

半導体物理学 第 11 回

勝本信吾

東京大学物性研究所

2011 年 6 月 26 日

1.3 ヘテロ接合 2 次元電子系

量子閉じ込めの中でも，工業応用分野，基礎物理分野の両方で最も良く使用されている単一ヘテロ接合について考える．

1.3.1 三角ポテンシャル近似

単一ヘテロ接合に 2 次元電子系を閉じ込めるには，大きなバンドギャップを持つ方の半導体にドナーをドーピングする (変調ドーピング, modulation doping)．典型的な伝導帯のバンドダイアグラムを描くと，図 8.6 のようになり，理想的にはドナーはすべてイオン化して正電荷の層を形成し，これを遮蔽する形でヘテロ接合面に 2 次元電子が形成される．図 8.6 では，最もポピュラーな GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:Si について概念図を示している．これを見てすぐわかるように，Si ドナーの作る電場を GaAs 側で遮蔽するのは 2 次元電子自身であるから，GaAs 側で 2 次元電子を閉じ込めているポテンシャルの形状は 2 次元電子自身が決定にあずかっていることになる．従って，ポテンシャル形状と波動関数が無撞着になるように波動方程式を解く必要があり，これは，ある意味平均場近似で Hartree 項を取り入れた計算をしていることになる．

しかしまずは，図 8.6 のポテンシャルを簡単な下三角ポテンシャルで近似することを考える．

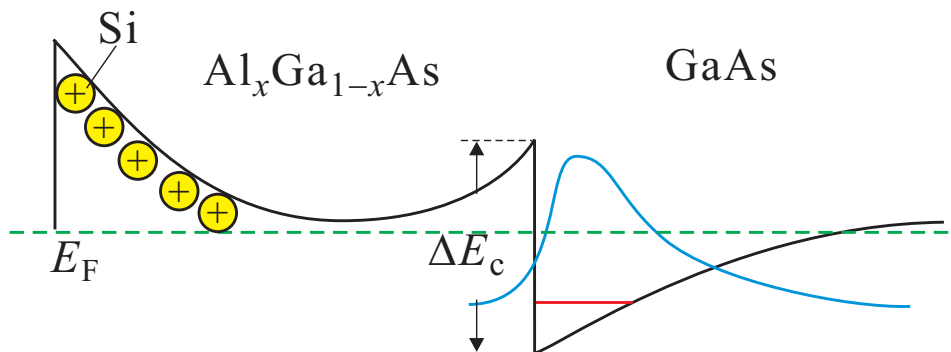


図 8.6 ヘテロ接合 2 次元電子系伝導帯ポテンシャルの概略図．青い線で描いたのはヘテロ界面に束縛されている 2 次元電子の界面垂直方向の波動関数振幅の概形．

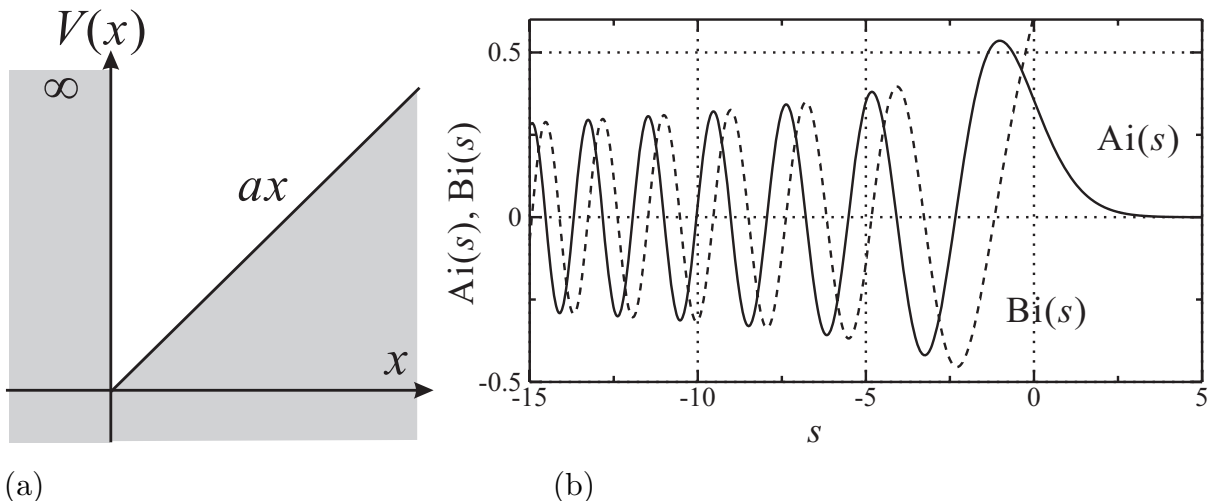


図 8.7 (a) 三角ポテンシャルの模式図 . (b) エアリ関数 .

これはやはり量子力学で良く知られた問題で、「落下防止の壁がある斜面」の問題と見ることもできる． x 軸上の 1 次元問題と考え，時間依存部分を分離した Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \psi = E\psi, \quad V(x) = \begin{cases} ax & (x > 0, \quad a > 0) \\ \infty & (x \leq 0) \end{cases} \quad (8.1)$$

を考える．次の変数変換を行う．

$$s = \left(\frac{2ma}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x - \frac{E}{a}\right). \quad (8.2)$$

すると，Schödinger 方程式は

$$\frac{d^2\psi}{ds^2} = s\psi \quad (8.3)$$

という形になる．これは，エアリ (Airy) あるいはストークス (Stokes) の微分方程式と呼ばれる．その解は，エアリ関数と呼ばれ， $s \rightarrow \infty$ の境界条件により， $\psi \rightarrow 0$ となるものを Ai ， $\psi \rightarrow \infty$ となるものを Bi と記す．その振舞いを図 8.7(b) に示した．

量子力学の波動関数の基底系としては無論，無限遠でゼロになる条件より Ai を採用すべきである． $s \rightarrow \pm\infty$ の漸近形は

$$Ai(s) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}s^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}s^{3/2}\right) \quad (s \rightarrow \infty) \quad (8.4)$$

$$\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}|s|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|s|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (s \rightarrow -\infty) \quad (8.5)$$

と与えられている．

$x < 0$ では $V = \infty$ より， $x = 0$ の境界条件は $\psi(+0) = 0$ である．これより， $Ai(s)$ ゼロ点が $x = 0$ に来なければならない． Ai のゼロ点を絶対値の小さい順に $s_1, s_2, \dots, s_n, \dots$ と書くと，

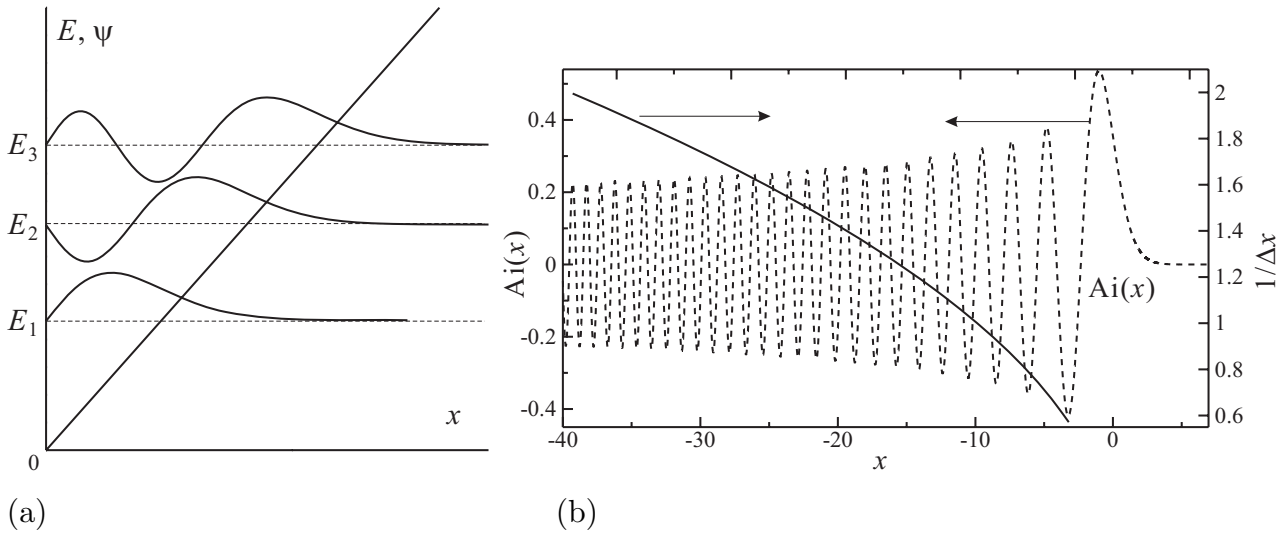


図 8.8 (a) 三角ポテンシャル中のエネルギー固有値と波動関数．エネルギーの低い順に $n = 1, 2, 3$ について描いたもの．(b) エアリ関数のゼロ点の間隔 Δx を計算し， $1/\Delta x$ をこのゼロ点の中心に対してプロットしたもの．エアリ関数そのものも破線で描かれている．

(8.2) より n に対応するエネルギー固有値 E_n が

$$E_n = - \left(\frac{\hbar^2 a^2}{2m} \right)^{1/3} s_n \quad (8.6)$$

と得られる．漸近形 (8.5) から，

$$s_n \sim - \left(\frac{3\pi(4n-1)}{8} \right)^{2/3} \quad (8.7)$$

が，大きな n に対する s_n の漸近解である．

図 8.6 にも描かれているように，界面付近はスペーサー層と称して AlGaAs 層にもドーピングをしない．従って，2次元電子の面密度を n_{2d} と置くと，AlGaAs 側にかかる界面付近の電場は比誘電率を ϵ として，

$$\mathcal{E} = \frac{en_{2d}}{\epsilon\epsilon_0} \quad (8.8)$$

である．最も簡単な近似として，GaAs 側も (ϵ は同じとし) 同じ \mathcal{E} がかかっており，これがそのまま三角ポテンシャルを形成している，と考える．すると，基底状態エネルギー，波動関数は，

$$E_1 = |s_1| \left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{e^2 n_{2d}}{\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \right]^{1/3}, \quad \psi(x) \propto \text{Ai} \left[|s_1| \left(\frac{e\mathcal{E}x}{E_1} - 1 \right) \right] \quad (8.9)$$

と書くことができる．

1.3.2 自己無撞着計算

三角ポテンシャル近似は，ポテンシャルの深い Si-MOS 系ではそれほど悪くはないが，GaAs/AlGaAs ヘテロ接合系ではポテンシャルが浅く，あまり良い結果を与えない．現在では，

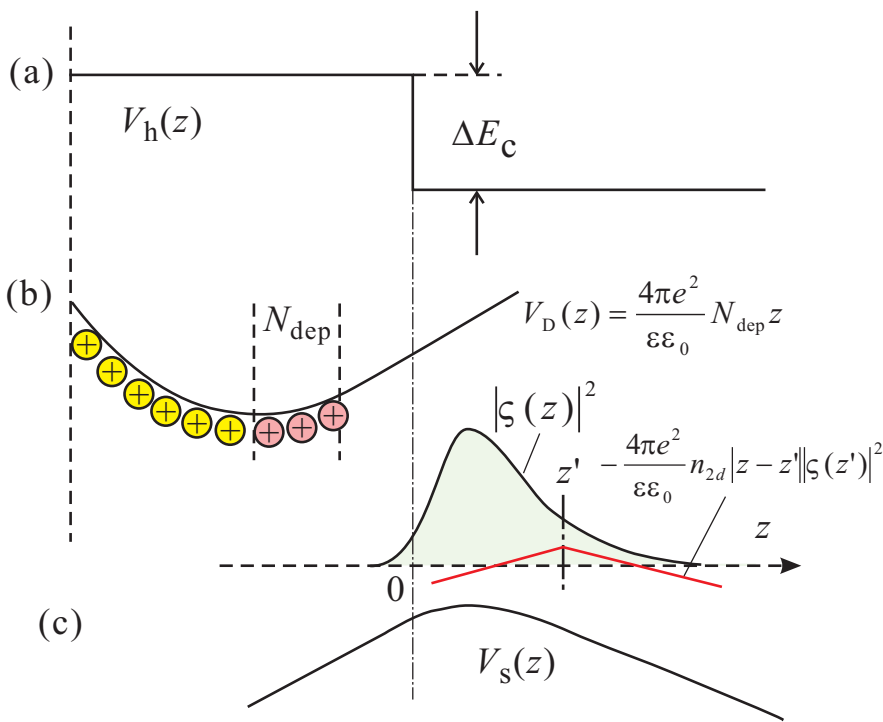


図 8.9 自己無撞着解を求める場合の 3 種類のポテンシャルを模式的に示した。(b) の $V_D(z)$ では、黄色く示したドナーは Schottky 障壁の遮蔽に使用され、薄赤色で示した N_{dep} がバルク側の静電ポテンシャルを形成する。(c) の赤い線は一点鎖線で示した z' 位置の 2DEG シート電荷が作るポテンシャル。2DEG 全体では下に示したようなポテンシャルとなり、バルク内部では (b) のポテンシャルと相殺する。

Hartree 計算は PC でも容易である*1。

どのような問題を考えるのか、見ておこう。考えなければならないのは、図 8.6 のようなポテンシャル内の 1 次元問題である。2 次元面を xy 面、それに垂直方向を z 軸 (バルク内部方向を正) に取る。まず、ベースとして、ヘテロ接合面 ($z = 0$ とする) の所に ΔE_c だけの飛びがある、ヘテロ界面によるポテンシャル V_h がある。これは rigid band 近似により不変とする。次に、図の左側から見て行くと、Ch.7 5.1 節で見た Schottky 障壁があり、表面準位のところに相当量の負電荷が溜まっている。しかし、この負電荷による電場はその右にあるイオン化した Si ドナーが形成する正電荷層によって打ち消されるので直接 2 次元電子系に影響を及ぼすことはない*2。Schottky 障壁のキャンセルに使用した以外のドナーの単位面積当たりの数を N_{dep} とすると、その電荷がつくる電場はドナー域の外側で Gauss の定理により $4\pi e N_{\text{dep}}/\epsilon\epsilon_0$ 、従って、これによるポテンシャルは、

$$V_D(z) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0} N_{\text{dep}} z \quad (8.10)$$

である。以上で、前節で見た三角ポテンシャルがヘテロ界面に形成され、電子は界面に押し付けられて z 方向には量子化エネルギー準位が形成され、ゼロ点振動による最低準位のみ電子が分布した場合、 xy 面内の運動は自由であるから 2 次元電子系 (2DEG) が生じる。

*1 ただし、バンド構造が少し複雑になると、たちまち計算は容易でなくなり、収束の良いプログラムを書くにはそれなりのスキルが必要になる。更に、 z 方向の閉じ込めによって xy 面内の分散が変化するなど、場合によっては (特にスピン軌道相互作用が強い場合など) バンド構造まで戻って繰り返し計算する必要が生じる場合もあり、このような時には、かなり大規模な計算になる。

*2 実際の 2 次元電子系設計においては、この Schottky 障壁をキャンセルする部分がかなり重要である。設計がまずいと 2 次元電子系が形成されない。逆に濃度が高いと、平行伝導度 (parallel conduction) が出たり、ゲートに回答しなくなったりする。

この 2DEG 自身もその負電荷によりポテンシャルを発生するのでこれを自己無撞着に取り入れる必要がある (Hartree 近似) . 結果として発生する 2DEG の単位面積当り濃度を n_{2d} , また , 2DEG の波動関数を $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y)\zeta(z)$ と変数分離して書く . z 方向波動関数はすべての 2 次元電子が最低準位にのみ分布している場合を考えると共通である . この時 , $\zeta(z)$ に関して , 物理的には全く異なる現象であるが取扱い上 Bose 凝縮と類似の事が起こる . すなわち , 仮想実験としてある時点で 2 次元電子の位置座標をすべて測定することを行ったとすると , xy 面内には一様であり , 逆に z 位置を z' に決めた場合のシート内の電荷濃度は

$$-en(z') = -en_{2d}|\zeta(z')|^2 \quad (8.11)$$

である . $\zeta(z)$ は多体 (一体でも関数型は同じ) 波動関数の z 方向成分であったが , 全電子に共通のため電子を便宜上区別する指数が取れてその絶対値 2 乗は確率密度でありながら , 電荷密度という古典的な意味合いを持つ . この 2 次元的電荷シートが作るポテンシャルはやはり Gauss の定理によって計算される電場から z 座標のみに依存し ,

$$v(z, z') = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0}n_{2d}|z - z'|\zeta(z')^2$$

である . 結局 2DEG が自分自身に対して形成するポテンシャルは

$$V_s(z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0}n_{2d} \int_{-\xi}^{\infty} |z - z'|\zeta(z')^2 dz' \quad (8.12)$$

である . ξ は $\zeta(z)$ が障壁中に染み込む侵入長よりも適当に長く取る . また , N_{dep} が作るポテンシャル (8.10) は , 十分バルク内側では n_{2d} によって遮蔽されると考えれば $N_{\text{dep}}=n_{2d}$ である .

以上よりポテンシャルとして

$$V(z) = V_h(z) + V_D(z) + V_s(z) = V_h(z) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0}N_{\text{dep}} \left(z - \int_{-\xi}^{\infty} |z - z'|\zeta(z')^2 dz' \right) \quad (8.13)$$

を用いて z 方向の Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \zeta(z) = E_z \zeta(z) \quad (8.14)$$

を解くことが , Hartree 近似 (自己無撞着) 解を得る問題である*³ .

GaAs の伝導帯のように , 単一の等方的な谷を持つ場合 , バリア中での有効質量や誘電率の変化を無視する近似であれば , 初期解として前節の三角ポテンシャル近似で得られたものを取り , (8.12) を静的に加えたポテンシャル問題を解いて , 解から (8.12) を作る , というサイクルを $\zeta(z)$ が収束するまで繰り返すことで自己無撞着解が得られる .

1.3.3 Fang-Howard 近似

Fang-Howard 近似は

$$\zeta(x) = \sqrt{\frac{b^2}{2}} x \exp\left(-\frac{bx}{2}\right) \quad (8.15)$$

*³ ζ の規格化条件 $\int_{-\xi}^{\infty} \zeta(z) dz = 1$ はもちろん , 必要 .

を試行関数， b を変分パラメーターとして変分法を行うものである．変分にはやや面倒なところがあり詳細は略すが結果は

$$b^3 = \frac{48\pi me^2}{\epsilon\epsilon_0\hbar^2} \left(\frac{11}{32}n_{2d} + N_{\text{dep}} \right) \quad (8.16)$$

となる．更に近似を良くするには，AlGaAs 層への波動関数の沁み出しを考慮しなければならない．これを考慮した変分法の計算は安藤により得られており，自己無撞着解とほぼ同じ精度を持つ解を得ることができる．

これら変分法の利点は，解析解が得られることで，この解を使用して更に様々な現象を理論的に調べる際には大変便利である．

2 量子輸送の散乱形式

本講義での量子輸送はすべてこの散乱形式の理論に立脚して考える．散乱形式理論はもちろん万能の理論ではなく，限界ももちろんあるが，1960年代から構築され，80年代後半から精力的に開発された強力な考え方であり，量子輸送入門にふさわしいものである．

「散乱形式」は，量子力学的伝導体を記述するのに，これを量子回路と捉える．量子回路はもちろん，波動関数が流れるもので，通常の電子回路とは異なる量子力学に基づく規則で考えなければならない．これから量子回路を構築するための材料 (building block) を整備していこう．

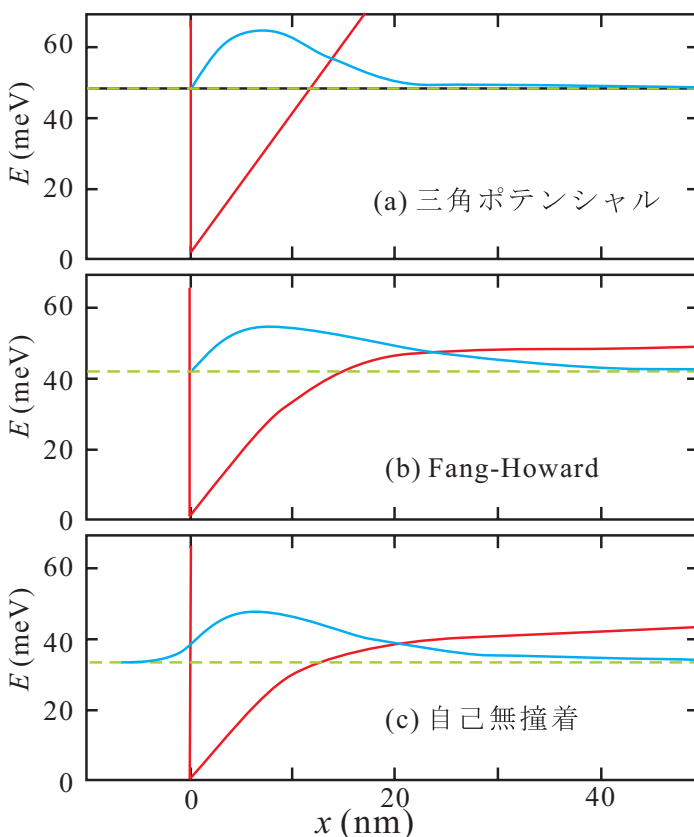


図 8.10 $n_{2d} = 3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ を仮定し， $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As-GaAs}$ のパラメーターに対して 3 種類の方法で波動関数，エネルギー準位，(b)，(c) についてはポテンシャルを計算したもの．

2.1 量子細線の電気伝導

量子細線すなわち 1 次元系は、波動関数の流れを引き起こすのに最低必要な次元を有し、量子回路を構築するための最も基本となるものである。まず、具体的に理想的な 1 次元系をどのように作製するかを見て、実際にどのような伝導が得られているか見た後に一般的な理想的 1 次元系の伝導を考えよう。

2.1.1 伝導チャネル

上で見た 2 次元電子系 (two-dimensional electron gas, 2DEG) を更に細長い領域に閉じ込めて電気伝導を調べる。ここまで、2 次元面に垂直方向を x 軸としてきたが、慣習に従い、これを z 軸に取り直し、2 次元面を xy 面としよう。ここでは、「細長い」領域とは、図 8.11(a) のように、広い領域から何らかの方法で 2DEG の伝導領域を制限し、次第に細長い領域に閉じ込めたものを指す。この図では斜線で引いたような形状に微細加工した金属を 2DEG 上に乗せて、5.1 節で見たショットキー障壁を形成する。通常ショットキーゲートと称するが、今の場合、2 つに別れた形状のためスプリットゲートとも呼ぶ。このゲートに負電圧を加えると、点線で示したように空乏領域がゲート下に広がり、細長い伝導領域ができる。秋山先生の講義で出てきた量子細線の両端に 2DEG の電極を付けたものと考えても良いが、いずれにしても、ここでは、量子細線として、2 次元だった電子の運動方向をを緩やかに細長い領域の長手方向に変化させるものとする。

これを図 8.11(b) のようにモデル化し、長手方向を x 軸に取って 2 次元領域から入射する電子は全エネルギー $E = E_{kx} + E_{ky}$ を変化させずにこの領域を通過する、ただし、 x, y 各方向の運動エネルギー E_{kx}, E_{ky} は閉じ込めの壁からの反射によってエネルギーロスなく相互に移り変わるとする (断熱近似)。

簡単のため閉じ込めは矩形的でポテンシャルの高さは無限大とすると、 y 方向の波動関数は、閉じ込め幅を W として、 $\varphi_n(y) = \cos(n\pi y/2W)$ (n は奇数)、 $\sin(n\pi y/2W)$ (n は偶数) である。幅の変化は十分緩やかで x と y で変数分離でき $\psi(x, y) = \varphi_n(y)\phi(x)$ と書けるとする。

$$\begin{aligned} H\psi(x, y) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi_n(y)\phi(x) \\ &= \varphi_n(y) \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{n\pi}{2W} \right)^2 \right) \phi(x) = E\varphi_n(y)\phi(x) \end{aligned} \quad (8.17)$$

となる。(8.17) は局所的な近似であり、各 x についてこれが成立するとすると、 x 方向に関しては、

$$V_{\text{eff}}(n, x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2W(x)} \right)^2 \quad (8.18)$$

だけの有効ポテンシャルを持つ 1 次元問題となる。この様子を描いたものが、図 8.11(b) の下の図である。 y 方向の準位量子化 n によって $V_{\text{eff}}(n, x)$ は離散的に変化する。結局中央部分では各

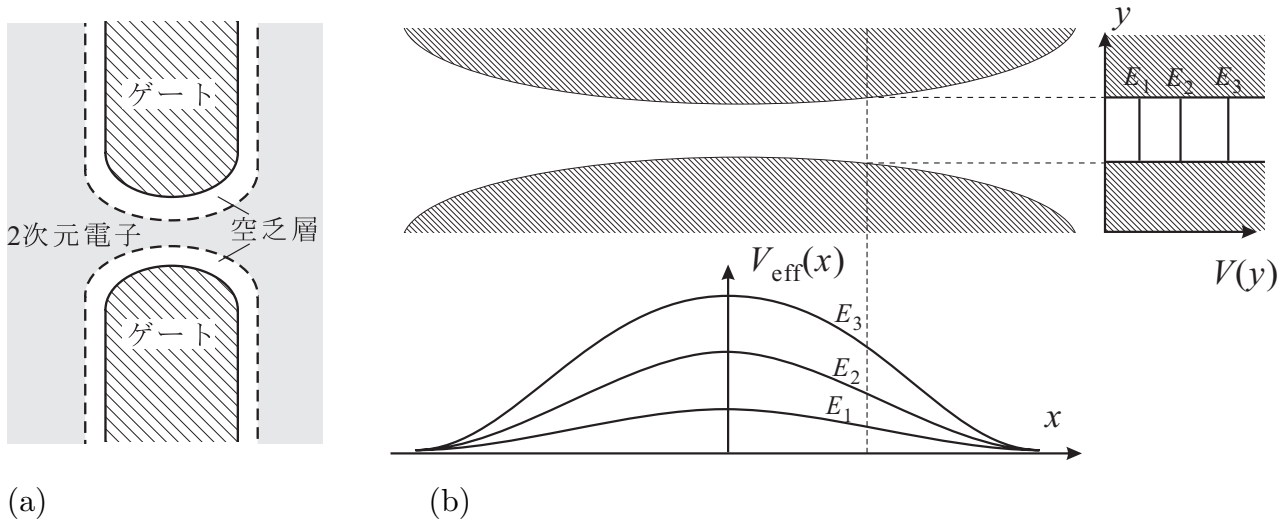


図 8.11 (a) 量子ポイントコンタクト (Quantum Point Contact, QPC, 後述) の模式図 . (b) QPC の簡単なモデル . 上 : 実空間で斜線部分からは電子が排除され, 空白部分に 1 次元的に閉じ込められているとする . 右の図は, 点線で示した断面での閉じ込めポテンシャル . 離散化固有エネルギー $E_{1,2,3}$ は, 下図の 3 つの有効ポテンシャルに対応 . 下 : 式 (8.18) の有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}(x)$ を模式的に書いたもの .

電子のエネルギー分配状態は

$$E_{\text{tot}} = E_{kx}(n, x) + V_{\text{eff}}(n, x) \quad (8.19)$$

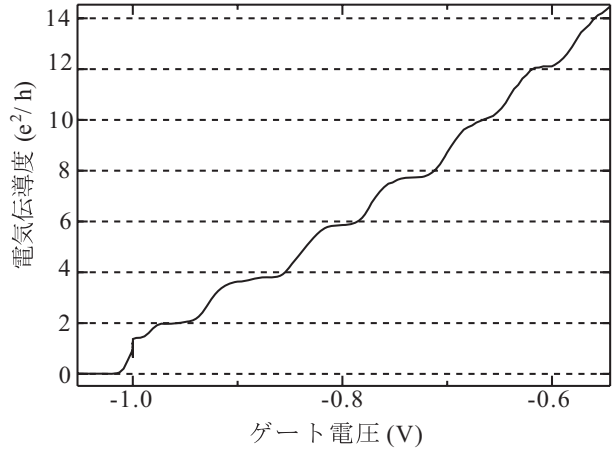
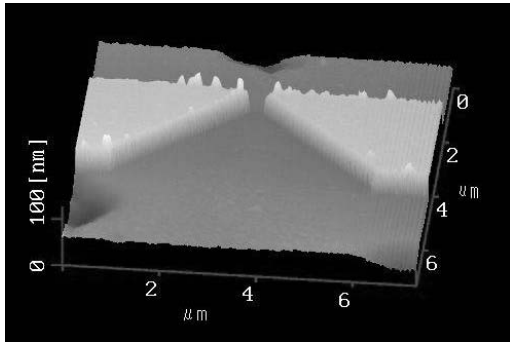
であり, n で指数付けされている 1 次元状態と考えることができる . このような 1 次元伝導状態を伝導チャネル (conductance channel) と呼ぶ . 各伝導チャネルの状態密度は, 式 (8.1) の $d_f = 1$ で表されることになる . 上記 $E_{kx}(n, x)$ はチャネル毎に異なるから, 全体の E_F は固定されており, k_{xF} はチャネル毎に定義され, 状態密度もチャネル別に決まる .

2.1.2 量子ポイントコンタクトの電気伝導実験

実際に図 8.11(a) のような構造を作って伝導を調べた実験を見てみよう . 図のキャプションにも記入したように, 短い量子細線に広い「電極」がついた構造を量子ポイントコンタクト (quantum point contact, QPC) と呼ぶ . ゲートに加える負電圧の大きさを増加させると, (8.18) の有効ポテンシャルは $W(x)$ の現象に伴い高くなり, 細線部分をポテンシャルに妨げられずに通過できるチャネルの数が減少する .

図 8.12(a) は実際に微細加工で作ったスプリットゲートを原子間力顕微鏡 (AFM) で観察した像 . 図 8.12(b) は, ゲート電圧 V_g に対して QPC の電気伝導度 G (流れる電流を, 両側の電極の電位差 (化学ポテンシャル差を e で割ったもの) で割ったもの) をプロットしたものである . G が V_g に対して段階的に変化しており, 階段の高さはほぼ一定で $2e^2/h$ であることがわかる . すなわち, G は $2e^2/h$ の整数倍に量子化されている . これと, QPC を通る伝導チャネル数に関する考察から, 「1 つの伝導チャネルの伝導度は $2e^2/h$ である」という結論が実験的に導き出せる .

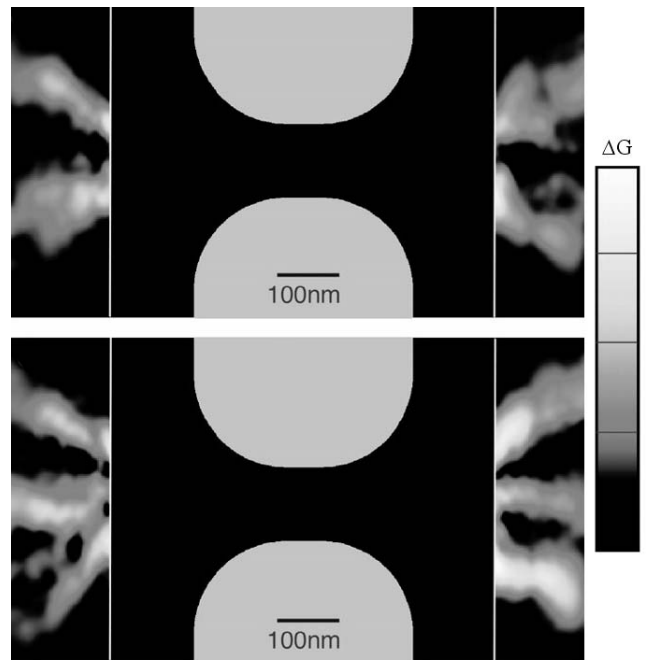
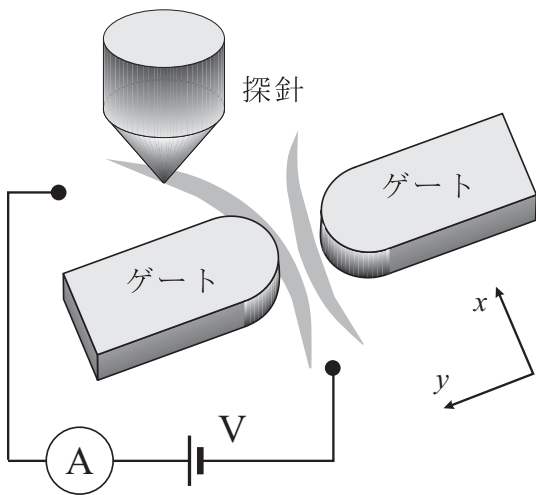
もちろん, これは「こう見ると自然」というだけであって図 8.12(b) の階段構造が実際に伝



(a)

(b)

図 8.12 (a)QPC 構造の原子間力顕微鏡像．白く浮き上がって見えているのがゲート電極．下地は AlGaAs/GaAs 2次元電子系．(b) ゲート電圧に対して QPC の伝導度をプロットしたもの．測定温度は 30mK．



(a)

(b)

図 8.13 (a)QPC から流れ出る波動関数密度を走査プローブ顕微鏡 (SPM) を使用して測定するための実験のセットアップ．QPC の伝導度を測定しながら，SPM の探針を走査する．(b) このセットアップを使って得られた伝導度の量子化値からの「ずれ」の像．中央部分は原子間力顕微鏡像から得られた QPC 構造を描いたもの (形状は正確だが像そのものではない)．上は $n_{\text{ch}} = 2$ の伝導度ステップでの測定，下は 3 のステップでの測定．(データは Topinka *et al.*, Science **289**, 2323 (2000) より)

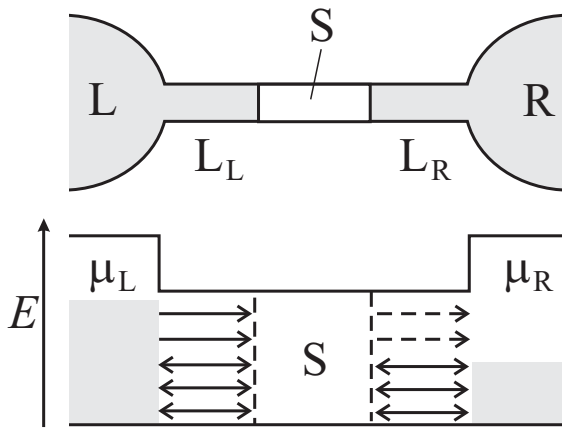


図 8.14 単チャンネルの伝導度を導くための簡単なモデル．左 (L) と右 (R) に熱平衡な電子溜めがあり，化学ポテンシャル μ_L, μ_R を持っている．これらには，1 次元的な電子を供給するための散乱のない導線 L_L, L_R がつながっている． $\mu_L - \mu_R$ の分の電子が L から R へ流れる．

導チャンネルの増減に関係しているかどうかは，これだけでは明らかではないが，図 8.13 のような実験があり，この点も実験的に明らかにされている．図 8.13 の実験では，QPC の伝導度が $n \times 2e^2/h$ (n は整数) のステップの上 (プラトー) にある時に，原子間力顕微鏡 (AFM) の針を QPC の近くに下ろす．すると，QPC の伝導度の方にわずかなシフトが生じる．探針を動かしながら，このシフトをプロットすると，図 8.13(b) のように， $n = 2$ のプラトーでは 2 つの腹をもった波が流れ出ている様子が， $n = 3$ では 3 つ， $n = 1$ では 1 つになる様子がわかる．これから，細線中での y 方向の定在波の腹の数，すなわち細線を透過するチャンネル数と伝導度の量子化数 n とが等しいことが実験的に示された*4．

ただ，まだ，なぜ「針を波動関数の腹部分に近づけるとプラトー伝導度に影響があるか」という実験の原理が明らかにされていない．そこで，それを調べるべく，また，「どうして $2e^2/h$ で量子化されるかも調べるべく，簡単なモデルで考えてみる．

2.1.3 単チャンネルの伝導度

単チャンネルの伝導度を理論的に定めるため，図 8.14 のような状況設定を行い，次のように仮定する．

1. 2 つの導線と試料 S の中では， μ_R 以下の状態はすべて占有されている．
2. L_L の中では更に，速度が右向きでエネルギー μ_L 以下の状態はすべて占有されている．
3. 電子溜めは十分大きく，ここで考えている電流では熱平衡を乱されない．また，電子溜めに到達した電子はすべて溜めに取り込まれる．

速度右向きの電子は一定の割合で導線から出て行くので，2. は R_L から L_L へ電子がこれに対して十分供給されていることを意味する．まず，導線と試料との間では反射がない (透過率 $T = 1$) とする．

*4 例えば，チャンネル数が 3 であれば，腹が 1, 2, 3 の波が重なって出るはずではないか，と思われた方もいるとおもう．確かにそうなのだが，1 次元系の状態密度は，バンドエッジを ϵ_0 として $1/\sqrt{\epsilon - \epsilon_0}$ と変化するので，実際には最も上にあるチャンネルの波動関数振幅が測定にかかる．

伝導体の分散関係を $E(k)$ と書くと波数 k の状態が運ぶ電流 $j(k)$ は

$$j(k) = \frac{e}{L} v_g = \frac{e}{\hbar L} \frac{dE(k)}{dk} \quad (8.20)$$

となる． L は、波動関数の規格化の長さである． $E(k)$ が μ_R と μ_L との間にある状態が電流に寄与するので、全電流 J は

$$J = \int_{k_R}^{k_L} j(k) L \frac{dk}{2\pi} = \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE = \frac{e}{h} (\mu_L - \mu_R) = \frac{e^2}{h} V \quad (8.21)$$

となる．ここで、 $V = (\mu_L - \mu_R)/e$ は左右の溜め間にかかっている電圧である．以上より系の伝導度 G は

$$G = \frac{e^2}{h} \equiv G_q \equiv R_q^{-1} \quad (8.22)$$

となる．(8.22) が最も簡単な無反射単バンドの場合の伝導度である．

以上の考察では、スピン自由度を考えていなかった．電子のスピン縮退度 2 をつけて単チャネルの伝導度は $2e^2/h$ となり、前節の実験結果が量子化については説明できた．

2.2 Landauer の伝導公式

最も基礎となる散乱のない量子細線の伝導度が $2e^2/h$ というユニバーサルな形で求まった．次に散乱を扱う方法について考えておこう．

2.2.1 1次元系の散乱体

1次元の完全伝導体中に散乱体がある時、確率密度流の一部を反射、一部を透過する．次で定義された T 行列

$$\begin{pmatrix} A_2(k) \\ B_2(k) \end{pmatrix} = M_T \begin{pmatrix} A_1(k) \\ B_1(k) \end{pmatrix} \quad (8.4^*)$$

はこれを行列の形で表したものと考えることができる^{*5}．

類似の概念で、散乱行列 (S 行列) (scattering matrix, S-matrix) を導入しておこう．これは、図 8.15(a) のように散乱体に左右から入射してくる波動関数を $a_1(k)$ 、 $a_2(k)$ 、流出する波動関数を $b_1(k)$ 、 $b_2(k)$ とし、

$$\begin{pmatrix} b_1(k) \\ b_2(k) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L & t_R \\ t_L & r_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} \quad (8.23)$$

とするものである． $A_i(k)$ などとは一部波動関数の進行方向が異なるため小文字表記とした．ここで、 $t_{L,R}$ 、 $r_{L,R}$ はそれぞれ左、右からの複素透過率・反射率であり、透過率・反射率 $T_{L,R}$ 、 $R_{L,R}$ との関係は

$$T_{L,R} = |t_{L,r}|^2 = 1 - R_{L,R} = 1 - |r_{L,R}|^2 \quad (8.24)$$

^{*5} 2重障壁ダイオードは2次元面での透過率を問題にしていたので、「単チャネル」とは異なるかもしれないが、結局2次元面に垂直な1次元的な伝導を考えているので、単一波数を考えている限り、透過率や反射率に関しては単チャネルと同じである．式 (C.6) を良く眺め、 J が面積あたりの電流であるから電流そのものに L^{-2} の次元が付いていることに注意すると、右辺が $e^2/h \times L^{-2}V$ の形になっていることに気づくと思う．

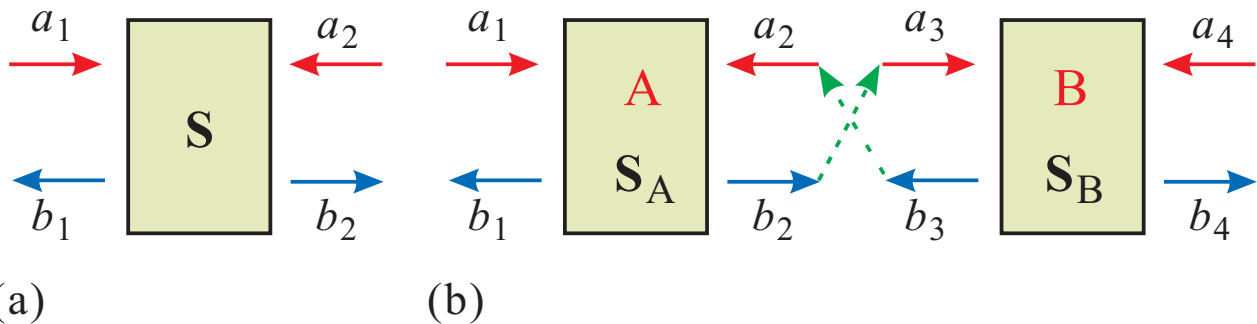


図 8.15 (a)S 行列 (式 (8.23)) の模式図 . (b)2 つの伝導体 A, B の接続と S 行列 (式 (8.25))

である .

S 行列の大切な性質として, ユニタリー性がある . 特に式 (8.23) のように等質な伝導チャネルにおける散乱の場合, 分散と波数がどこでも一定であるから確率密度 (流) の保存からユニタリーでなければならないことがすぐにわかる .

T 行列で表されている 1 次元ユニットが直列接続された場合, 接続された合成系の T 行列は, これらの積を考えればよかった . S 行列は, 入出力のベクトルが両端子にまたがっており, このようなわけにはいかない . 図 8.15(b) のように, S 行列 S_A の出力を S_B へ入力したとして, 図に示したような連続条件の下で合成系の S 行列 S_{AB} は

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} + t_R^{(A)} r_L^{(B)} \left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} t_L^{(A)} & t_R^{(A)} \left(I - r_L^{(B)} r_R^{(A)} \right)^{-1} t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} \left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} t_L^{(A)} & r_R^{(B)} + t_L^{(B)} \left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} r_R^{(A)} t_R^{(B)} \end{pmatrix} \quad (8.25)$$

となる .

大変面倒な形をしていて, どうしてわざわざこのようなものを考えるのか不思議かもしれない . しかし, これは 2 つの散乱体があった時, その間を伝播する波が時空間でどのような経路を取るかを示している . 分かりやすい例として (8.25) の (1,1) 成分を考え, 第 2 項に現れた除算を

$$\left(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^{-1} = I + r_R^{(A)} r_L^{(B)} + \left(r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^2 + \left(r_R^{(A)} r_L^{(B)} \right)^3 + \dots \quad (8.26)$$

と展開すると, 結局この第 2 項が散乱体 A, B 間での何回かの反射の後に反射される過程を足し上げたものであることがわかる . すなわち, S 行列は各要素の意味が式 (8.23) のように簡単明瞭であり, 各散乱の単一摂動過程を表しているため, 物理的な解釈がしやすく, またチャネル数および電極数が増えた場合にも適用が容易である . すなわち, 上式 (8.26) を書き下ろす際に積の順番に注意し, また除算は逆数を乗ずる形とし, 1 を I としているが, これは, a_1 などをベクトル, $r(A)_r$ などを行列で表示することで容易に多チャンネルに拡張するためである .

ただし, より一般の場合に拡張する際に注意すべきことは, チャネル毎に波数や分散が異なっていることである . 最も簡単な QPC のような場合でも, $G = n \times 2e^2/h$ のプラトー状態の場合, n 個の伝導チャネルが存在し, フェルミ波数は各チャネルで異なっている . このような場合,

式 (8.23) の入出力のベクトルで $a_1(k)$ などに，単純に波動関数を使用すると，S 行列の物理的意味も曖昧となりユニタリー性も失われる．そこで，波動関数を $\psi_{ai}(k_F)$ などと書いて

$$a_i(k) = \sqrt{v_{Fi}} \psi_{ai}(k_F) \quad (8.27)$$

などとする (b_i についても同様) ことで，入出力ベクトルのノルムをとった際に「確率密度流」の大きさになるようにすることができる．複素透過率 t に対して， $|t|^2 = T$ が透過率になることになり，(8.27) を複素確率密度流と呼ぶことにしよう．

以上，問題に応じて，T 行列と S 行列を適当に使い分けて計算するのが便利である．

参考文献

- [1] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [2] S. Datta, “Electron Transport in Mesoscopic Systems” (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [3] 勝本信吾 「メゾスコピック系」 (朝倉書店, 2002)