

学位論文題名

導波型電子波デバイスのシミュレーション技術に関する研究

(A Study on Simulation Technologies for Electron Waveguide Devices)

学位論文内容の要旨

20 世紀末以降、電子デバイスの高密度化、高速化、低消費電力化が急速に進み、デバイス寸法がナノメートルのスケールになってきている。ナノスケールでは、電子は波動性をもち、量子効果が顕著になるため、量子力学的な取扱いが必要になる。この量子効果を積極的に利用した量子効果デバイスへの関心が高まっているが、こうしたデバイスは電子の波動性に着目して電子波デバイスと呼ばれることもあり、その特性評価には、有効質量近似したシュレディンガー方程式を解くことが必要となる。

電子波を局所的に閉じ込めて任意の方向に導波させる電子波導波路や導波型の電子波回路のシミュレーションには、境界要素法、モードマッチング法、スペクトラム要素法など、さまざまな数値解析法が用いられているが、解析対象の形状はもとより、ポテンシャルエネルギー、電子の有効質量分布が任意の場合への適用が容易であるということから、特に有限要素法が強力な数値解析法として注目されている。また、電子波回路の設計を行うには、その基本となる電子波導波路不連続による電子波の散乱現象を定量的に把握しておく必要がある。

導波型電子波デバイスのシミュレーションを行う場合、解析の次元としては、1 次元、2 次元、3 次元と問題は多岐にわたり、代表的なものとして、それぞれ量子井戸、量子細線、量子ドットがある。さらに、時間無依存問題、時間依存問題、導波路外部のポテンシャル障壁の高さを無限大と仮定 (ハードウォール) する閉領域問題、導波路外部ポテンシャル障壁の高さの有限性を考慮 (ソフトウォール) する開領域問題があり、これまでは、主に 1 次元、2 次元の時間無依存閉領域問題が取り扱われてきた。

本論文では、まず、これまでの導波型電子波デバイスシミュレーションで取り扱われてきた 2 次元時間無依存問題に対して有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、閉領域問題、開領域問題に適用して、その妥当性、有効性を確認している。また、磁界が印加された 2 次元時間無依存問題に対して、光・電波の分野で有効な吸収境界条件として知られている完全整合層 (PML) を導入し、モード展開を必要としない有限要素法の定式化を行い、閉領域問題に適用して、その妥当性、有効性を確認している。次に、これまであまり議論されてこなかった 2 次元時間依存問題に対しても PML を導入し、有限要素時間領域ビーム伝搬法に基づく解析法を提案するとともに、具体的に定式化を行い、閉領域問題に適用して、周波数領域での有限要素法による解析結果との比較から、その妥当性・有効性を確認している。さらに、3 次元の時間無依存問題に対しても有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、閉領域問題に適用して、その妥当性、有効性を確認している。

本論文の構成は、以下のとおりである。

第 1 章では、研究背景および研究の目的について述べる。

第 2 章では、時間無依存閉領域電子波導波路不連続の 2 次元有限要素法解析について述べ、ハードウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。具体的には、有効質量近

似した時間に依存しない2次元シュレディンガー方程式の有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路方向性結合器および電子波導波路直角バンドに適用し、それらの散乱特性を評価している。また、外部摂動として磁界が印加された電子波導波路不連続の散乱特性の解析に対して、PMLを用いたモード展開を必要としない有限要素法の定式化を行い、磁界が印加されたポテンシャルエネルギー無限大の量子ドットを有する電子波導波路および二重障壁構造を有する電子波導波路に適用し、それらの散乱特性を評価している。

第3章では、時間無依存開領域電子波導波路不連続の2次元有限要素法解析について述べ、ソフトウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。具体的には、開領域電子波回路に対して有効質量近似した時間に依存しない2次元シュレディンガー方程式の有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路共振器に適用し、その散乱特性を評価するとともに、閉領域の場合との比較を行っている。また、ここで述べた解析法を電子波導波路方向性結合器に適用し、伝搬方向の不連続による干渉の効果と結合領域におけるスーパーモードによる横方向の干渉について考察を行っている。

第4章では、時間依存閉領域電子波導波路不連続の2次元有限要素時間領域ビーム伝搬法解析について述べ、ハードウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。また、パルスの不要反射を防止するため、PMLを入出力ポート端に導入することについても述べる。具体的には、有効質量近似した時間に依存する2次元シュレディンガー方程式の有限要素時間領域ビーム伝搬法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路共振器に適用し、その散乱特性を評価している。

第5章では、時間無依存開領域電子波導波路不連続の3次元有限要素法解析について述べ、ハードウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。具体的には、有効質量近似した時間に依存しない3次元シュレディンガー方程式の有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路共振器に適用し、その散乱特性を評価している。

第6章では、本研究によって得られた成果を取りまとめて述べる。

学位論文審査の要旨

主査	特任教授	小柴正則
副査	教授	宮永喜一
副査	教授	野島俊雄
副査	教授	小川恭孝
副査	准教授	齊藤晋聖

学位論文題名

導波型電子波デバイスのシミュレーション技術に関する研究

(A Study on Simulation Technologies for Electron Waveguide Devices)

20世紀末以降、電子デバイスの高密度化、高速化、低消費電力化が急速に進み、デバイス寸法がナノメートルのスケールになってきている。ナノスケールでは、電子は波動性をもち、量子効果が顕著になるため、量子力学的な取扱いが必要になる。この量子効果を積極的に利用した量子効果デバイスへの関心が高まっているが、こうしたデバイスは電子の波動性に着目して電子波デバイスと呼ばれることもあり、その特性評価には、有効質量近似したシュレディンガー方程式を解くことが必要となる。

電子波を局所的に閉じ込めて任意の方向に導波させる電子波導波路や導波型の電子波回路のシミュレーションには、境界要素法、モードマッチング法、スペクトラム要素法など、さまざまな数値解析法が用いられているが、解析対象の形状はもとより、ポテンシャルエネルギー、電子の有効質量分布が任意の場合への適用が容易であるということから、特に有限要素法が強力な数値解析法として注目されている。また、電子波回路の設計を行うには、その基本となる電子波導波路不連続による電子波の散乱現象を定量的に把握しておく必要がある。

導波型電子波デバイスのシミュレーションを行う場合、解析の次元としては、1次元、2次元、3次元と問題は多岐にわたり、代表的なものとして、それぞれ量子井戸、量子細線、量子ドットがある。さらに、時間無依存問題、時間依存問題、導波路外部のポテンシャル障壁の高さを無限大と仮定（ハードウォール）する閉領域問題、導波路外部ポテンシャル障壁の高さの有限性を考慮（ソフトウォール）する開領域問題があり、これまでは、主に1次元、2次元の時間無依存閉領域問題が取り扱われてきた。

本論文では、まず、これまでの導波型電子波デバイスシミュレーションで取り扱われてきた2次元時間無依存問題に対して有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、閉領域問題、開領域問題に適用して、その妥当性、有効性を確認している。また、磁界が印加された2次元時間無依存問題に対して、光・電波の分野で有効な吸収境界条件として知られている完全整合層(PML)を導入し、モード展開を必要としない有限要素法の定式化を行い、閉領域問題に適用して、その妥当性、有効性を確認している。次に、これまであまり議論されてこなかった2次元時間依存問題に対してもPMLを導入し、有限要素時間領域ビーム伝搬法に基づく解析法を提案するとともに、具体的に定式化を行い、閉領域問題に適用して、周波数領域での有限要素法による解析結果との比較から、その妥当性・有効性

を確認している。さらに、3次元の時間無依存問題に対しても有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、閉領域問題に適用して、その妥当性、有効性を確認している。

本論文の構成は、以下のとおりである。

第1章では、研究背景および研究の目的について述べている。

第2章では、時間無依存閉領域電子波導波路不連続の2次元有限要素法解析について述べ、ハードウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。具体的には、有効質量近似した時間に依存しない2次元シュレディンガー方程式の有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路方向性結合器および電子波導波路直角バンドに適用し、それらの散乱特性を評価している。また、外部摂動として磁界が印加された電子波導波路不連続の散乱特性の解析に対して、PMLを用いたモード展開を必要としない有限要素法の定式化を行い、磁界が印加されたポテンシャルエネルギー無限大の量子ドットを有する電子波導波路および二重障壁構造を有する電子波導波路に適用し、それらの散乱特性を評価している。

第3章では、時間無依存開領域電子波導波路不連続の2次元有限要素法解析について述べ、ソフトウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。具体的には、開領域電子波回路に対して有効質量近似した時間に依存しない2次元シュレディンガー方程式の有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路共振器に適用し、その散乱特性を評価するとともに、閉領域の場合との比較を行っている。また、ここで述べた解析法を電子波導波路方向性結合器に適用し、伝搬方向の不連続による干渉の効果と結合領域におけるスーパーモードによる横方向の干渉について考察を行っている。

第4章では、時間依存閉領域電子波導波路不連続の2次元有限要素時間領域ビーム伝搬法解析について述べ、ハードウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。また、パルスの不要反射を防止するため、PMLを入出力ポート端に導入することについても述べている。具体的には、有効質量近似した時間に依存する2次元シュレディンガー方程式の有限要素時間領域ビーム伝搬法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路共振器に適用し、その散乱特性を評価している。

第5章では、時間無依存開領域電子波導波路不連続の3次元有限要素法解析について述べ、ハードウォールをもつ電子波導波路不連続の散乱特性の解析・評価を行っている。具体的には、有効質量近似した時間に依存しない3次元シュレディンガー方程式の有限要素法に基づく解析法の定式化を行い、電子波導波路共振器に適用し、その散乱特性を評価している。

第6章では、本研究によって得られた成果を取りまとめている。

これを要するに、著者は、量子効果を積極的に利用した電子波デバイス、とりわけ導波路構造を内蔵した導波型電子波デバイスのシミュレーション技術に関して、時間無依存問題、時間依存問題のいずれにも、また、閉領域問題、開領域問題のいずれにも、さらには外部摂動として磁界が印加された場合にも適用可能な有限要素法に基づくシミュレーション理論の開発を行うとともに、導波型電子波デバイスの2次元ならびに3次元解析のための有益な知見を得ており、シミュレーション科学に関する学術分野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(情報科学)の学位を授与される資格あるものと認める。