

ナノスケール系の電子状態の時間発展に対する

ワイドバンドリミット近似による影響

Influence of wide band limit approximation on the time evolution of an electronic state in a nanscale system

笹岡健二^A、加藤司真^B、相馬聡文^B、小川真人^B

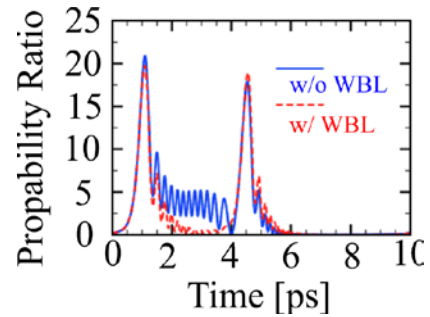
K. Sasaoka^A, K. Kato^B, S. Souma^B, and M. Ogawa^B

神戸大学自然科学系先端融合研究環^A、神戸大学工学部^B

Organization of Advanced Science and Technology, Kobe University^A,
Faculty of Engineering, Kobe University^B

ナノ構造体における非定常量子輸送は、次世代高速動作素子の候補である量子デバイスの動作速度に密接に関わる現象である。近年、CPU 性能や測定技術の著しい向上により、時間依存量子輸送に関する研究が、精力的に行われている。量子輸送現象に対する数値計算科学の解析手法として、非平衡グリーン関数 (NEGF) 法 [1] が、定常量子輸送現象も含めて最も頻繁に使用される。定常状態の場合の NEGF 法はデバイスシミュレーションとして確立しているのに対し、非定常状態の場合、NEGF 法は高い計算コストを有するために小規模なナノ構造体にのみしか適用されていない。そのため、ほとんどの数値計算的研究が電極内の状態密度を定数とみなすワイドバンド (WBL) 近似を導入することにより、膨大な計算量を削減している。したがって、WBL 近似が時間依存量子輸送現象に与える影響の全容は未だ明らかとなっていない。

本研究の目的は、WBL 近似によって電子状態の時間発展に関する情報がどのように失われるかを解明することである。この目的のため、本研究は最近提案されたリップマン・シュウィンガー方程式を基礎とする手法 [2] を用いて、シミュレーションを実行した。図は、ナノ構造体を簡素化したモデルにおける波動関数の時間発展を、あるパラメーター下で計算した結果である。横軸と縦軸はそれぞれ、時間と存在確率比である (ただし入射波動関数を平面波とし、その振幅を 1 とした)。実線は WBL 近似が適用されていない、破線は適用がされた場合の波動関数の時間発展である。時刻 $t=0$ ピコ秒でゲート交流電圧を印加した後に、時刻 $t=2$ から $t=3$ ピコ秒までの区間で、2 つの結果に大きな差が生じる。この違いは、ゲート電圧によって電極の伝導帯よりも低い位置に形成される束縛状態から、定性的に解釈される。



図：存在確率比の時間発展。実線は、それぞれ WBL 近似が適用されていない場合、破線は適用した場合である。

[1]A.-P. Jauho, et al., Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).

[2]B. Gaury, et al., Phys. Rep. **534**, 1 (2014).