

境界要素法による屈折型2次元共鳴トンネル導波路の解析

BEM ANALYSIS OF TRANSPORT PROPERTIES OF A PERPENDICULARLY BENT 2D ELECTRON WAVEGUIDE WITH A DOUBLE BARRIER

植田 毅¹⁾、雨宮克樹²⁾

Tsuyoshi UETA and Katsuki AMEMIYA

- 1) 千葉大学 IMIT (〒 263-8522 千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail: ueta@imit.chiba-u.ac.jp)
 2) 物質・材料研究機構 (〒 305-0047 つくば市千現 1-2-1, E-mail: AMEMIYA.Katsuki@nims.go.jp)

In general, incident waves are certainly reflected by a bent waveguide. To realize perfect transmission in a bent waveguide, we propose a bent two-dimensional resonant tunneling structure. It is a square quantum dot to which two waveguides (an emitter and a collector) are joined through potential barriers perpendicular to each other. In the present paper, we present a numerical method to solve the transport problem through the bent resonant tunneling structure. It can be performed by means of BEM for a usual waveguide just by changing the boundary conditions at the orifices of the emitter and the collector.

Key Words: Bent Waveguide, Double Barrier, Resonant Tunneling, Boundary Element Method

1. 緒言

電磁波導波管などの分野⁽¹⁾、また、半導体微細加工技術により実現されるようになった、半導体中の2次元電子系における電子波導波路の研究において^(2, 3)、曲がり部を持つ導波路の伝導特性の研究が古くから精力的に行われている。その研究の中で曲がり部の形状の工夫などで伝導特性の改善が図られてきた。

本論文では、全く異なる方法で屈折した導波路の無反射伝導を実現するデバイスを考える。

量子力学の教科書では電子のエネルギーよりも高いポテンシャル障壁があったとしても、ある確率で電子波が通り抜けるトンネル効果を教える。また、ポテンシャル障壁がある程度の間隔を置いて2つ並んでいる場合、2つの障壁に挟まれた領域(ドット)に形成される準束縛状態と入射電子のエネルギーが一致する場合に反射することなしに透過する、共鳴トンネル効果がある。^(4, 5, 6) 通常、これらを扱うのは1次元系においてであるが、2次元系においても同様のことが期待される。重要なことは共鳴トンネルの条件に出てくるのは「エネルギー」だけだということである。運動量は関係ない。したがって、エミッタとコレクタが角度を持って取り付けられていたとしても、共鳴条件さえ満たしていれば無反射での透過が期待できる。

本論文では、この可能性を調べるために、Fig.1に示す系の伝導を考察する。Fig.1においては、導波路を形成する壁

を濃い灰色で、ドットを形成する(トンネルする)二重障壁を薄い灰色で表している。このような系の解析はいくつかの方法で可能である。モードマッチング法(固有関数展開法)が最も一般的と考えられるが、この手法ではドット部の正方形領域の波動関数を(ポテンシャル障壁がない場合でも)

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n [A_n \sin k(x - \frac{d}{2}) \sin \frac{n\pi}{d}(y + \frac{d}{2}) + B_n \sin \frac{n\pi}{d}(x + \frac{d}{2}) \sin k(y - \frac{d}{2})] \quad (1)$$

のように展開する。^(7, 8) しかしながら、この展開には数学的根拠はなく、厳密には k に関する積分が現れる。この展開関数は物理的考察から要請する近似的なものである。

他方、これを境界要素法を用いても解くことができる。その場合、エミッタ部分、エミッタ側の障壁、ドット、コレクタ側の障壁、コレクタ部分に分割し、各々の領域で自己無撞着な積分方程式を立て、連立して解くことになる。しかしながら、この方法は非常に煩雑で、また、計算精度を悪くする。本論文ではポテンシャル障壁のない通常の導波路を取り扱うプログラム⁽⁹⁾を用いた、より簡便な方法を説明する。

2. 定式化

二重障壁問題を解く場合、モードマッチング法にも見られるように、交差点(ドット)部分の取り扱いが最大の問題となる。本論文では、ポテンシャル障壁のない通常の導波路問題同様、ドットのみを境界要素法で取り扱う。

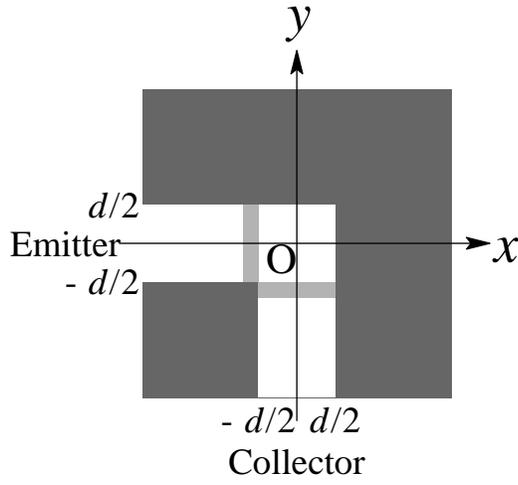


Fig. 1 A bent two-dimensional resonant tunneling structure and the definition of the coordinate system.

x 、 y 軸を Fig.1 のように定義する。半導体ヘテロ界面の電子はほとんど自由電子的であり、量子ドット内の電子に対して有効質量近似を用いるとシュレディンガー方程式は

$$\frac{1}{2}(-i\nabla)^2\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

と書ける。ここで、 ε は電子のエネルギーを \hbar^2/m^* でスケールしたものである。このとき、全波数は $K \equiv \sqrt{2\varepsilon}$ と表される。ただし、 m^* は半導体内での電子の有効質量である。

方程式

$$(i\nabla')^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = 2\varepsilon G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3)$$

を満たし、外向波を表わすグリーン関数⁽¹⁰⁾

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\sqrt{2\varepsilon}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (4)$$

を用いると、境界 S で囲まれた領域の波動関数は境界に沿った線積分を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = \oint \left[G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \nabla' \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \right] \cdot \mathbf{n}' dS' \quad (5)$$

と表せる。ここで \mathbf{n}' は領域から外向き単位法線ベクトルである。また、 $H_0^{(1)}(z)$ は 0 次の第 1 種ハンケル関数⁽¹¹⁾ である。

領域内の点 \mathbf{r} を境界 S に近づけると、以下のような積分方程式が得られる、

$$c(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \text{p.v.} \oint dS' \left(G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right). \quad (6)$$

ここで、記号 p.v. と $\partial/\partial n'$ はそれぞれ Cauchy の主値積分と外向き法線方向微分を表す。係数 $c(\mathbf{r})$ はデルタ関数 $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$

の体積積分 $\int d\mathbf{r}'$ に由来しており、点 \mathbf{r} が境界 S 上にあるので $c(\mathbf{r}) = 1$ ではない。境界上の点 \mathbf{r} での境界の作る内角が $\theta(\mathbf{r})$ であれば $c(\mathbf{r}) = \theta(\mathbf{r})/2\pi$ である。⁽¹⁾ 境界が点 \mathbf{r} で滑らかであれば $c(\mathbf{r}) = 1/2$ となる。

3. 境界条件と離散化

境界積分を実行するための境界条件と離散化方法を示す。導波路およびドットの外側は無限に高いポテンシャルを仮定する。

壁では波動関数 $\psi(\mathbf{r}')$ の値は 0 であり、式 (6) の右辺は第 1 項目のみが残る。ドットの境界は入射波の波長の $1/6$ の長さに離散化し、そこでの境界積分は波動関数の法線方向微分を線形補間することにより計算される。各ノードでの波動関数の法線方向微分 $\partial\psi/\partial n'$ が未知変数となる。

トンネル障壁が存在しない場合、導波管内で α 番目の横モードの電子波が入射する時、エミッタ内の波動関数は

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{r}) &= e^{ik_\alpha x} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \\ &+ \sum_\beta r_{\alpha\beta} e^{-ik_\beta x} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right), \\ &(\alpha, \beta = 1, 2, \dots), \end{aligned} \quad (7)$$

$$k_\alpha \equiv \sqrt{2\varepsilon - \left(\frac{\alpha\pi}{d}\right)^2} \quad (8)$$

コレクタ内の波動関数は

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\lambda t_{\alpha\lambda} e^{-ik_\lambda y} \sin\left(\frac{\lambda\pi}{d}\left(x + \frac{d}{2}\right)\right) \quad (9)$$

と展開され、エミッタ部分では反射係数 $r_{\alpha\beta}$ 、コレクタ部分では透過係数 $t_{\alpha\lambda}$ が未知変数となっていた。⁽⁹⁾

本問題の場合、さらに、エミッタ側の障壁内、コレクタ側の障壁内それぞれの波動関数を境界条件を満たす数学的一般解を用いて

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{r}) &= \sum_l \left[A_{\alpha l} e^{-\kappa_l(x + \frac{d}{2})} + B_{\alpha l} e^{\kappa_l(x + \frac{d}{2})} \right] \\ &\times \sin\left(\frac{l\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \end{aligned} \quad (10)$$

および

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{r}) &= \sum_j \left[D_{\alpha j} e^{-\kappa_j(y + \frac{d}{2})} + E_{\alpha j} e^{\kappa_j(y + \frac{d}{2})} \right] \\ &\times \sin\left(\frac{j\pi}{d}\left(x + \frac{d}{2}\right)\right) \end{aligned} \quad (11)$$

のように展開する。これらを用いて、ドット開口部の境界条件を与える。ここで、障壁内の無次元化した波数（実際には減衰定数） κ_j は、 \hbar^2/m^* でスケールしたポテンシャル障壁の高さを V とするとき、 $\kappa_j \equiv \sqrt{2(V - \varepsilon) + (j\pi/d)^2}$ と定義される。波動関数の法線微分はこの関数系を微分することにより得られる。

ここで、ポテンシャル障壁の厚さを a とすると、 $x = -d/2 - a$ における波動関数とその導関数の連続性の境界条件より

$$\delta_{\alpha m} + r_{\alpha m} = A_{\alpha m} e^{\kappa_m a} + B_{\alpha m} e^{-\kappa_m a} \quad (12)$$

$$-1 \frac{k_m}{\kappa_m} (\delta_{\alpha m} - r_{\alpha m}) = A_{\alpha m} e^{\kappa_m a} - B_{\alpha m} e^{-\kappa_m a} \quad (13)$$

を得る。ただし、 $\delta_{\alpha m}$ はクロネッカーのデルタである。また、このとき、式(7)において x を $x + \frac{d}{2} + a$ とする変換を行った。これらから

$$A_{\alpha m} e^{\kappa_m a} = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_m}{\kappa_m} \right) \delta_{\alpha m} + \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_m}{\kappa_m} \right) r_{\alpha m} \quad (14)$$

$$B_{\alpha m} e^{-\kappa_m a} = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_m}{\kappa_m} \right) \delta_{\alpha m} + \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_m}{\kappa_m} \right) r_{\alpha m} \quad (15)$$

となる。

また、 $y = -d/2 - a$ における波動関数とその導関数の連続性の境界条件より

$$t_{\alpha m} = D_{\alpha m} e^{\kappa_m a} + E_{\alpha m} e^{-\kappa_m a} \quad (16)$$

$$i \frac{k_m}{\kappa_m} t_{\alpha m} = D_{\alpha m} e^{\kappa_m a} - E_{\alpha m} e^{-\kappa_m a} \quad (17)$$

を得る。この場合も、式(9)において y を $y + \frac{d}{2} + a$ とする変換を行った。これらから

$$D_m e^{\kappa_m a} = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_m}{\kappa_m} \right) t_{\alpha m} \quad (18)$$

$$E_m e^{-\kappa_m a} = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_m}{\kappa_m} \right) t_{\alpha m} \quad (19)$$

となる。

式(14) (15) (18) (19) を式(10) (11) に代入すると、ドットの開口部の波動関数およびその導関数は

$$\psi_{\alpha} \left(-\frac{d}{2}, y \right) = C x p^*(\alpha) \sin \left(\frac{\alpha \pi}{d} \left(y + \frac{d}{2} \right) \right) + \sum_{\beta} r_{\alpha \beta} C x p(\beta) \sin \left(\frac{\beta \pi}{d} \left(y + \frac{d}{2} \right) \right) \quad (20)$$

$$\left. \frac{\partial \psi_{\alpha}}{\partial x} \right|_{x=-\frac{d}{2}} = D x p^*(\alpha) \sin \left(\frac{\alpha \pi}{d} \left(y + \frac{d}{2} \right) \right) + \sum_{\beta} r_{\alpha \beta} D x p(\beta) \sin \left(\frac{\beta \pi}{d} \left(y + \frac{d}{2} \right) \right) \quad (21)$$

$$\psi_{\alpha} \left(x, -\frac{d}{2} \right) = \sum_{\lambda} t_{\alpha \lambda} C x p(\lambda) \sin \left(\frac{\lambda \pi}{d} \left(x + \frac{d}{2} \right) \right) \quad (22)$$

$$\left. \frac{\partial \psi_{\alpha}}{\partial y} \right|_{y=-\frac{d}{2}} = \sum_{\lambda} t_{\alpha \lambda} D x p(\lambda) \sin \left(\frac{\lambda \pi}{d} \left(x + \frac{d}{2} \right) \right) \quad (23)$$

$$C x p(m) \equiv \cosh \kappa_m a - i \frac{k_m}{\kappa_m} \sinh \kappa_m a \quad (24)$$

$$D x p(m) \equiv \kappa_{\alpha} \left(\sinh \kappa_m a - i \frac{k_m}{\kappa_m} \cosh \kappa_m a \right) \quad (25)$$

と与えられる。つまり、トンネル障壁がない場合の式(7) (9) の指数関数 $e^{-i k_{\alpha} (-d/2)}$ およびその微係数 $-i k_{\alpha} e^{-i k_{\alpha} (-d/2)}$ を $C x p(\alpha)$ 、 $D x p(\alpha)$ に置き換えるだけでよい。

式(6)の具体的な離散化の手順は、通常の導波路問題と全く同様に、1次要素を用いた一般的な方法に従う。⁽¹⁾ 離散化して得られる連立方程式を $\partial \psi_i / \partial n'$ 、 $r_{\alpha \beta}$ 、 $t_{\alpha \lambda}$ について解く。

エミッタでの反射確率、コレクタへの透過確率はそれぞれ

$$R = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |r_{\alpha \beta}|^2 \quad (26)$$

$$T = \sum_{\lambda} \frac{k_{\lambda}}{k_{\alpha}} |t_{\alpha \lambda}|^2 \quad (27)$$

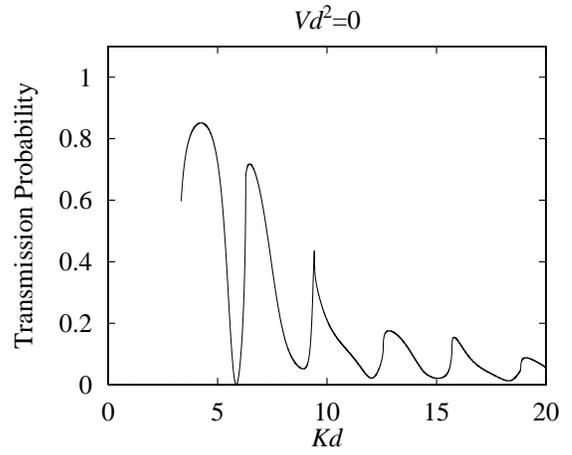


Fig. 2 The transmission spectrum for $Vd^2 = 0$.

により計算される。

4. 計算結果

本論文の計算は任意形状の量子ドットにエミッタ、コレクタを取り付けた系を解析するプログラムに数行の変更を加えて行ったものである。そのため、ドットと導波路の接合部での特異性が現れるのを避けるため、ドットの一辺の大きさを $1.02d$ としている。

エミッタ側、コレクタ側のポテンシャル障壁の厚さ a 、高さ V は同じものとする。ここでは、 $a = d/5$ とし、 Vd^2 を変えた場合の透過スペクトル (透過率の波数依存性) の変化を見る。入射モードは全て基準モードである。

まず、トンネル障壁のない $Vd^2 = 0$ の場合の透過スペクトルを Fig.2 に示す。直角に曲がった導波路の透過率は振動しながら、波数が大きくなるにつれて減衰していくことが分かる。

$Vd^2 = 200$ の場合の透過スペクトルを Fig.3 に示す。この場合の透過スペクトルにはほぼ等間隔に鋭いピークが見られる。これらのピークを Kd の小さい方から順に第1～第6ピークと呼ぶことにする。ピークの間隔はほぼ π (~ 2.8) であり、これは以下のように解釈される。交差点部分と同じ大きさの正方形の系内の固有エネルギーに対応する波数は

$$Kd = \pi \sqrt{j^2 + l^2}, \quad (j, l = 1, 2, 3, \dots) \quad (28)$$

と与えられる。ただし、 j, l はそれぞれドット内の x 方向、 y 方向のモード数である。これを具体的に計算すると、

$$\begin{aligned} Kd &= \sqrt{2}\pi, 2\sqrt{2}\pi, 3\sqrt{2}\pi, 4\sqrt{2}\pi \\ &= 4.44288, 8.88577, 13.3286, 17.7715 \end{aligned}$$

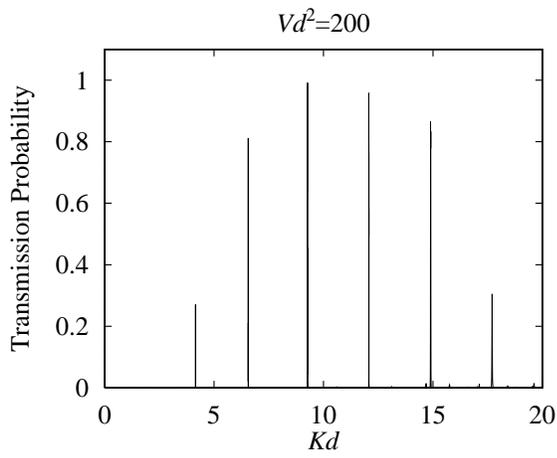


Fig. 3 The transmission spectrum for $Vd^2 = 200$.

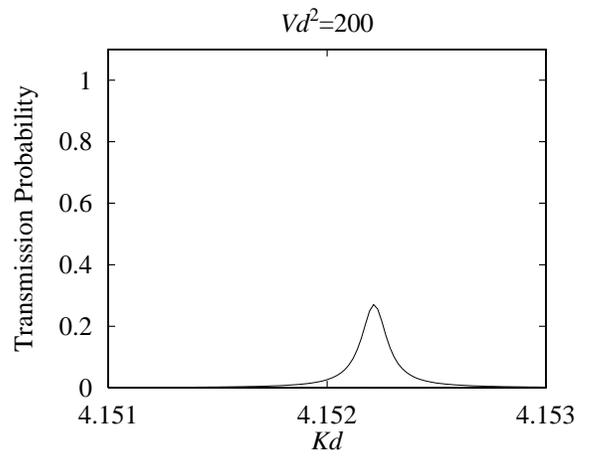


Fig. 4 The transmission spectrum for $Vd^2 = 200$ in the narrow range around the first peak.

の場合が縮退のない状態で、

$$\begin{aligned}
 Kd &= \sqrt{5}\pi, \sqrt{10}\pi, \sqrt{13}\pi, \sqrt{17}\pi, 2\sqrt{5}\pi, \\
 &5\pi, \sqrt{26}\pi, \sqrt{29}\pi, \sqrt{34}\pi, \sqrt{37}\pi \\
 &= 7.02481, 9.93459, 11.3272, 12.9531, 14.0496, \\
 &15.708, 16.019, 16.918, 18.3185, 19.1096
 \end{aligned}$$

の場合が二重に縮退していることが分かる。Fig.3 と比較すると、障壁のポテンシャルの高さが有限であり、波動関数の染み出しに依る準束縛状態のエネルギー低下を考慮すると、 $Kd = \sqrt{2}\pi, \sqrt{5}\pi, \sqrt{10}\pi, \sqrt{17}\pi, \sqrt{26}\pi, \sqrt{37}\pi$ に対応すると考えられるピークが現れている。これらはそれぞれ、 $(j, l), (l, j) = (1, 1), (1, 2), (1, 3), (1, 4), (1, 5), (1, 6)$ に対応していて、一方のモードが1になっていることが特徴的である。これは、入射モードが基準モードであるため、エミッタからドット内へのトンネルにおいて、ドット内の $l = 1$ のモードとの結合が強くなっているためと考えられる。

第1ピーク付近を拡大した図を Fig.4 に示す。共鳴はしているが、透過率の最大値は(横軸のメッシュの問題ではなく)0.3に達していない。次に、第2、3、4ピーク付近を拡大した図を Fig.5 に示す。Fig.5 から、第2、3、4ピークは全て二重ピークになっていることが分かる。これらのピークが二重縮退しているモードに対応していること、また、縮退していない第1ピークは二重ピークでないことから、これらの二重ピークはドットにトンネル障壁を介して導波管がついている影響で縮退が解けた状態に対応すると考えられる。この系は $y = x$ に対して対称であるから、ドット内の準束縛状態は $y = x$ に関して対称なものか、反対称なものになる。これはリードがついていないときに、縮退していた (j, l) の状態 (ψ_{jl} と書く) と (l, j) の状態 (ψ_{lj}) がリードが付くという摂動を受けることにより、結合 ($\psi_{jl} + \psi_{lj}$)、反結合 ($\psi_{jl} - \psi_{lj}$) 状態を形成し、分裂したものである。また、第3、第4ピークは透過率の最大値がそれぞれ0.991、0.958であり、非常に

効率のよい透過が実現している。

Fig.3 の $Kd = 8.303 \sim 8.306$ 、 $Kd = 10.57 \sim 10.59$ の範囲を拡大した図を Fig.6 に示す。Fig.3 では小さすぎて分からなかったが、どちらの領域にも共鳴ピークが存在することが分かる。前者が単一のピークであり、後者が二重ピークとなっていることから、それぞれ、 $(j, l) = (2, 2), (2, 3)$ に対応するピークであると考えられる。

$Vd^2 = 100$ の場合の透過スペクトルを Fig.7 に示す。ただし、電子のエネルギーがポテンシャル障壁を越えない Kd の範囲のみを示している。この場合、ドットを形成するトンネル障壁の高さが低いため、波動関数の染み出しが大きく、共鳴ピークは幅が広がっている。他の、小さな構造も多少大きくなっていることが分かる。また、第1、第2ピークは $Vd^2 = 200$ の場合に比べ高くなっており、ポテンシャルの高さを変えることにより、ピークの高さも制御できる可能性を示している。

5. 結言

境界要素法を用いて、共鳴二重障壁構造を有する L 字型に屈折した導波路の伝導特性を調べた。複雑な構造ではあるが、リード、障壁部分を解析的に処理することで、屈折した通常の導波路を解析する境界要素法の境界条件をわずかに変えることで対応できた。モードマッチング法による同様の計算との比較によると、このように非常に繊細な構造のスペクトルにもかかわらず、同じ構造のスペクトル形状を示している。しかしながら、共鳴状態にない場合は非常に良い計算精度(確率の保存で評価)を示すが、共鳴ピーク付近では計算精度が落ちる。これは、共鳴状態ではドット内の波動関数の値が非常に大きくなることも原因と考えられるが、計算誤差の主要因は任意形状のドットを解析するためのプログラムを改変したため、ドットの壁の角などの構造を考慮することなしに、等間隔で自動的に離散化していることにあると考えて

いる。

計算結果はトンネル障壁が直角をなす場合においても、共鳴トンネルが起こり、ほぼ無反射での伝導を可能にする共鳴状態もあることが分かった。また、共鳴ピークの高さはポテンシャルの高さを変化させることで制御できる。ドットの形状を設計することにより、共鳴ピークの位置、数は変更できるため、2端子だけでなく、多端子系に拡張すれば、フィルター、スイッチング素子への応用が期待できる。ドットの形状の設計においては本手法が有効である。

参考文献

- (1) 加川、小柴、池内、鏡：電気・電子のための有限/境界要素法, (1984), オーム社, pp. 86-209.
- (2) H. R. Frohne, M. J. McLennan and S. Datta : An efficient Method for the Analysis of Electron Waveguides, J. Appl. Phys., **66** (1989), pp. 2699-2705.
- (3) 片山清文、田中雅宏、田中嘉津夫：電子波回路用 CAD のための導波モード分離型境界積分方程式, 電子情報通信学会論文誌 C-I, **J81-C-I** (1998), pp. 582-589.
- (4) 川村 清：量子力学 I, (1996), 産業図書.
- (5) Supriyo Datta : Electronic Transport in Mesoscopic Systems, (1995), Cambridge University Press.
- (6) 栗原 進：トンネル効果, (1994), 丸善, 第2章.
- (7) G. Goldoni, F. Rossi and E. Molinari : Quantum interference in Nanometric Device: Ballistic Transport across Arrays of T-shaped Quantum Wires, Appl. Phys. Lett., **71** (1997), pp. 1519-1521.
- (8) R. L. Schult, H. W. Wyld and D. G. Ravenhall : Quantum Hall Effect and General Narrow-Wire Circuits, Phys. Rev. B, **41** (1990), pp. 12760-12780.
- (9) Tsuyoshi Ueta : Statistical Properties of Quantum Transport through Two-Dimensional Random-shaped Quantum Dots, Electronics and Communications in Japan, Part 2, **83** (2000), pp. 42-48.
- (10) E. N. Economou : Green's Functions in Quantum Physics, (1990), Springer Verlag, pp. 12-13.
- (11) M. Abramowitz and I. A. Stegun : Handbook of Mathematical Functions, (1970), Dover Publ.

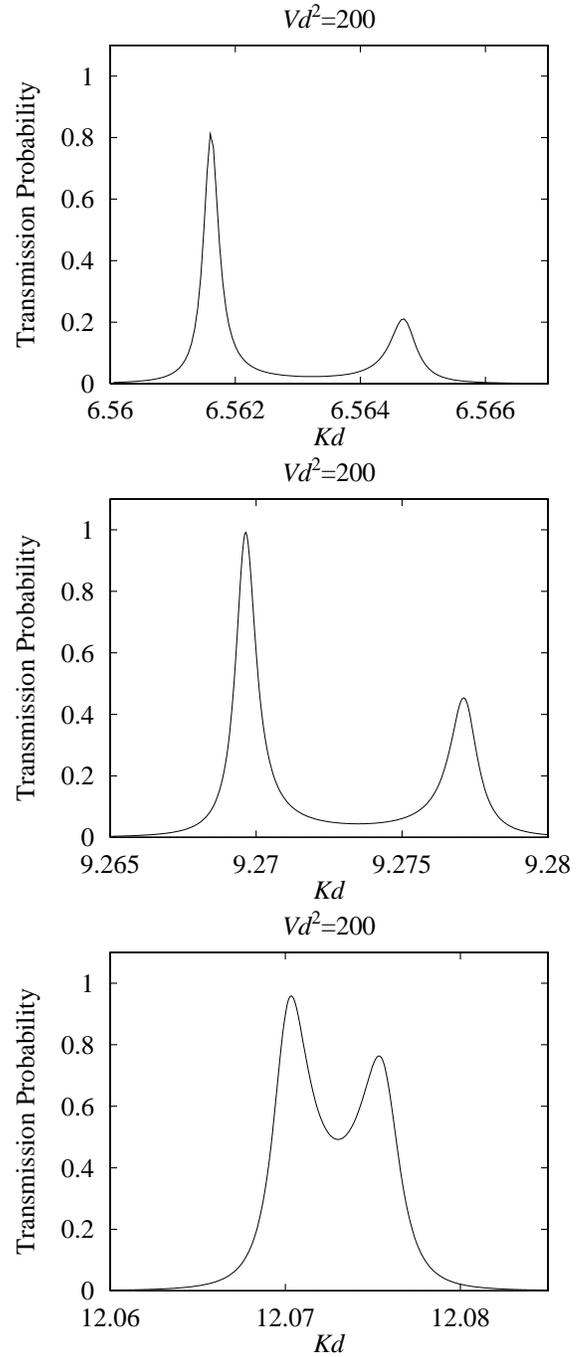


Fig. 5 The transmission spectrum for $Vd^2 = 200$ in the narrow ranges around the 2nd, 3rd and 4th peaks.

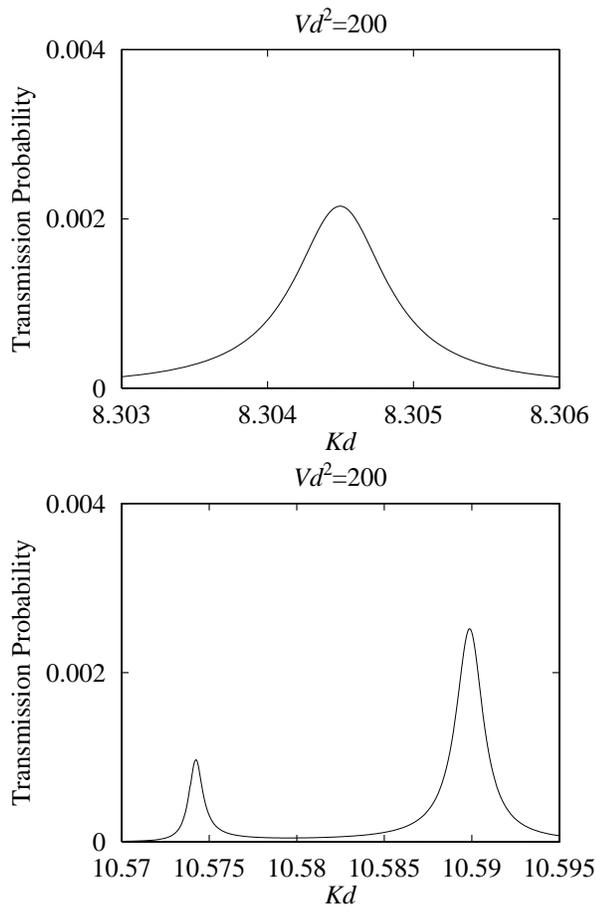


Fig. 6 The transmission spectrum for $Vd^2 = 200$ in the narrow ranges of $8.303 < Kd < 8.306$ and $10.57 < Kd < 10.59$.

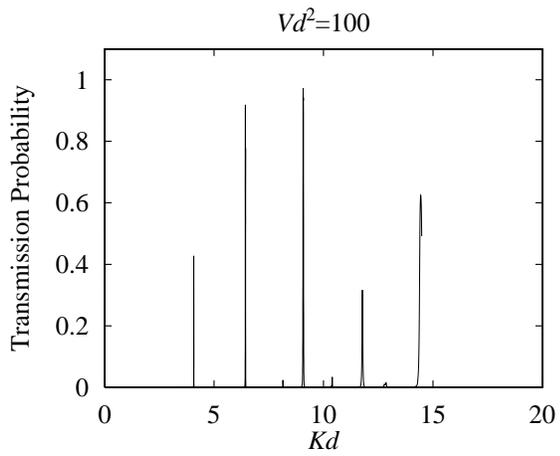


Fig. 7 The transmission spectrum for $V = 100$.