値は既存の高速トランジスタ HEMT の動作 $6 \sim 10 \text{ ps}$ に比し超高速であるとともに

Bandyopadhyay⁽⁷⁾ らの計算値 $2 \sim 4 \text{ ps}$ にほぼ一致する。

6. 結 言

本研究では量子ダイナミクス法を用いて GaAs 量子干渉トランジスタの素子性能の解析を試みた。外部電場・磁場により位相差制御を行うために、チャンネルを量子細線化し、デバイス内での障壁による散乱などを防ぎ、さらに、四次元フラックス Θ を導入することにより一次元に帰着させ、時間に依存したシュレーディンガー方程換を差分法を用いて時間発展させた。その結果以下の結論を得た。

(1) 量子干渉トランジスタにおいて外部電場・磁場を印加することにより電子の位相差を制御し電子の平均移動速度に差異を生じさせ、0-1制御が可能であることがわかった。

(2) 量子細線化された量子干渉トランジスタは素子性能としてのスイッチング時間が既存の高速トランジスタ HEMT の動作 $6 \sim 10 \text{ ps}$ より超高速な 2 ps で可能であるとともに Bandyopadhyay らの計算値 $2 \sim 4 \text{ ps}$ にほぼ一致する。

以上により、量子ダイナミクス法を用いて超高速半導体デバイス量子干渉トランジスタの設計支援を行うことは有意義である。

文 献

- (1) 生駒英明・生駒俊明, 化合物半導体デバイス入門, (1995), 161, 培風館.
- (2) 小長井誠, 半導体デバイス入門, (1987), 1, 培風館.
- (3) 栖原敏明, 量子電子工学, (1994), 1, オーム社.
- (4) 飯高敏晃, 量子ダイナミクス入門, (1994), 1, 丸善.
- (5) Endoh, A., *Appl. Phys. Lett.*, **61**(1992), 52-54.
- (6) *Computer Physics Communications*, **63**(1991), 243-258, North-Holland.
- (7) Bandyopadhyay, S., *IEEE IEDM, Tech. Digest*, (1986), 76-79.