

量子物理工学 I



神戸大学工学部 電気電子工学科

小川 真人

内 容

1. 他講義との関連

2. 教科書

- ・内容 役に立つの? \Rightarrow 立ちます!

3. 量子力学の歴史

4. 古典力学の限界と量子力学

- ・「粒」と「波」の両方の性質

- ・Bragg反射, 黒体輻射, 光電効果

etc

5. まとめ

1.他講義との関連

2007(入学!)

2008

2009

卒研
有資格者

(良い研究をして卒業)

2010 \ (^o^)/

量子物理学Ⅰ 他講義との関連

	1年前期	1年後期	2年前期	2年後期	3年前期	3年後期	4年前期	4年後期	
電子物理学系科目	P系		量子物理学Ⅰ	量子物理学Ⅱ			卒業研究(電子物理学系研究室)		
				固体物性工学Ⅰ	固体物性工学Ⅱ				
					半導体電子工学Ⅰ	半導体電子工学Ⅱ			集積回路工学
					数理物理学				
						光電磁波論			
						電気電子材料工学			
専門基礎科目	基礎解析Ⅰ	基礎解析Ⅱ							
	線形代数学Ⅰ	線形代数学Ⅱ							
	物理学 C1	物理学 C2, 物理学実験							
	素材化学Ⅰ	素材化学Ⅱ	数理統計学			自然科学史			
	離散数学	ベクトル解析	複素関数論・同演習	フーリエ解析	偏微分方程式	数値解析			
			常微分方程式論・同演習						
専門(共通)科目	導入ゼミナール	プログラミング演習							
		電気回路論Ⅰ・演習	電気回路論Ⅱ	電子回路					
			電磁気学Ⅰ・演習	電磁気学Ⅱ					
		情報数学		電気計測					
		* 英語プレゼン		実験Ⅰ	実験Ⅱ	実験Ⅲ	実験Ⅳ		
電子情報工学系	S系		論理数学	計算機工学Ⅰ	計算機工学Ⅱ	言語理論とオートマトン	応用電波工学	情報通信系研究室	
			データ構造とアルゴリズムⅠ		デジタル情報回路		応用通信工学		
					データ構造とアルゴリズムⅡ				
				情報伝送Ⅰ	情報伝送Ⅱ				
電気エネルギー系	E系		電気機器Ⅰ	電気機器Ⅱ			電気機械設計論	電力系研究室	
				制御工学Ⅰ	制御工学Ⅱ		電力応用		
					電力工学Ⅰ	電力工学Ⅱ	電気製図		
						高電圧放電工学	電気法規・施設管理		

P系

S系

E系

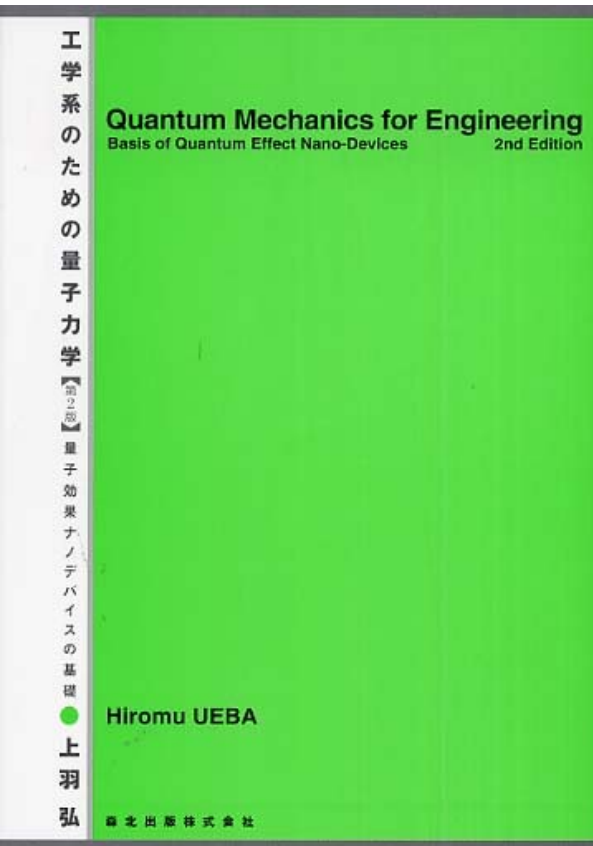
04/10/'08

QPE

2. 教科書

工学系のための量子力学【第2版】

量子効果ナノデバイスの基礎



- 上羽 弘(富山大学)著森北出版(2005) ¥2,700

- 参考書







[理解を助けるため]

- | | |
|---------------|------------|
| (1)ゼロから学ぶ量子力学 | 竹内 薫, 講談社 |
| (2)なっとくする量子力学 | 都筑 卓司, 講談社 |
| (3)絶対分かる量子力学 | 白石 清, 講談社 |

[更に学習をしたい人のため]

- | | |
|---------------|------------------------------|
| (1)量子力学 I・II | 朝永振一郎, みすず書房 |
| (2)量子力学(上)(下) | シッフ, 吉岡書店 |
| (3)グライナー量子力学 | W. グライナー,
シュプリンガー・フェアラク東京 |

教科書の内容

- 第1章 古典力学の限界と量子力学の萌芽
- 第2章 量子力学の基礎 (シュレディンガー方程式)
- 第3章 自由粒子と量子閉じ込め 
- 第4章 有限井戸型ポテンシャルと量子井戸 
- 第5章 トンネル効果 
- 第6章 調和振動子
- 第7章 水素原子模型とその応用(結合, 結晶)
- 第8章 磁気モーメントとスピン 
- 第9章 摂動論
- 第10章 レーザの原理と半導体レーザの基礎 
- 第11章 量子効果ナノデバイス 

量子物理学 I

量子物理学 II

大きな談義：ナノ・ピコ

10^n	接頭辞	記号	漢数字表記	十進数表記
10^{24}	ヨタ(yotta)	Y	一・	1 000 000 000 000 000 000 000 000
10^{21}	ゼタ(zetta)	Z	十垓	1 000 000 000 000 000 000 000
10^{18}	エクサ(exa)	E	百京	1 000 000 000 000 000 000
10^{15}	ペタ(peta)	P	千兆	1 000 000 000 000 000
10^{12}	テラ(tera)	T	一兆	1 000 000 000 000
10^9	ギガ(giga)	G	十億	1 000 000 000
10^6	メガ(mega)	M	百万	1 000 000
10^3	キロ(kilo)	k	千	1 000
10^2	ヘクト(hecto)	h	百	100
10^1	デカ(deca, deka)	da	十	10
10^0	なし	なし	一	1
10^{-1}	デシ(dec)	d	一分	0.1
10^{-2}	センチ(centi)	c	一厘	0.01
10^{-3}	ミリ(milli)	m	一毛	0.001
10^{-6}	マイクロ(micro)	μ	一微	0.000 001
10^{-9}	ナノ(nano)	n	一塵	0.000 000 001
10^{-12}	ピコ(pico)	p	一漠	0.000 000 000 001
10^{-15}	フェムト(femto)	f	一須臾	0.000 000 000 000 001
10^{-18}	アト(atto)	a	一刹那	0.000 000 000 000 000 001
10^{-21}	ゼプト(zepto)	z	一清浄	0.000 000 000 000 000 000 001
10^{-24}	ヨクト(yocto)	y	一涅槃寂靜	0.000 000 000 000 000 000 000 001

“ナノエレクトロニクス”



google Earth (<http://earth.google.co.jp/>)で確かめてみて下さい。

小さな領域を扱う学問 量子力学

量子力学を作った人々

2000

70

60

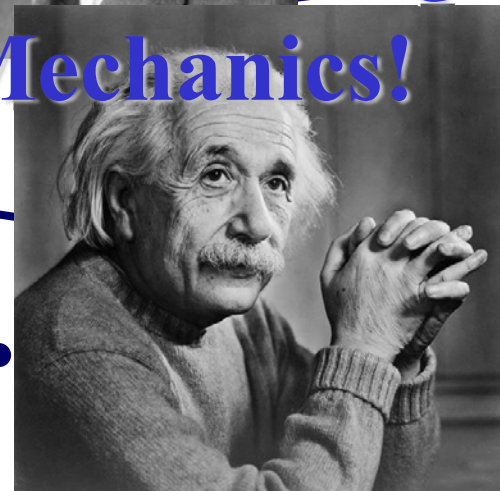
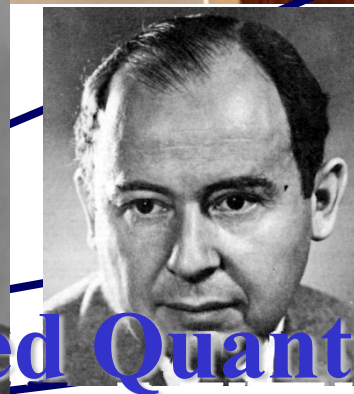
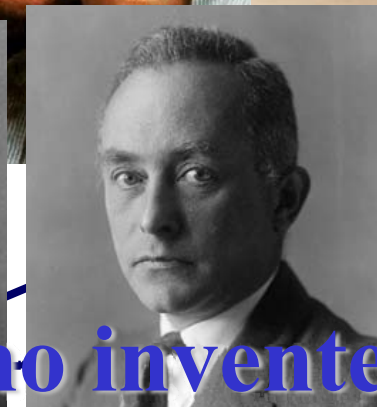
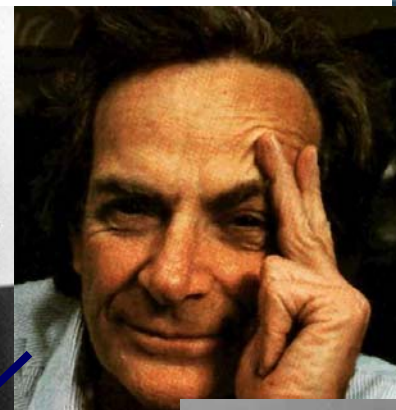
50

30

20

10

1900



It's I who invented Quantum Mechanics!

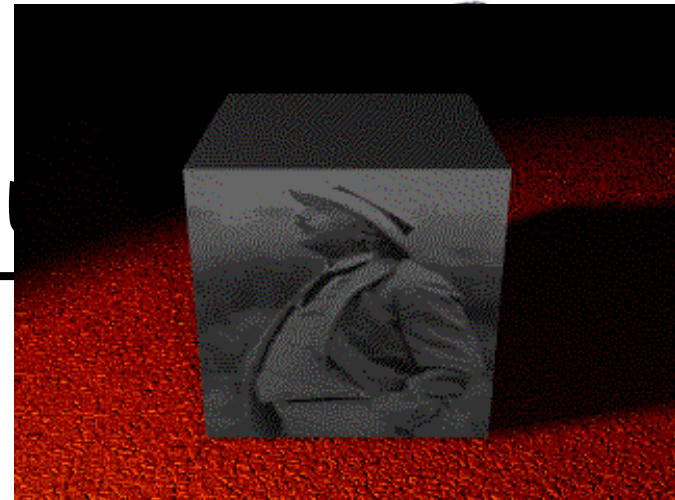
歴史 QED



$1 \text{ Y (yukawa)} = 10^{-13} \text{ cm} = 10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ fm (フェムトメートル)}$

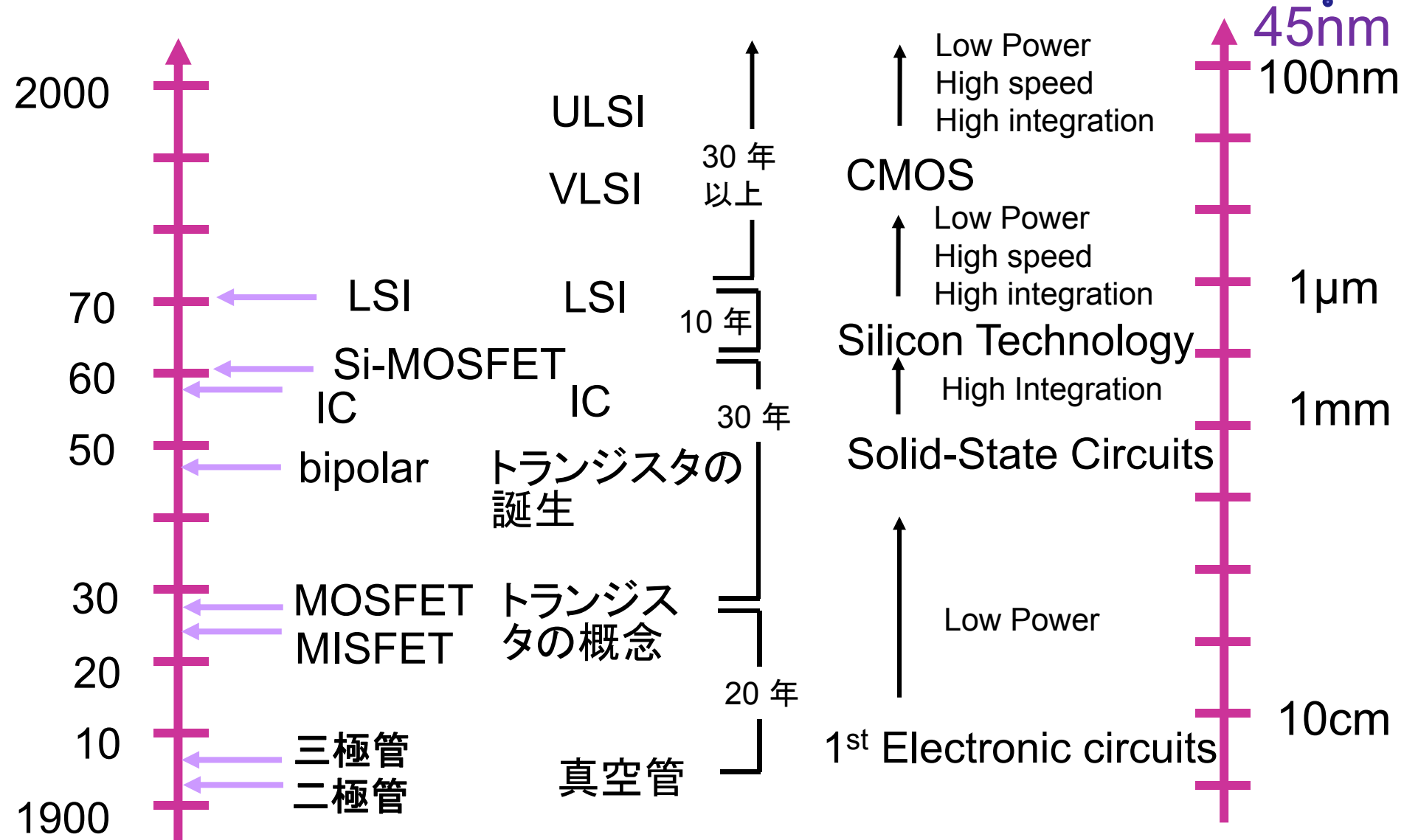


遠

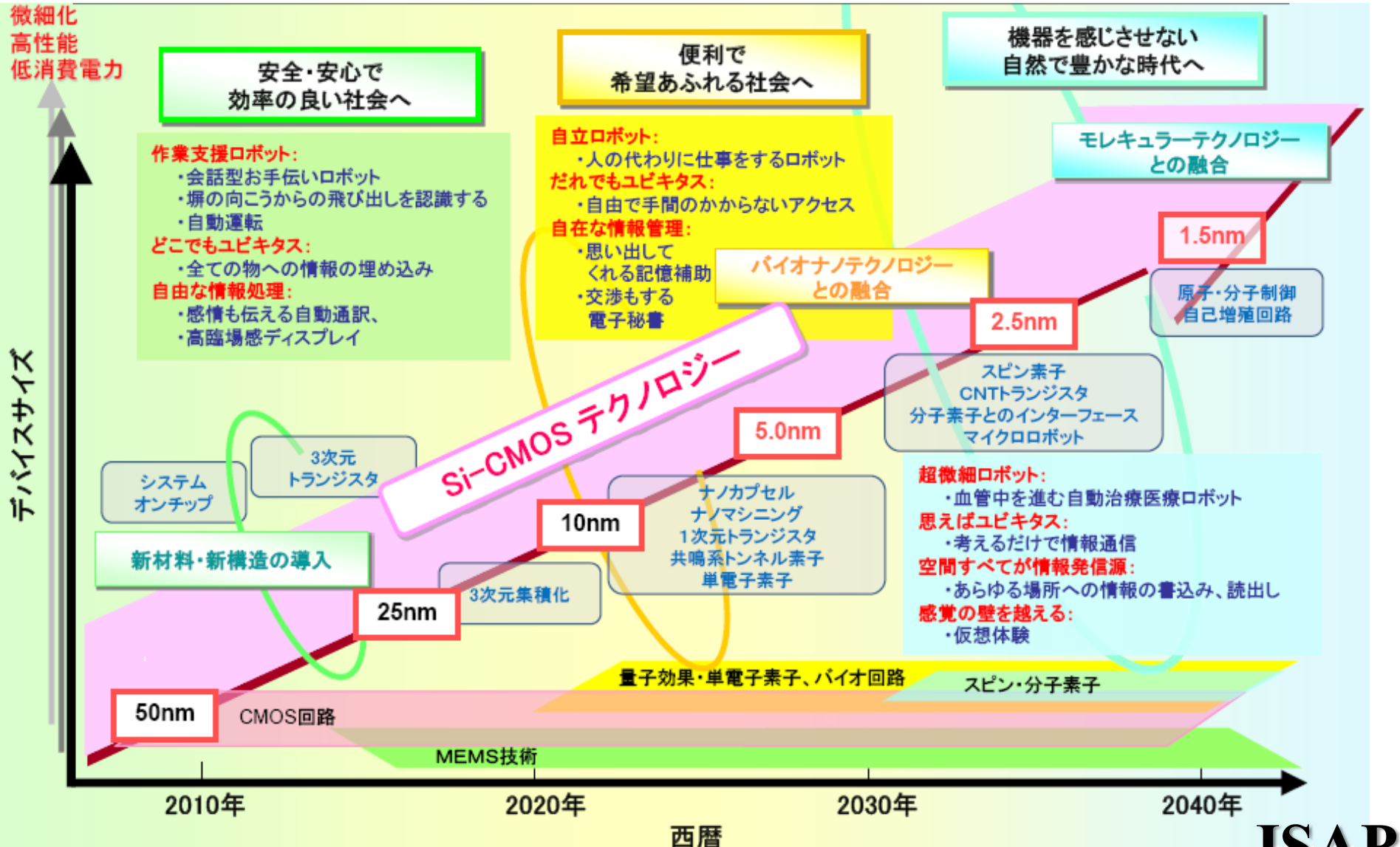


電子デバイスの歴史

電子波
の波長



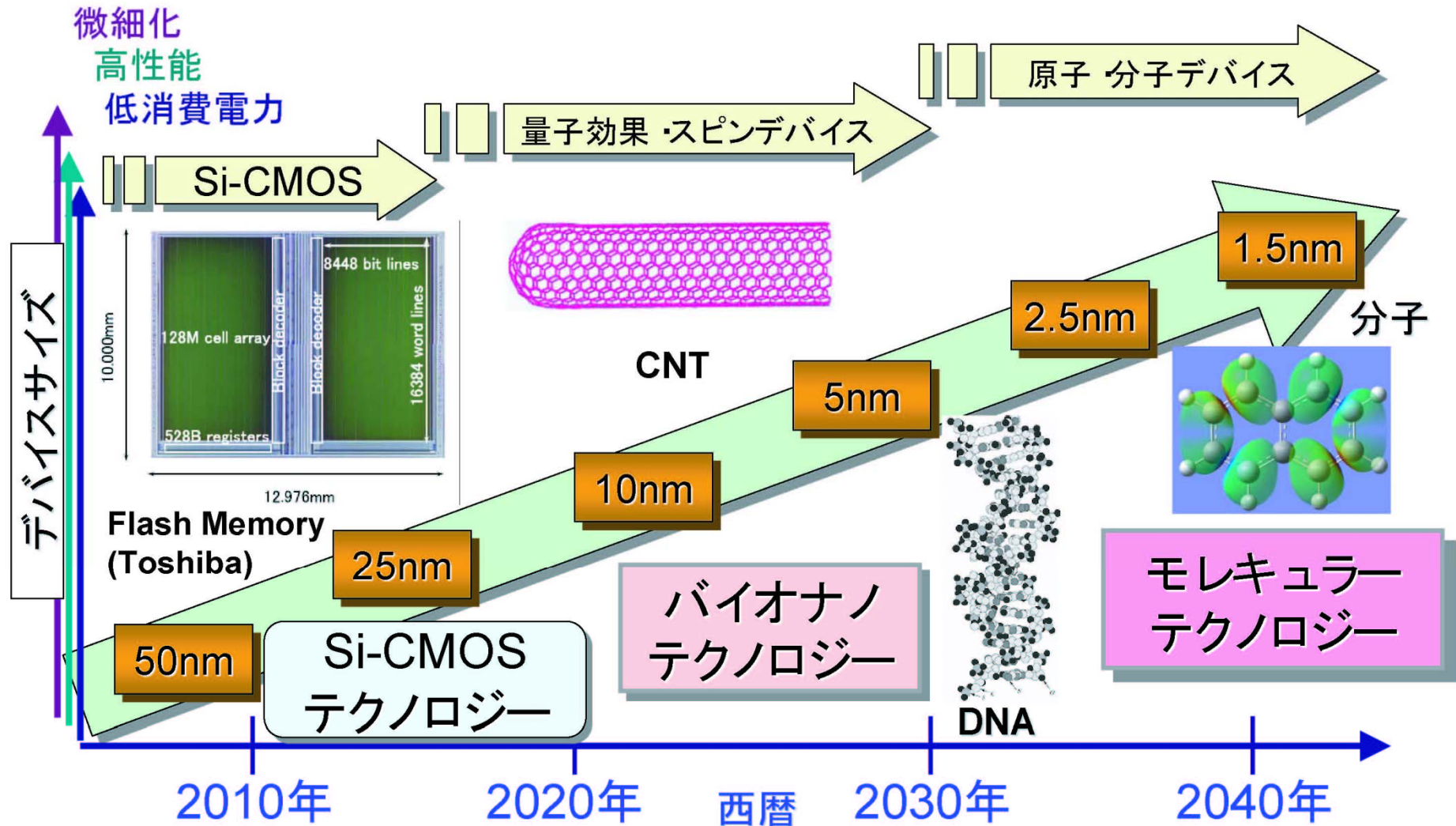
社会を支えるデバイス技術



Vision Map : 将来のナノテクノロジー

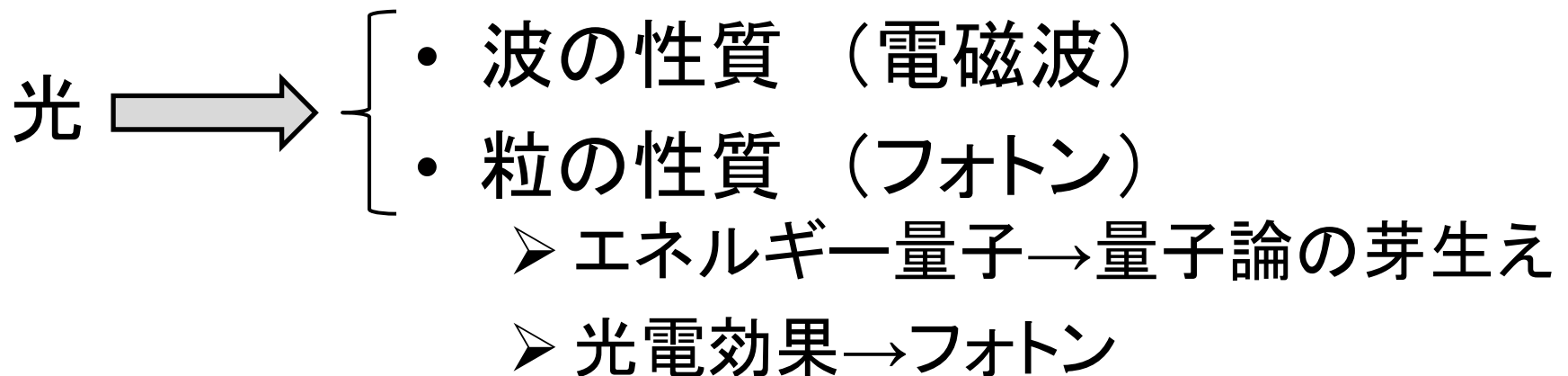
← 計算科学

- デザイン 量子輸送, 大規模第一原理
- 理論 成長・反応ダイナミクス, ヘテロ系(無機/有機)



第1章 古典力学の限界と 量子力学の萌芽

- 眼を開けた瞬間に星がみえるのはなぜ？
- ストーブで日焼けしないのはなぜ？



連続量(古典)⇒離散的な量(量子力学)

(エネルギー) $\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) = E$ =(一定)かつ(連続量)



「微視的」に見た場合に

(エネルギー) $E_n = n \cdot \hbar\omega$ (n:整数=飛び飛びの量)(粒々=「量子」)

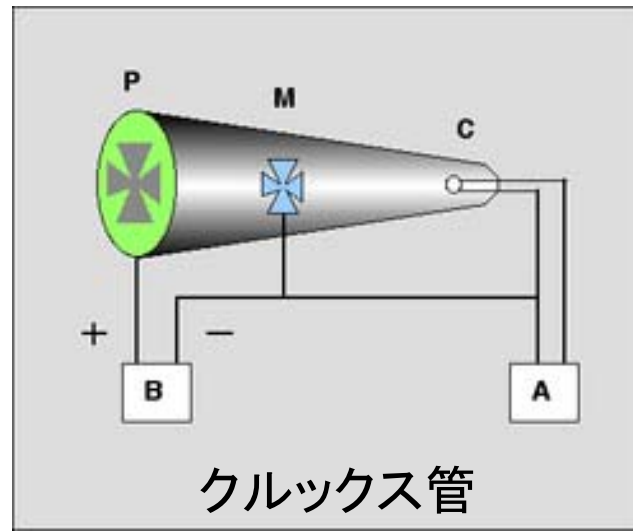


古典論では説明できない実験事実を説明できる！

それではそれらの例を見てみましょう。

電子は「粒子」？

- クルックスは、陰極線管(クルックス管:1875)を用いて、以下のような実験を提案した。
- 陰極線管に磁石を近づけてみると、
 - 負に荷電した粒子であれば磁界によって偏向するだろう
 - 波動であれば磁界によって偏向することはない
 - また、もし陰極線の正体が荷電した粒子であれば、電界によってより容易に偏向するだろうことが予測される。
- **1897年**に、イギリスの物理学者ジョセフ・ジョン・トムソンは磁気と電気をもちいて陰極線の正体が負に荷電した粒子、すなわち電子であるということを示した。



電子は「波」？ 粒子は「波」？

- 「ド・ブロイ波」

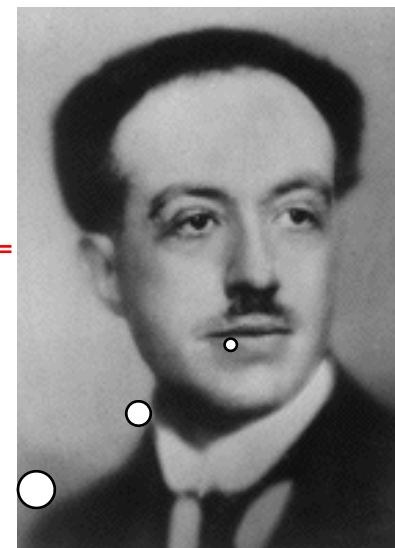
- 光 : 波動と考えられていた→粒子の性質
- 電子 : 粒子と考えられていた→波動の性質

- 光の角振動数 ω や 波数 $k=2\pi/\lambda$ と,
光子のエネルギー E や 運動量 p とを
結びつける アインシュタインの関係

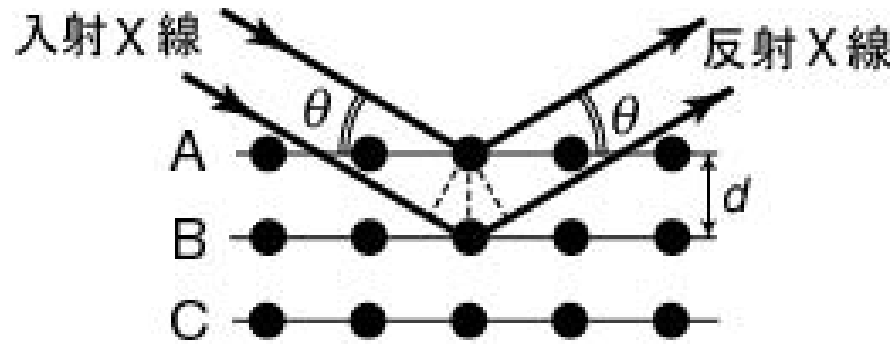
$$E = \hbar\omega \quad p = \hbar k$$

粒子は波だ！

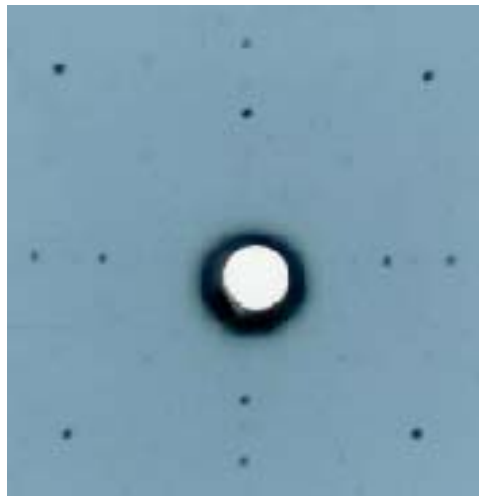
が、物質波に対しても 成り立つとのではないか(1924)



Bragg反射、ラウエ像



$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n = 1, 2, \dots; d = \text{層の間隔}; \lambda = \text{X線の波長})$$



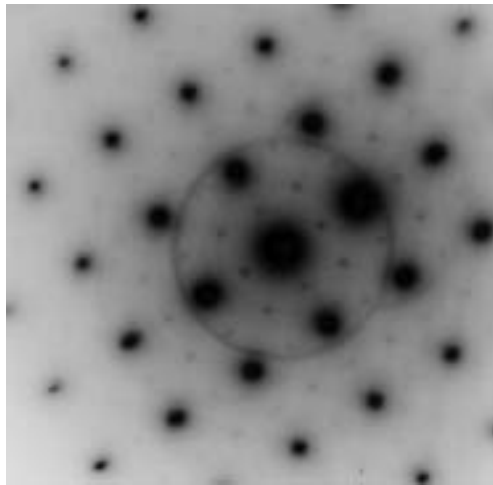
Si結晶のラウエ像



「電子の波動性の実証」

- 電子線を結晶に当てると、ラウエの斑点と同様な干渉縞が観測される
- ニッケルの単結晶による 電子線の回折・干渉現象... デビスン (USA) と ジャーマー (USA) (1927).
- 金属多結晶による 電子線の回折・干渉現象...
G.P. トムソン (UK) (1927)
- 雲母の薄膜によって 同様な実験に 成功... 菊池正士 (日本) (1928)

電子線の回折・干渉現象

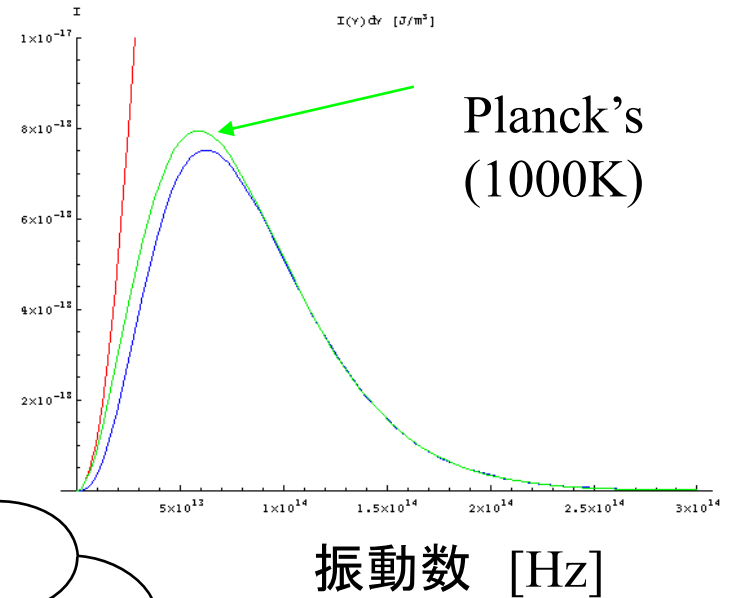


黒体輻射と光量子仮説

黒体=外部から入射する熱放射など(光, 電磁波)を、あらゆる波長に渡って完全に吸収し、また放出できる物体



輻射エネルギー

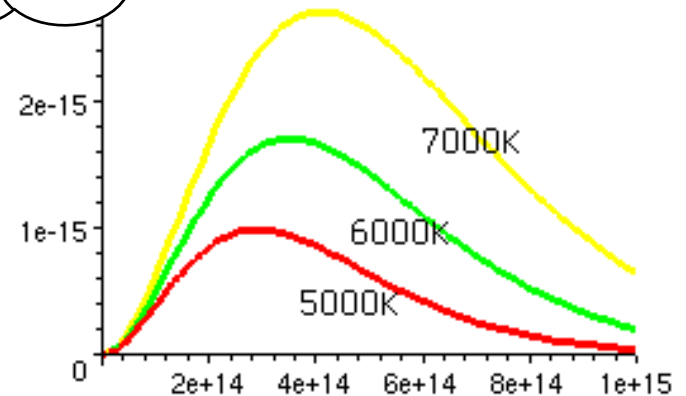


光は粒子だ！

$$I(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

(振動数)

Planck's law(1900)

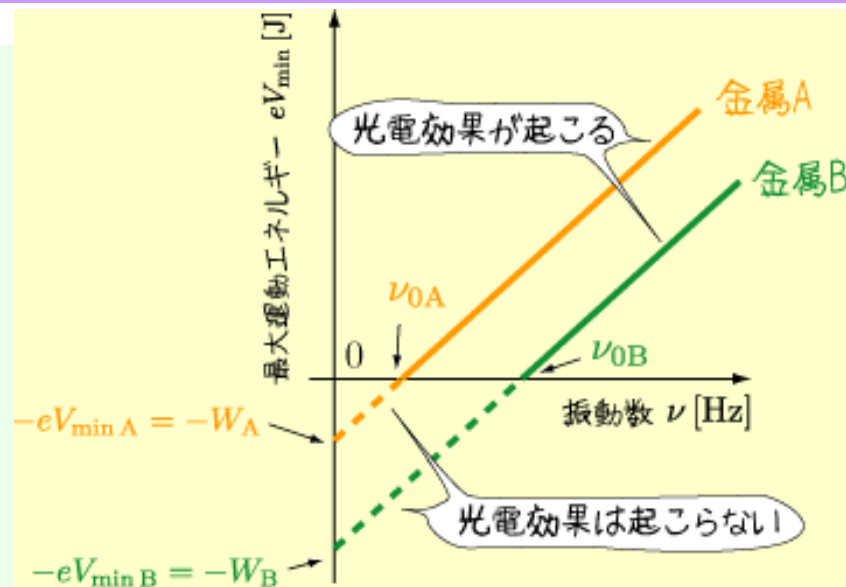
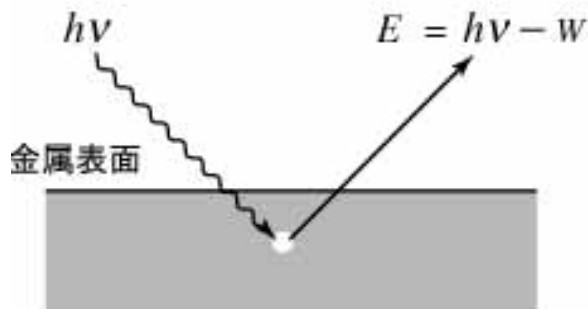
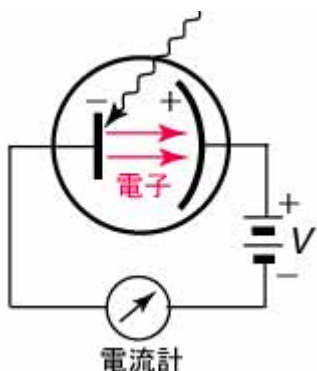


光電効果

- (1) 電圧 V を十分高くして、光電効果により 飛び出した電子 (光電子) を 全て陽極に集めると、 流れる電流は 陰極に照射した 光の強さに比例する。
- (2) どのような金属面に対しても、 光電効果の 起こり得る 最小の振動数があり、それ以下の振動数の光ではどんなに 強い光でも光電効果は 起こらない。
- (3) 光電子のもつ最大の運動エネルギーは光の強さに無関係 である。
- (4) 光電子のもつ最大の運動エネルギーは光の振動数によって 直線的に変化し、 アインシュタインの 仮説

$$E = h\nu - W$$

に完全に一致している。



最大運動エネルギー [J] と 振動数 [Hz]

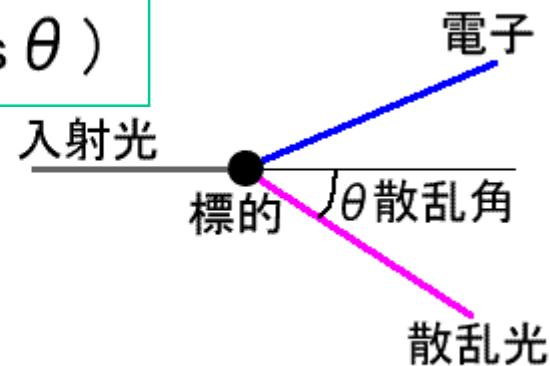


コンプトン散乱

電磁波を物質に照射した時に、散乱してでてくる電磁波の波長が入射電磁波のそれより大きくなるという現象

$$\lambda_s - \lambda_i = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$$

λ_s : 散乱光の波長
 λ_i : 入射光の波長
 h : プランク定数
 m : 電子の質量
 c : 光速
 θ : 散乱角



Arthur Holly Compton (USA @1923)

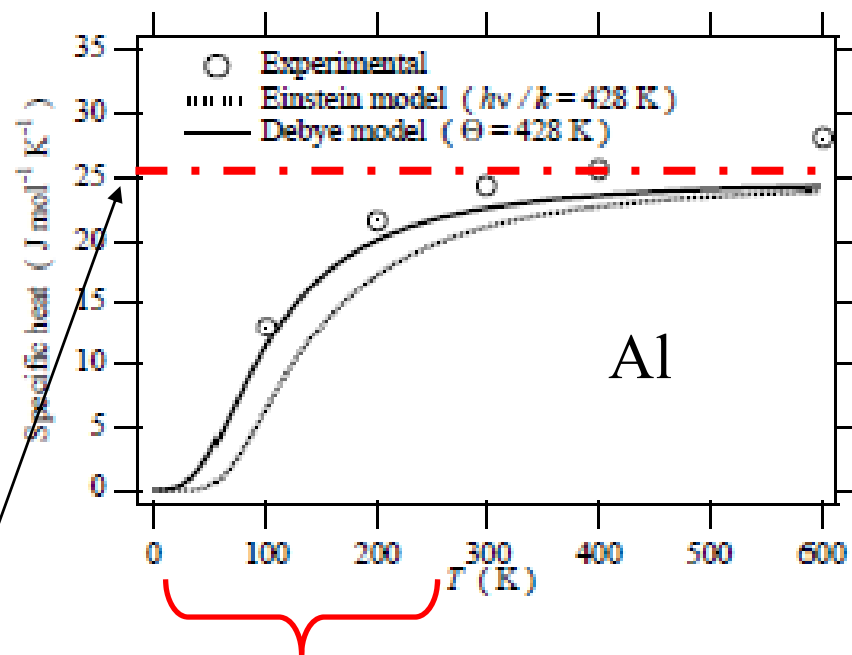
物質の比熱，理想気体の比熱

理想気体(単原子分子)の比熱

$$C = \frac{3}{2} N_A k_B = \frac{3}{2} R$$

結晶の比熱: Dulong-Petitの法則
← 古典論

$$C = 3 N_A k_B = 3R = 25.0 \text{ [J/mol} \cdot \text{K]}$$

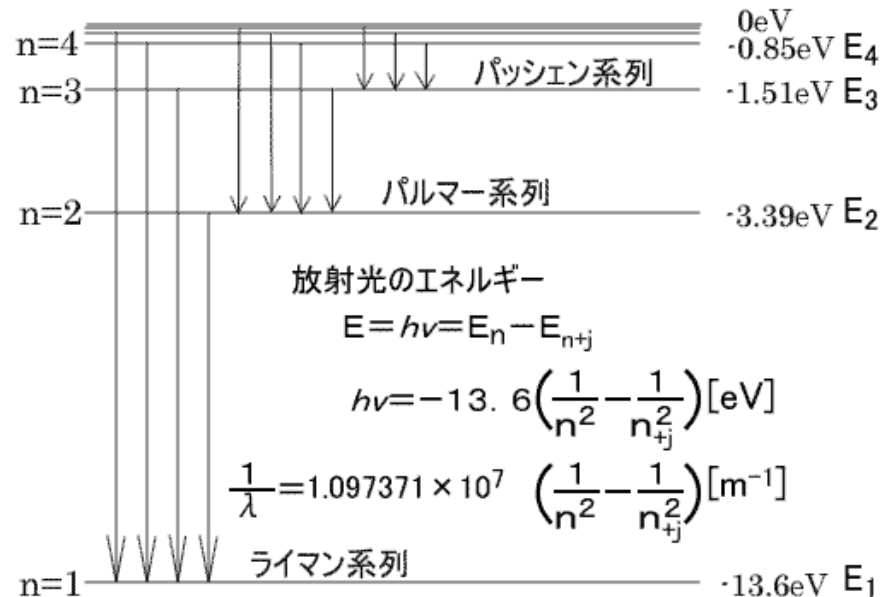


低温では一致しない

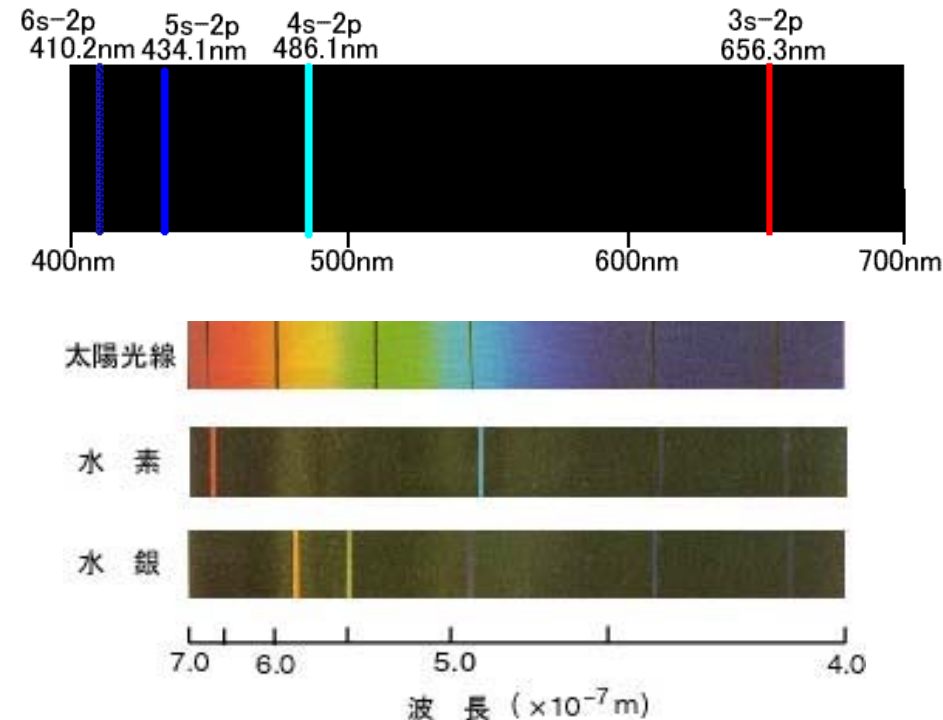


Debyeモデル = 格子振動の量子化⇒フォノン
(調和振動子: 第6章)

水素原子輝線スペクトル



水素原子のスペクトラム Hydrogen Spectrum



$$\frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{(m+a)^2} - \frac{1}{(n+b)^2} \right], \quad m, n = \text{整数}$$

リュードベリーの公式

まとめ

光 $\xrightarrow{\text{Einstein}}$ $\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ 波の性質 (電磁波)} \\ \bullet \text{ 粒の性質 (フォトン)} \end{array} \right.$

$$E = \hbar \omega$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

Schrödinger
方程式へ

物質 $\xrightarrow{\text{de Broglie}}$ $\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{ 波の性質 (物質波)} \\ \bullet \text{ 粒の性質 (粒子)} \end{array} \right.$

神戸大学電子物理工学系研究室

電気電子工学科のHP <http://www.eeddept.kobe-u.ac.jp>

▶ P1 : メゾスコピック材料学

半導体超微粒子、アモルファスの物性

▶ P2 : フォトニック材料学

半導体材料科学、半導体表面物性

P3 : 量子機能工学

半導体物性、半導体中のカオス・フラクタル

▶ P4 : ナノ構造エレクトロニクス

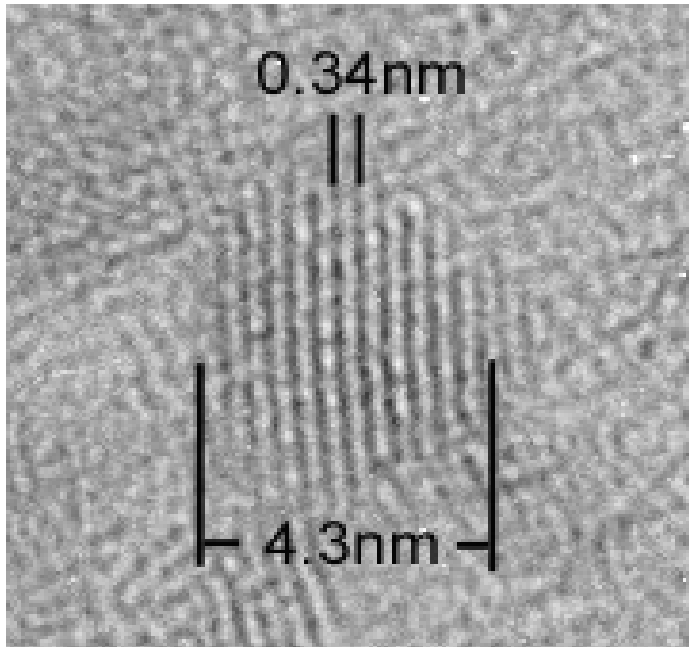
計算ナノエレクトロニクス、量子ナノ構造デバイス、光電子デバイス

▶ P5 : 電磁エネルギー物理学

半導体工学、光物性、固体表面物性

量子井戸中の粒子(P1)

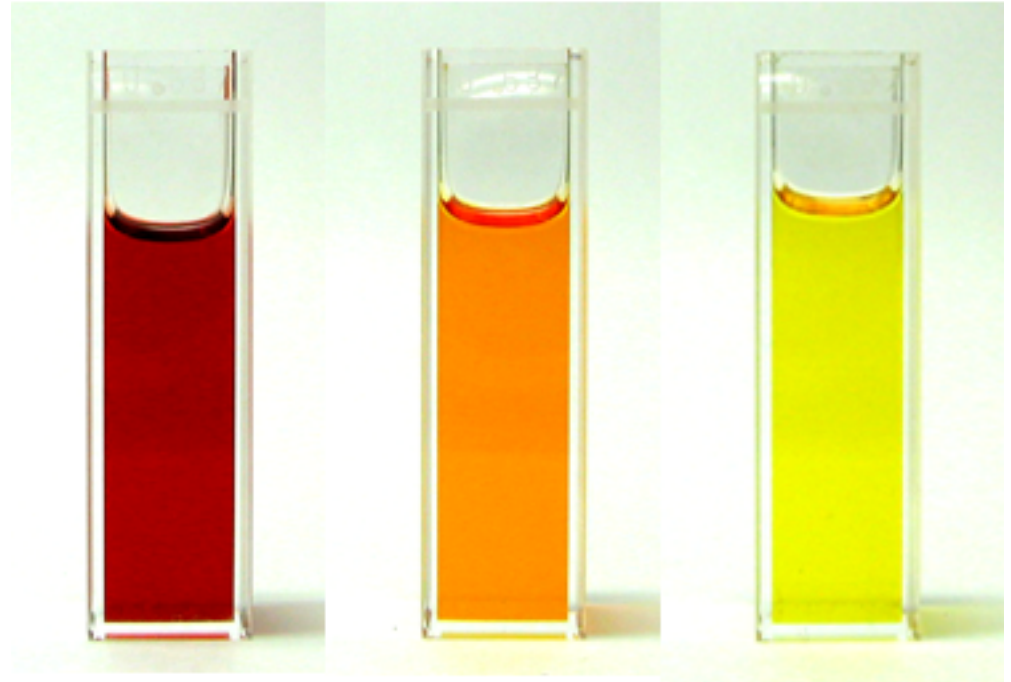
CdTe



3.3nm

3.0nm

2.6nm



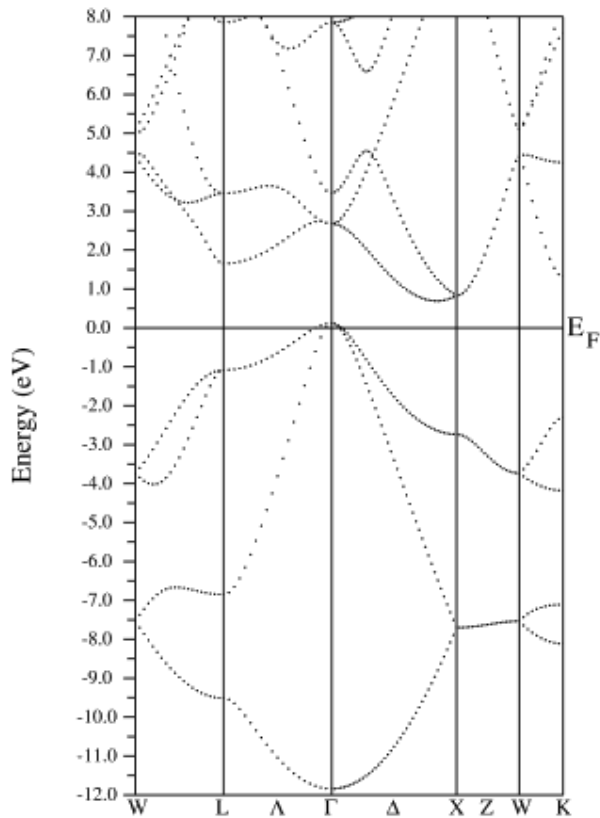
- *Very strong size dependence*
- *High energy shift of the band gap with decreasing the size*

バンド構造 → 固体物性(3年)

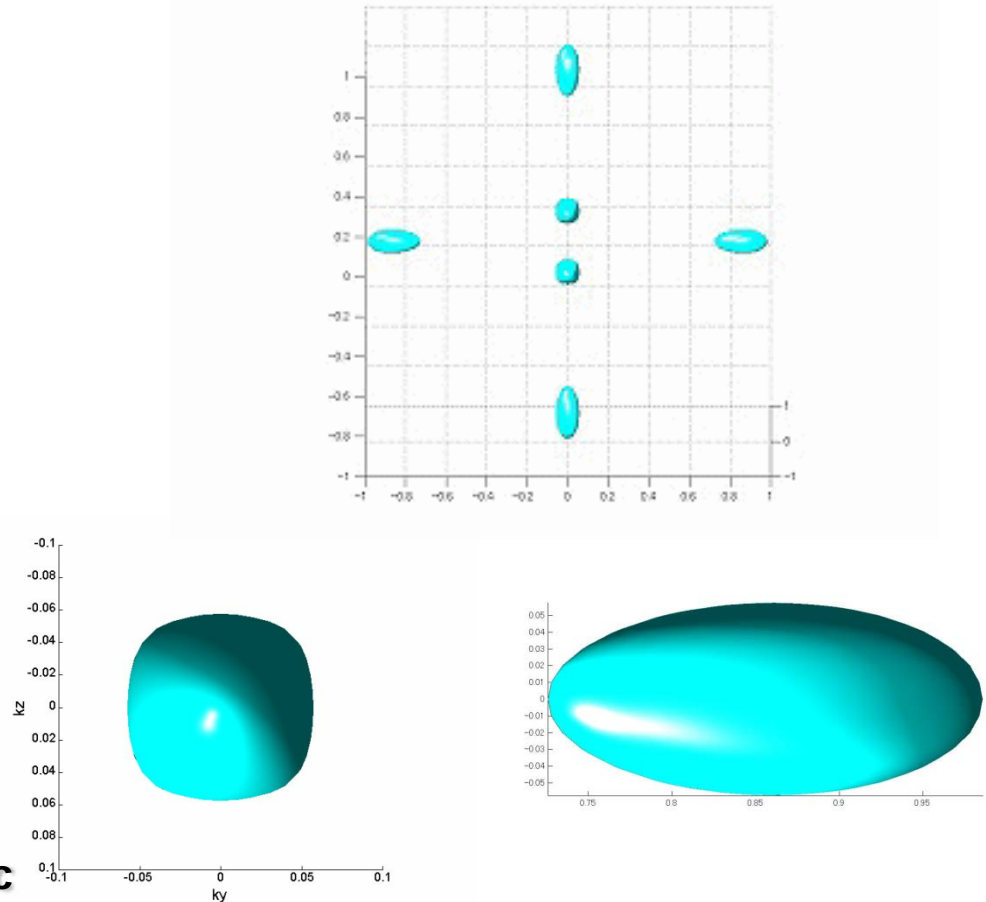
→ P系研究室



バンド構造 = 材料の中で電子の動きを表現する図



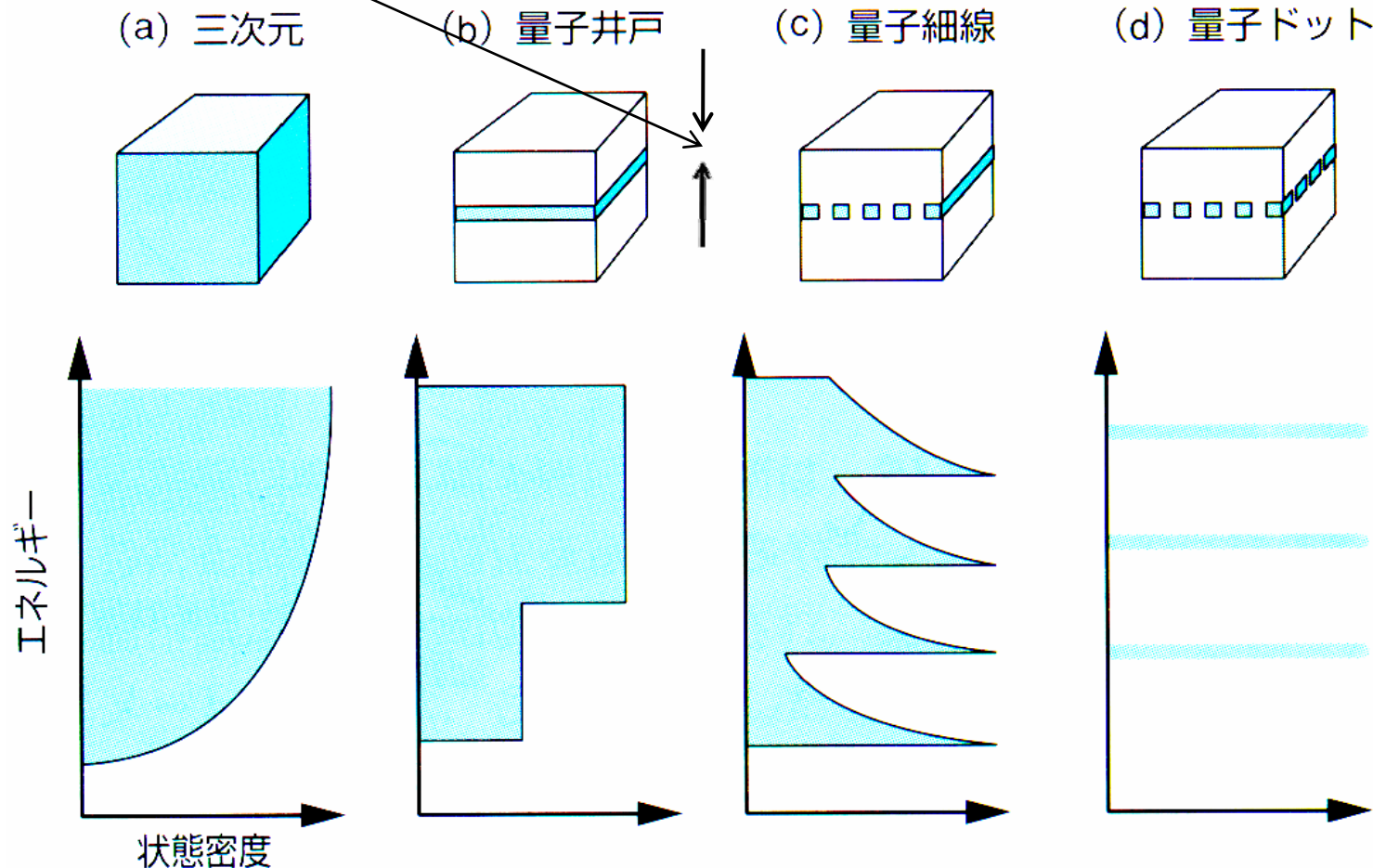
Bandstructure at High Symmetric Points



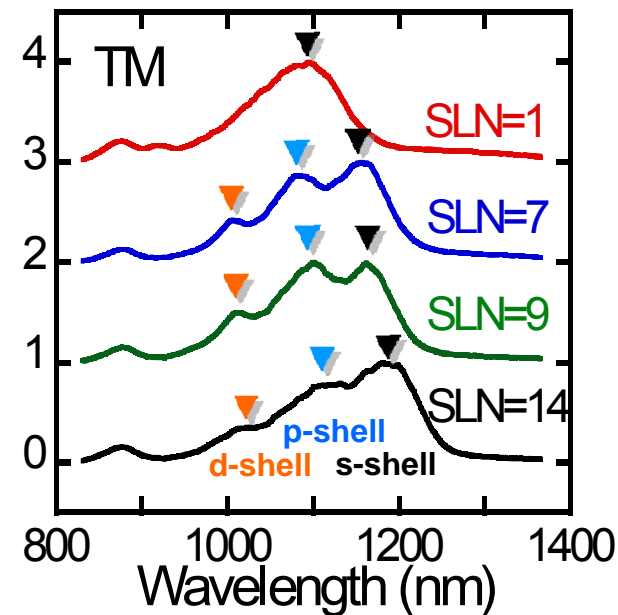
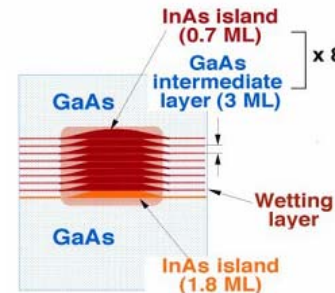
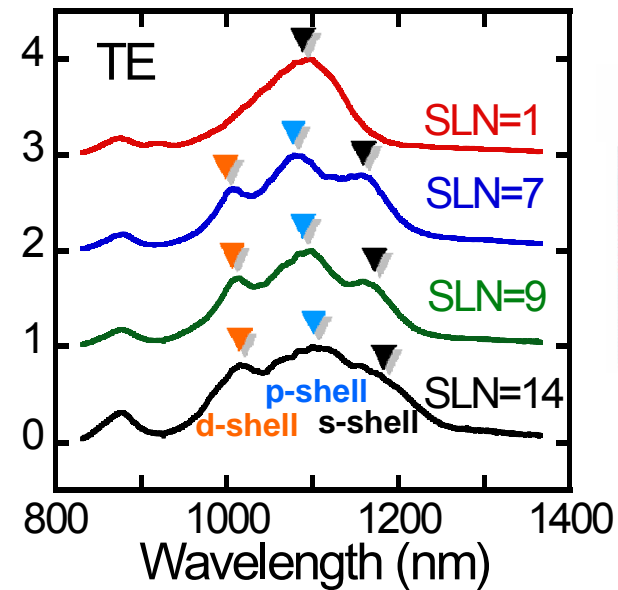
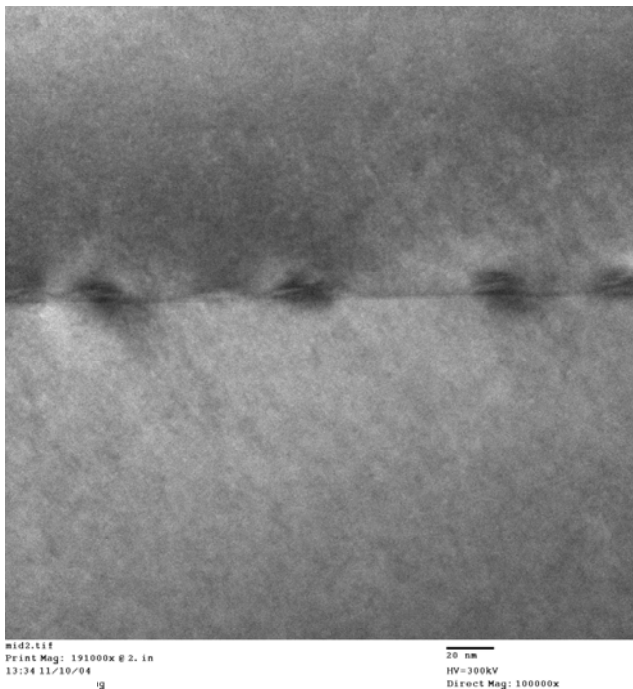
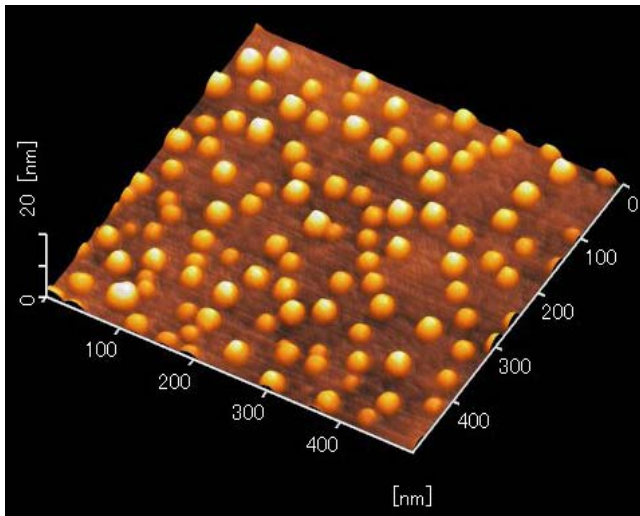
Iso-Surface of the Conduction Band

量子閉じ込め→量子物理I →P系研究室(QD LD)

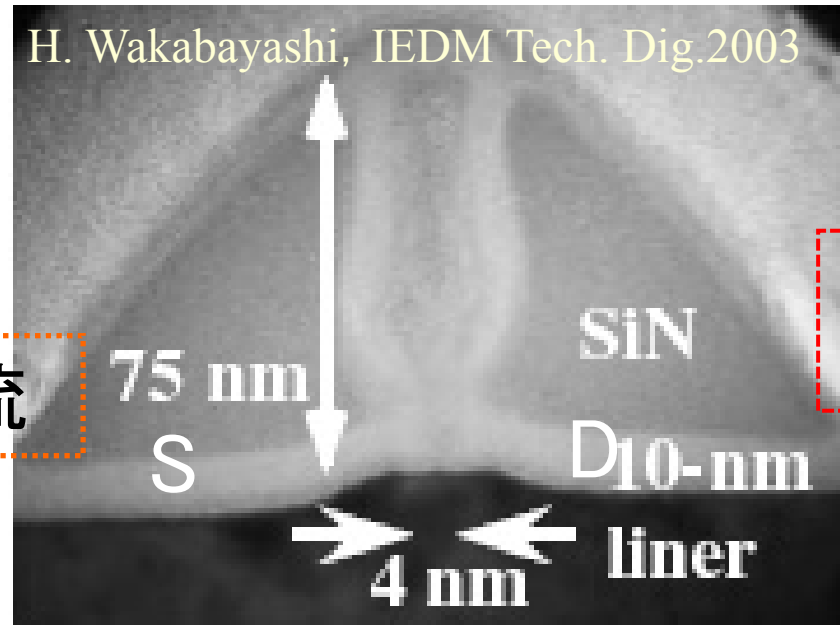
電子の波長 λ 程度で閉じ込め → 電子の波長って??



量子ドット(QD)からの発光(P2)

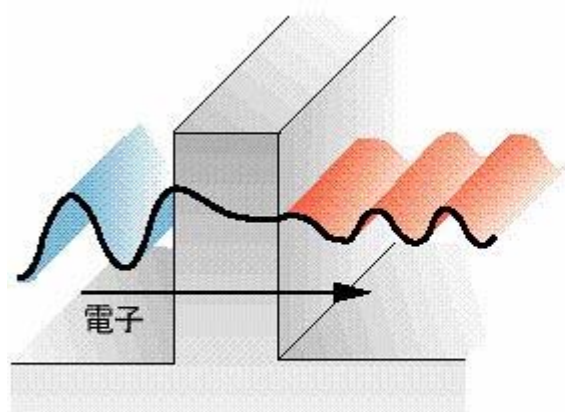


世界最小のMOSFET→量子閉じ込め →P系研究室

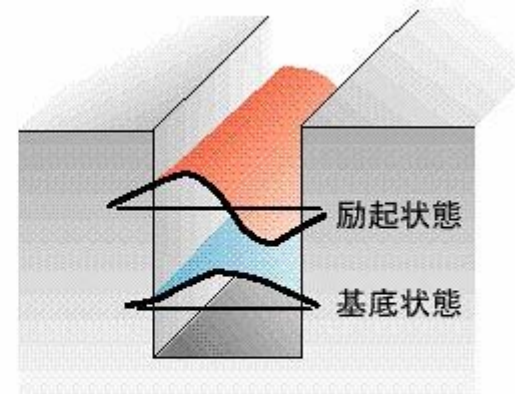


S-Dトンネル電流

反転層電荷の
エネルギー量子化



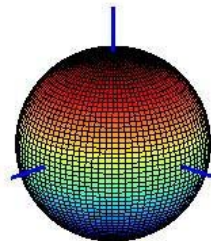
(a)トンネル現象



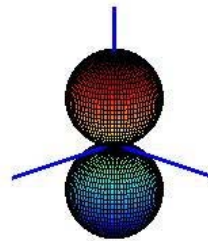
(b)量子サイズ効果

水素原子→固体物性, 半導体電子工学 →物性研究

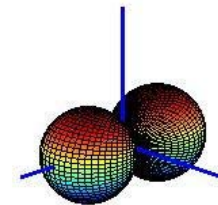
<http://www2.kobe-u.ac.jp/~ssouma/handoutai1.html>



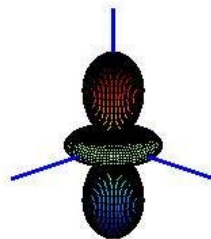
$L = 0$
 $M = 0$



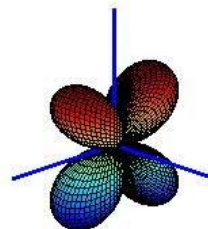
$L = 1$
 $M = 0$



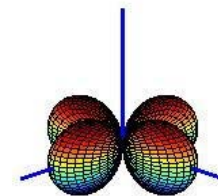
$L = 1$
 $M = 1$



$L = 2$
 $M = 0$



$L = 2$
 $M = 1$

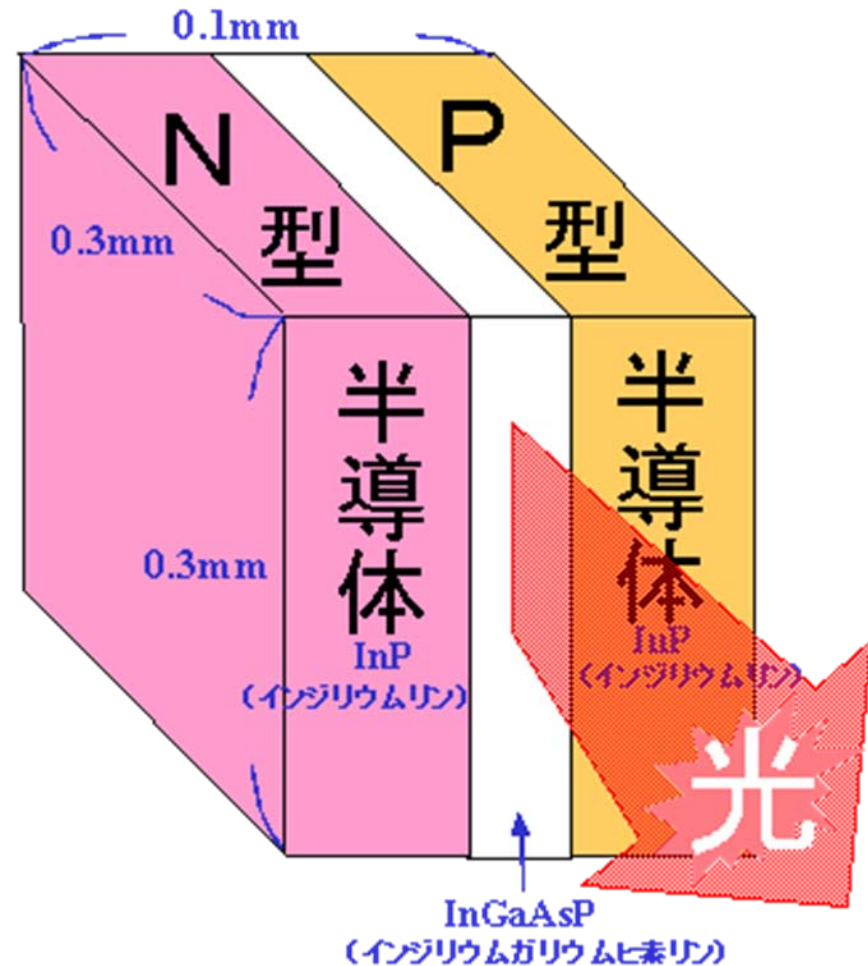


$L = 2$
 $M = 2$



水素原子の角度部分→結晶の電子状態

半導体レーザ



- 光通信(光電話, 光源, 光増幅器)
- 光線治療(短波長LD)
- センサ
- ポインタ

量子力学の用→固体物性, 電子デバイス I II, 材料etc → ナノデバイス設計 ▶

▶ デバイスマデリング

– 第一原理電子状態計算

→ 材料パラメータ抽出 (Si, SiO₂、InAs...)

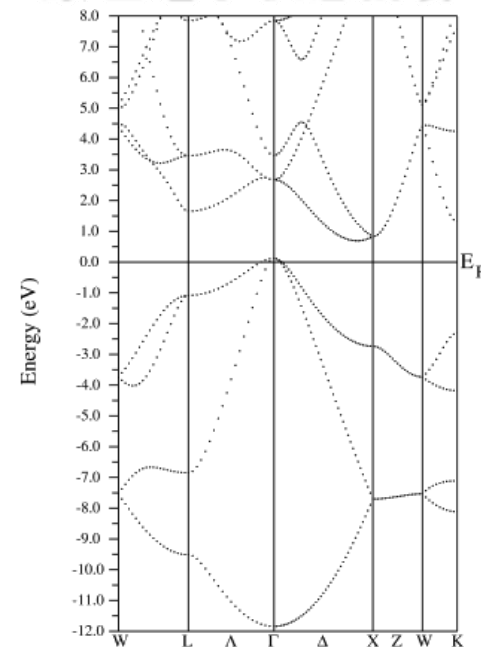
▶ ナノ構造デバイス解析

■ MOSTランジスタ

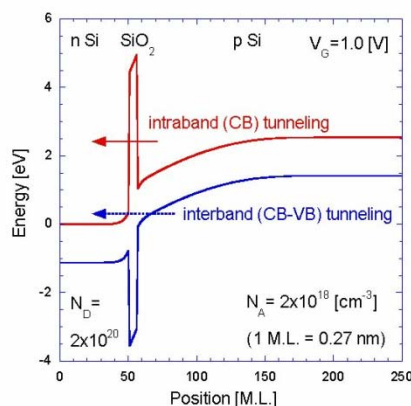
■ 共鳴トンネルダイオード (RTD)

■ 量子細線 (QWR) トランジスタ, レーザ

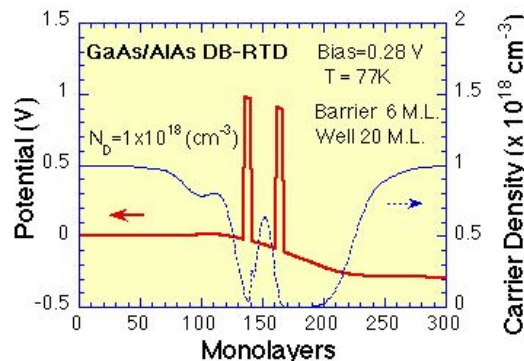
第一原理電子状態計算



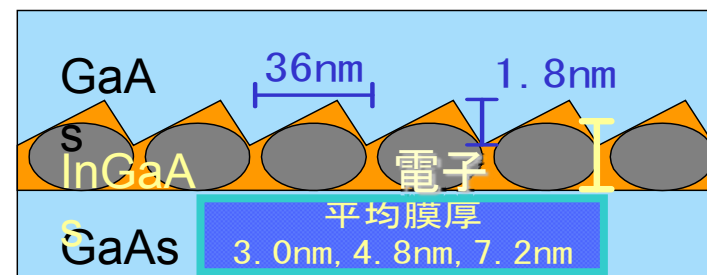
MOS diode



RTD



QWR



ナノデバイス

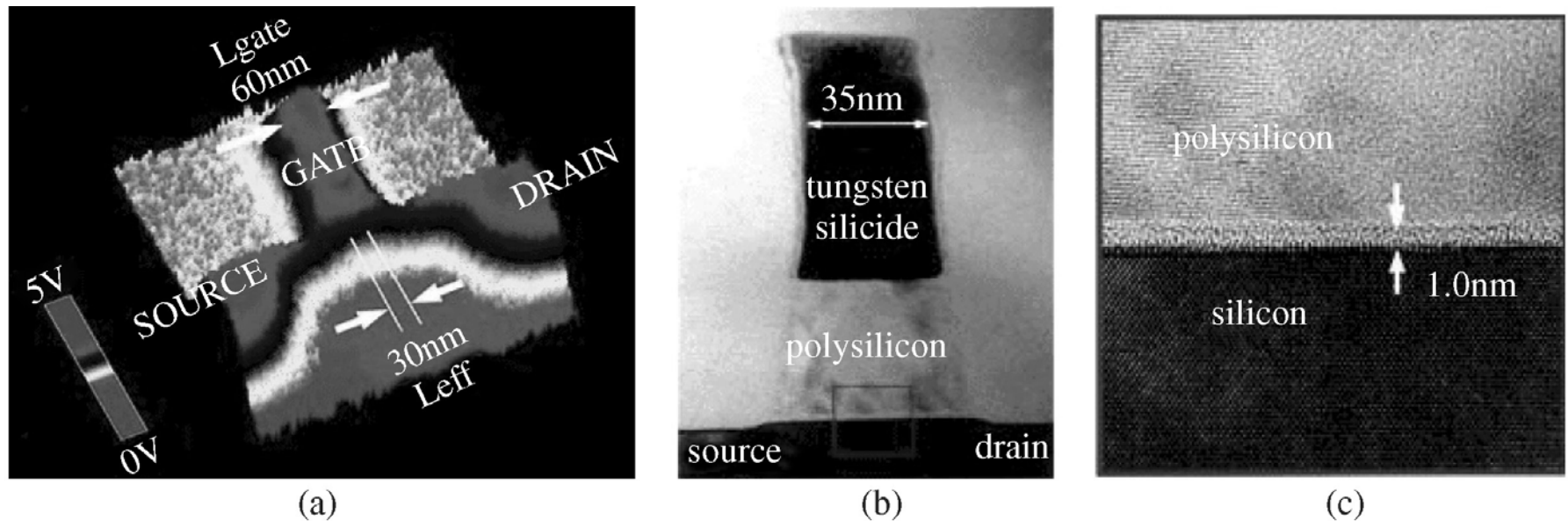


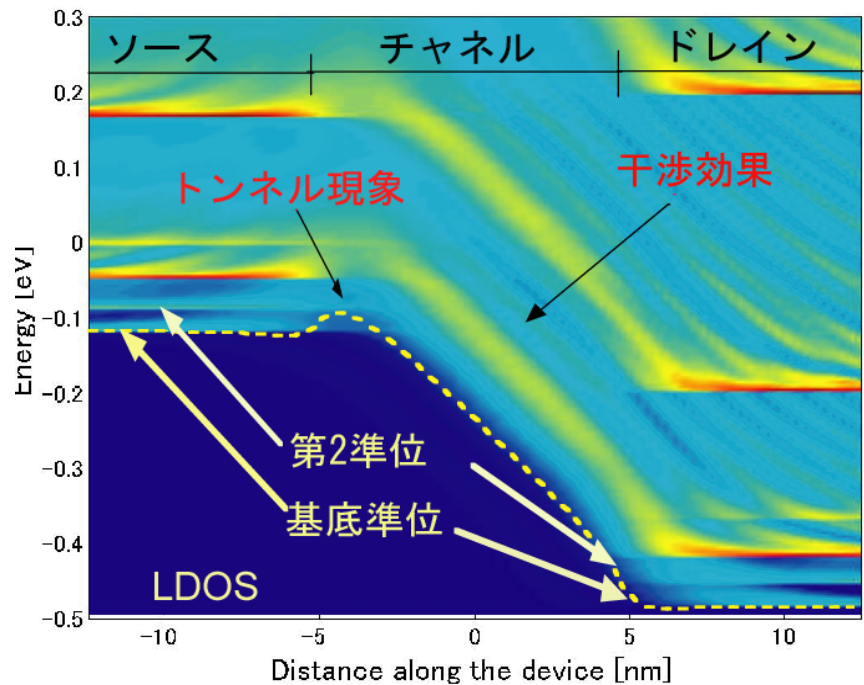
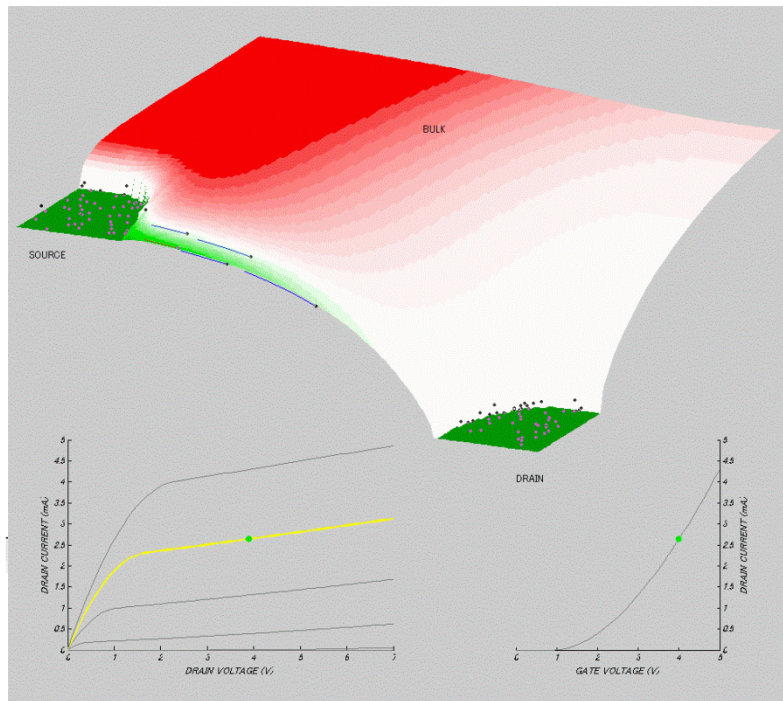
Fig. 3.15 (a) Scanning capacitance micrograph of the two-dimensional doping profile in a 60-nm gate length *n*-type MOSFET. The effective channel length is measured to be only $L_{eff} = 30\text{ nm}$. (b) Transmission electron microscope cross-section through a 35-nm gate length MOSFET. The channel length is only about 100 silicon lattice sites long. An enlargement of the channel region delineated is shown in (c). The gate oxide thickness estimated from the image is only about 1.0 nm. Images courtesy of G. Timp, University of Illinois.

ナノ構造MOSFETの量子輸送特性(P4)

古典的な手法：
電子を「**粒子**」として取り扱う

MOSFETの
ナノ微細化
(素子の大きさ
～5nm)

量子力学的な手法：
電子を「**波**」として取り扱う



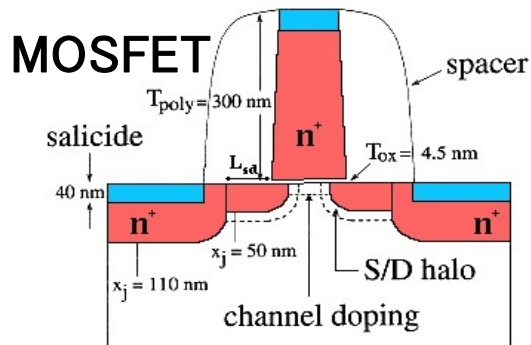
量子力学の応用例

- 汎用シミュレータのプロトタイプ完成
 - 2D, 3D 非平衡Green関数法
 - 並列分散化による超高速・高精度計算
- ナノ構造デバイス解析(解析次元:2~3次元)
 - 微細MOSFET、■ 量子ドット(単電子メモリ)
- 古典、半古典理論による従来モデル*、量子補正モデル■の妥当性(適用限界)検証 ← よりミクロ(正確)なNEGFの解と比較

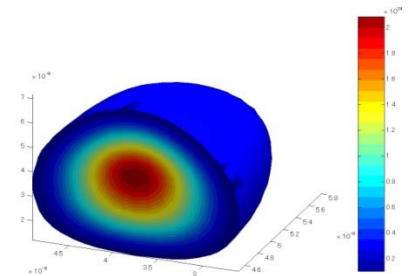
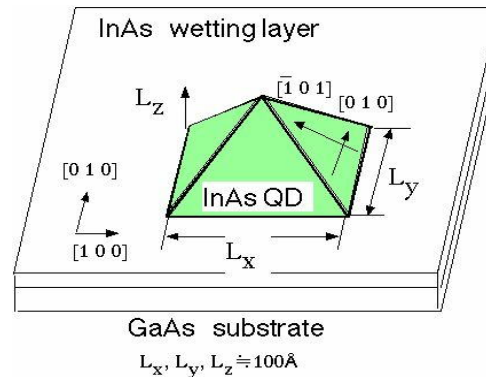
* 従来モデル

・ドリフト拡散モデル(古典)
シミュレータ

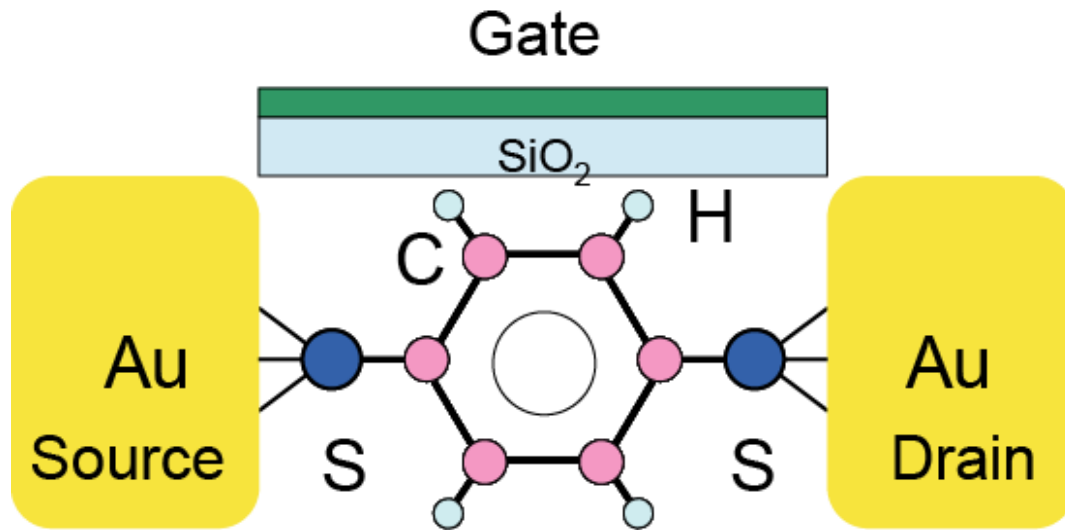
・モンテカルロ法(半古典)
シミュレータ



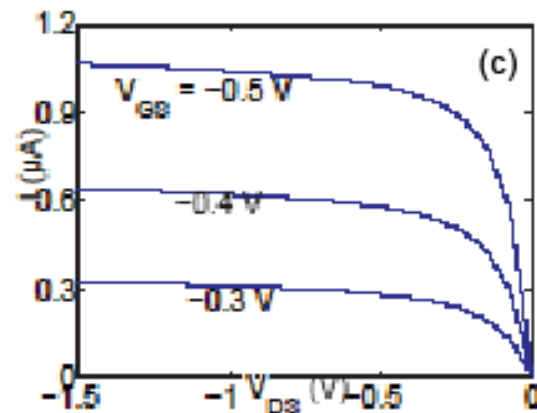
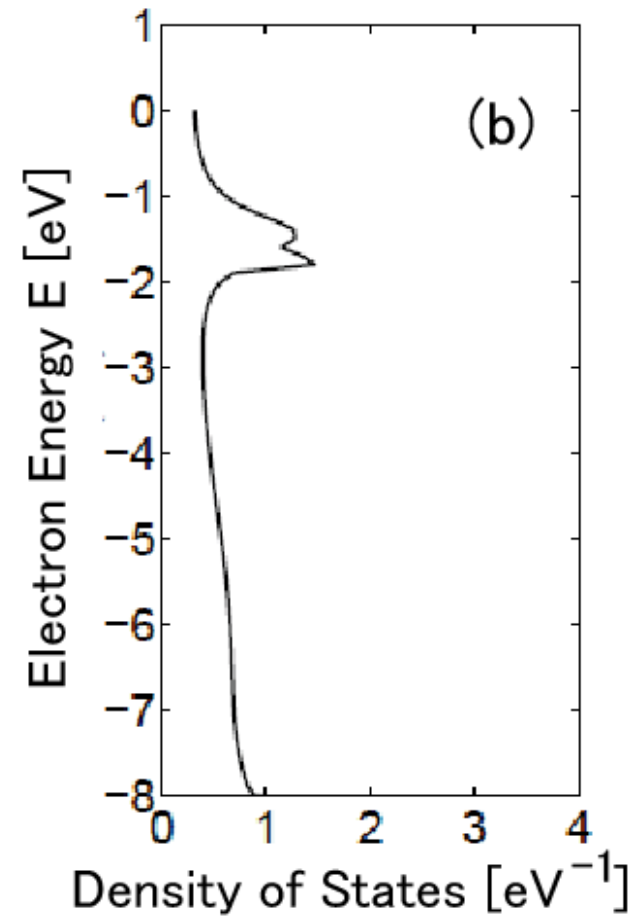
ドット



分子デバイスの例



(a) PDT-class molecular device



DNAの構造

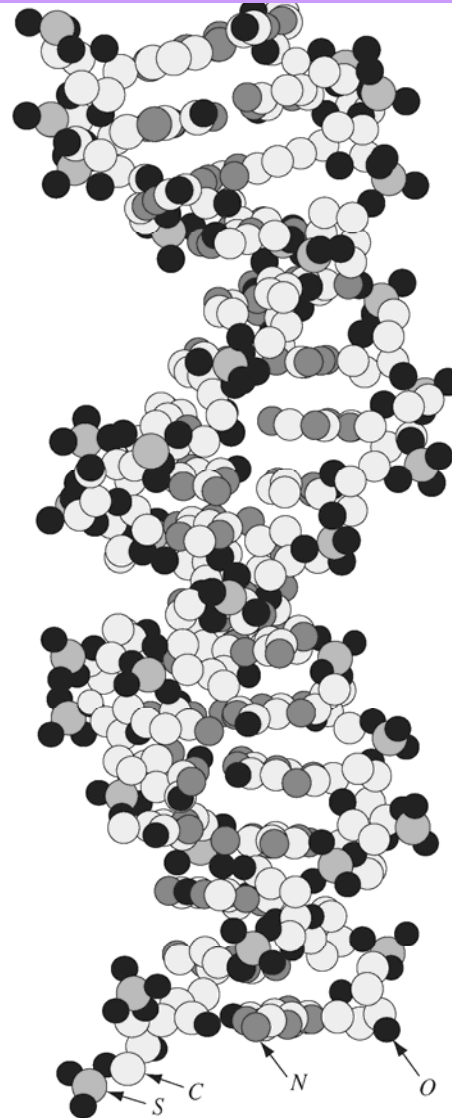


Fig. 1.1 Ball and stick model of a DNA molecule. Atom types are indicated.

最初のトランジスタとナノトランジスタ

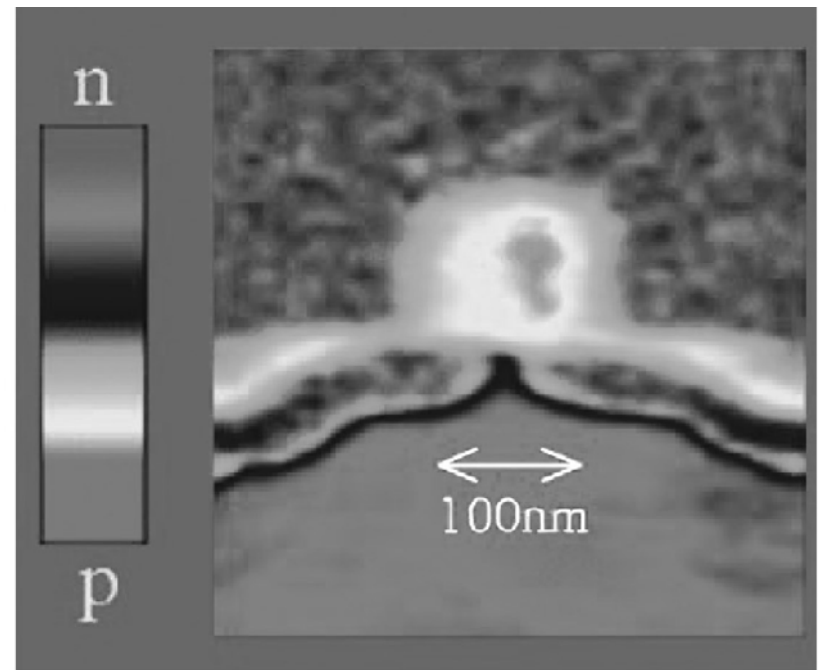


Fig. 1.2 Photograph (left) of the first transistor. Brattain and Bardeen's p - n - p point-contact germanium transistor operated as a speech amplifier with a power gain of 18 on December 23, 1947. The device is a few mm in size. On the right is a scanning capacitance microscope cross-section image of a silicon p -type metal-oxide-semiconductor field-effect transistor (p -MOSFET) with an effective channel length of about 20 nm, or about 60 atoms.⁴ This image of a small transistor was published in 1998, 50 years after Brattain and Bardeen's device. Image courtesy of G. Timp, University of Illinois.

sub-10 nm MOSFETにおける問題点

ゲートポリシリコンの空乏化

ゲートリーク電流

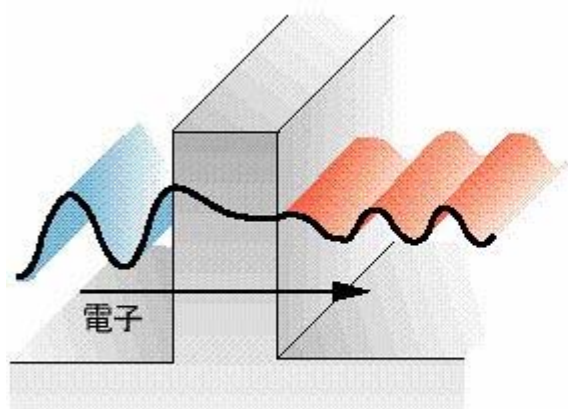
S/D抵抗

端の容量

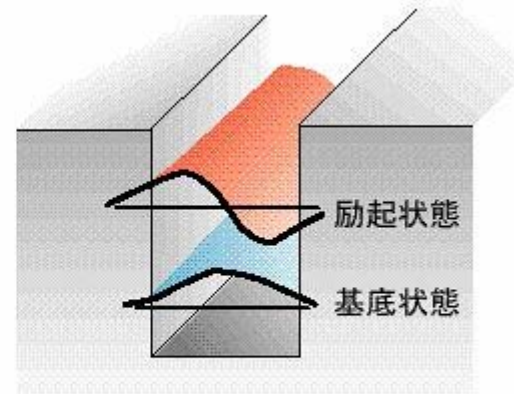
不純物原子の
離散分布

反転層電荷の
エネルギー量子化

S-Dトンネル電流



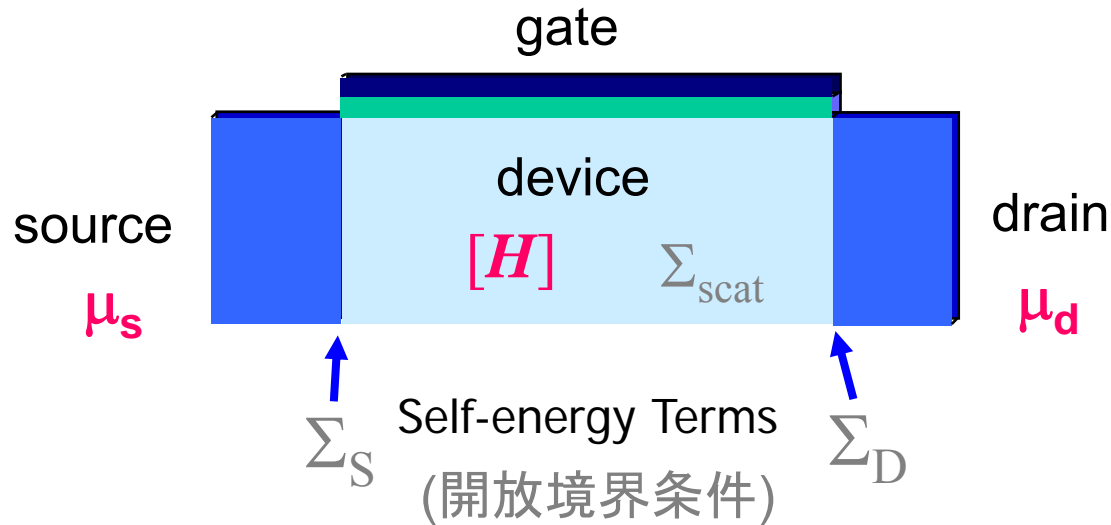
(a)トンネル現象



(b)量子サイズ効果

量子力学的デバイスシミュレーション 電子を「波」として取り扱う

nonequilibrium Green's function (NEGF)



$$\mathbf{G}^R = [E - H - \Sigma]^{-1}$$

$N \times N$ 有限行列

Boltzmann:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k})$$

NEGF:

$$\mathbf{G}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$$

原子を観る

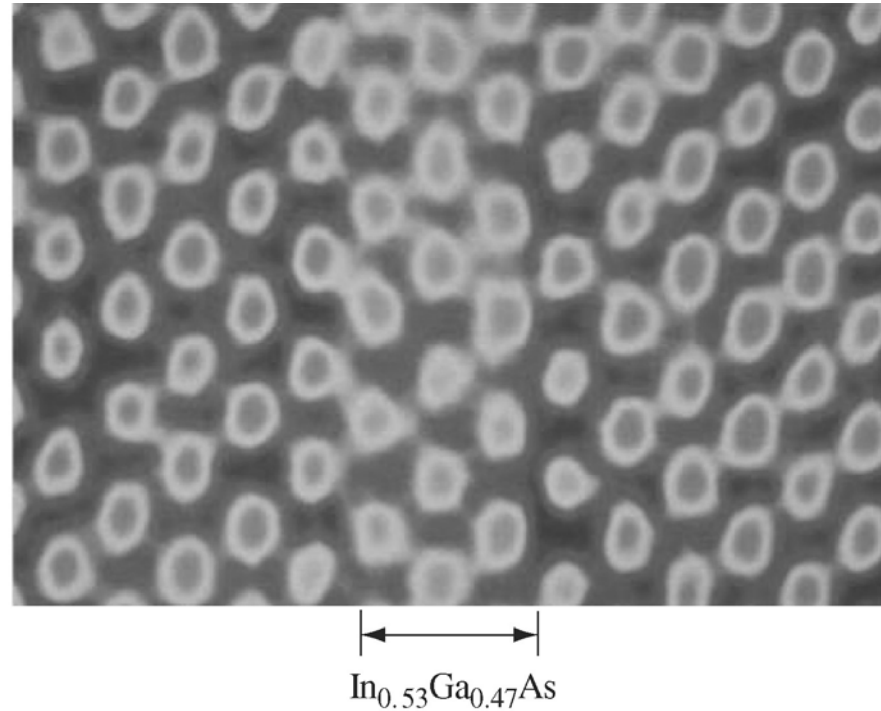


Fig. 5.5 Transmission electron micrograph showing an InGaAs quantum well in cross-section that is three monolayers thick and is sandwiched between InP barrier layers. The spots in the image represent tunnels between pairs of atoms. The minimum separation between tunnels in InP is 0.34 nm. Image courtesy of M. Gibson, Argonne National Laboratory.