

学位論文題名

量子ドット系の輸送現象に関する理論的研究

学位論文内容の要旨

近年、半導体微細加工技術の進歩によって、様々な大きさや形状をもつ電子デバイスが作られるようになり、物性物理学において、“メソスコピック系の物理”と呼ばれる新しい研究分野が誕生した。この系においては、系の大きさと特徴的な長さのスケールフェルミ波長、平均自由行程、および、位相コヒーレンス長との大小関係によって新しい現象が現れる。たとえば、系の大きさが位相コヒーレンス長よりも小さければ、系全体で電子の位相情報が保たれるため、電子輸送現象において、電子波の干渉による局在効果が現れる。また、平均自由行程よりも系が小さくなれば、電子は、その系の中では散乱されずバリスティックに運動でき、散乱は系の端でのみ起こるので、ホール効果における形状依存性などが観測されている。さらに、系を小さくして、フェルミ波長と同程度の大きさの領域に電子を閉じこめると、エネルギー準位の量子化が重要になる。また、小さな系に電子が複数個存在する場合には、電子間の距離が小さいため、電子間相互作用もまた輸送現象に重要な影響を及ぼす。このように、エネルギー準位の量子化と電子間相互作用とが重要になる系は、“量子ドット”と呼ばれ、ここ数年間に、様々な実験的、理論的研究が盛んに行われている。本研究においては、このような量子ドットにおける電子輸送現象の理論的な解析を目的とする。

半導体量子ドットは、その作製上の違いから、おおよそ2種類に分類される。1つは、半導体ヘテロ界面上の2次元電子ガスをその上部に取り付けられた金属ゲートによって閉じこめることで形成されるドット、もう1つは、2重障壁トンネル構造を界面に垂直な方向に円筒型に切り取ることでよって作製されたメサ型のドットである。本研究では主に後者のドットについて研究する。このドットは、前者のドットに比べて、電子を小さな領域に閉じこめることができ、エネルギー準位の量子化の効果が顕著に現れると期待されるからである。

量子ドットの輸送特性において特徴的な現象は、ゲート電圧の関数としてコンダクタンスに現れるクーロンプロケイド振動と、電流-電圧特性で現れるクーロン階段とが挙げられる。従来、これらと類似した現象が、金属微粒子を介しての電子の輸送現象に現れており、電極との間の古典的なキャパシタンスを仮定することで十分理解されている。しかし、半導体量子ドットにおいては、エネルギー準位の量子化のため、金属微粒子での取り扱いでは不十分であり、個々の準位ごとの波動関数の形状の違いも理論に組み入れる必要がある。これは、各状態で波動関数の形が異なるため帯電エネルギーに状態依存性を組み入れることで、一定のキャパシタンスによる記述を修正することである。本論文では、それ以外に、次の2点について考える。1つめは、実際のデバイス、特に、メサ型の量

量子ドットにおいては、薄いトンネル障壁をはさんでリードと結合しているため、リードとの静電的な相互作用は無視できない。また、それを理論に取り込む際には、リードとドットの間の距離もフェルミ波長よりも短いので、リードの電子状態は量子力学的に計算する必要もある。したがって、メサ型の量子ドットに関する実験データを定量的に解析するには、リードによる帯電エネルギーの変化も考慮しなければならない。2つめは、ハートリー近似を越えることである。一般に、電子間相互作用エネルギーが大きく、量子化された1電子準位に縮重がある場合、電子相関が重要になることが知られている。通常、量子ドットの閉じこめポテンシャルは2次元の放物線型ポテンシャルで良く近似される。このようなポテンシャルにおける電子の1電子準位は縮重するため、輸送現象において、電子の多体効果が重要になると期待される。これらの2つの修正を同時に取り扱うことは難しい。そこで我々は別々にこれらの要素を考慮して、その効果について議論する。

まず、ドット内の電子の多体効果を取り入れるために、ドットを孤立したものとして取り扱い、縮重した1電子準位の間隔がクーロン相互作用エネルギーに比べて十分大きいという近似をおこなう。この近似内では、輸送に関係する1電子準位はリードのフェルミエネルギーに最も近い準位のみを考えればよい。したがって、その縮重した有限個の基底関数だけを用いて多体の波動関数を厳密に解くことが可能になり、電子相関を取り入れることができる。輸送特性は、現象論的なトンネルハミルトニアンを摂動として扱うことによって求められる。電流-電圧特性において、多体効果は、1個の電子数の変化に対応したクーロン階段におけるステップに微細構造をもたらす。これは、交換相互作用や電子相関によって多体状態のエネルギー分布が広がるためである。しかし、相関効果は、ドットの中の電子数が増加するに従って弱められる。これは、放物線型ポテンシャルにおける1電子準位の縮重が電子間相互作用によって解けるためである。従って、ドット内の電子数が大きくなると、交換相互作用の効果が支配的になり、Hartree-Fock近似で十分近似できる。線形応答コンダクタンスには、電子数1個の変化に対する基底状態間の遷移が関わり、電流-電圧特性よりもはっきりとした多体効果が現れる。コンダクタンスのピーク間隔は、交換相互作用が支配的であり、等間隔ではなくなる。これは、一定のキャパシタンスによる記述が破綻することを示している。電子相関の顕著な現れとして、基底状態間のスピンの大きさの差が相関効果で1/2以上異なる場合があり、それによって低温で消失するピークも存在することを示した。

次に、帯電エネルギーの状態依存性およびリードとの静電的な相互作用を取り入れるために、リードと結合した量子ドットを考え、Schrödinger 方程式とPoisson方程式をセルフ-consistentに解くことによって、ドットの帯電エネルギーを計算した。また、従来、リードはPoisson方程式の境界条件として古典的に取り扱われていたが、量子ドットとリードの間の距離が近い場合も考慮し、量子ドットと同様、リードの電子状態も完全に量子力学的に計算する。その結果、得られた帯電エネルギーは、孤立したドットの帯電エネルギーと比較すると、リードの電子によるスクリーニング効果によって減少する。この効果は、リードの電子密度が増加するとともに顕著になる。また、メサ型の量子ドットにおいては、ヘテロ界面に平行な方向の閉じこめポテンシャルが、リードにドーピングされた不純物密度とリードの電子密度に強く依存する。リードのフェルミエネルギーを変化させてドットの電子数を増加させると、リードのスクリーニング効果が高まると同時に、閉じこめポテンシャルも弱

まるため、ドットの電子数の関数として帯電エネルギーは極端な減少を示す。これは、リードとの静電的な結合を考慮しないと現れない効果であり、リードの電子密度がパラメータとなっている点で、これまでの孤立ドットを用いたモデルでは記述できないものである。したがって、リードと量子ドットの距離が近く、リードの電子密度が大きい場合においては、従来の古典的なキャパシタンスを用いたモデルおよび孤立ドットモデルは適用できないことを示した。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 徳 田 直 樹
副 査 教 授 中 山 恒 義
副 査 教 授 田 村 信一朗
副 査 助 教 授 明 楽 浩 史

学 位 論 文 題 名

量子ドット系の輸送現象に関する理論的研究

近年、半導体ヘテロ構造における2次元電子系に関する研究が理学と工学の両面から盛んに行われている。最近では、さらに低次元の電子系が作製され、新しい現象が観測されている。その中で、0次元電子系とみなすことができる量子ドットは、人工原子としてその物性が注目されている。この量子ドットでは、リード線を接続することによって電気伝導測定が可能であり、帯電効果のため電子が1つずつ量子ドットを介してトンネルする単電子トンネル現象が観測されている。また、この現象を応用した単電子素子は次世代の集積回路の素子の有望な候補として研究が進められている。

量子ドットの実験的研究は、電子が数百個含まれる比較的大きな量子ドットから始まった。このような大きな量子ドットでは、エネルギー準位の量子化の効果は小さく、電子間相互作用は古典電磁気学の静電容量によりかなり正確に記述できる。ところが最近では、電子が数個しか含まれていない極めて小さな量子ドットが作製され、従来の理論では説明できない現象が数多く観測されている。このような小さな量子ドットではエネルギー準位の量子化の効果が重要であり、個々の一電子準位の電子密度が準位ごとに大きく異なるため電子間相互作用を一定の静電容量により表すことはできない。また、小さな量子ドットでは原子の場合と同様に多体効果が顕著に現れると期待されるが、この効果は従来の静電容量のモデルでは記述できない。さらに、量子ドットに接続されているリード線が量子ドットに及ぼす静電的な相互作用も量子力学的に取り扱う必要があるが、リード線の状態も含めて量子力学的に計算した例はまだない。本論文は、このような多体効果やリード・量子ドット間の静電的相互作用が最近作製された極めて小さな量子ドットの電気伝導特性にもたらす影響を量子力学的に明らかにすることを目的としている。

本論文は4章から構成されている。

第1章では、量子ドット系の輸送現象に関するこれまでの研究の概略と本論文の目的が述べられている。

第2章では、量子ドットにおける多体効果が輸送現象に及ぼす影響を議論している。小さな量子ドットでは原子の場合と同様、交換相互作用や電子相関が重要である。本論文ではこれらの多体効果が電気伝導特性に顕著に現れることを示した。特に、電子相関の効果は、電流・ゲート電圧特性に現れる周期的なピーク構造の中の特定のピークが消失する現象として顕著に現れることを見いだした。

第3章では、量子ドットに近接して接続されているリードと量子ドットとの静電的相互作用が輸送現象に及ぼす影響について述べている。最近の極めて小さい量子ドットについての実験では、構造上量子ドット・リード間の距離が短いため、リードとの静電的相互作用が重

要である。この相互作用が強い場合には、遮蔽効果により電流・ゲート電圧特性に現れるピークの間隔が狭くなるとともに、量子ドットの閉じ込めポテンシャルが弱まることによりエネルギー準位の殻構造を反映したピーク間隔の特徴が消失することを見いだした。

第4章では、本論文の結論と今後の課題が述べられている。

これを要するに、著者は、量子ドット系の電子状態について量子力学的な理論を構築することによって、量子ドット系の輸送現象に関して多くの新知見を得たものであり、量子物理工学と応用物理学の発展に貢献するところ大なるものがある。

よって著者は、北海道大学博士（工学）の学位を授与される資格あるものと認める。