

広島市立大学審査博士学位論文

量子的電子波動の古典的粒子表現に関する研究

2023年 3月

中村 伊吹

要旨

集積回路の微細加工技術の発展により、ナノスケール構造の電子デバイスが製造可能となった。微細構造下における電子は量子力学特有の現象を発現させることが問題となる一方、現在では、量子的現象を動作原理とするデバイスが考案されている。例えば、電子波の干渉現象や電子が障壁をトンネリングする現象を応用した量子波干渉トランジスタや単電子トランジスタが実験的に製作されている。これらは量子効果デバイスと総称される。また、従来の集積回路の一部を量子効果デバイスに置き換え、量子効果デバイスの特徴を生かして集積回路を高性能化・多機能化する試みがなされている。このような集積回路には量子効果デバイスと従来のマクロな電界効果トランジスタが混在する。

コンピュータによる混在回路の統合シミュレーションを可能にするためには、量子効果デバイスを回路シミュレータ用に集中定数型デバイスとしてモデル化する必要がある。しかし、現在このようにモデル化されているのは単電子トランジスタ以外にはあまり見当たらない。本研究では、量子効果デバイスを集中定数回路にモデル化できるよう、単一電子の量子力学系を確率常微分方程式 (SODE: Stochastic Ordinary Differential Equation) により記述することを試みる。また、量子系の波動関数と SODE の解の振る舞いが統計的に等価であるかを評価する。上記の研究背景や本研究の目的を本論文第 1 章に述べる。

第 2 章では、量子系と確率的な古典系に関する数理的基礎を与える。これを基に第 3 章では、単一電子量子系に対して、波動関数から得られる確率密度関数と確率流密度を用いて確率的古典系として記述する SODE を組立てた。また、関連分野の研究の歴史を概観し、SODE 組立て方法の独自性を明確にした。

第 4 章では、交流電界が印加された 1 次元多重量子井戸内の電子を記述する SODE を古典系モデルとして立て、電子の振る舞いを解析した。その結果、電子モデルは電界の周波数に同期せず準周期的に井戸間を遷移するなど、波動関数からは知ることのできないモデル固有の決定論的性質を明らかにした。このような解析は、例えば前述の混在回路のシミュレーション結果を評価

する上で重要である。第5章では、結合電子導波路内の電子を記述する SODE を古典系モデルとして立てた。この導波路は電子波フィルタやスプリッタ・カップラとして機能し、応用範囲が広い。結合電子導波路の断面構造は多重量子井戸構造であるから前章の解析を拡張すれば波動関数が得られ、これと古典系モデルの振る舞いの統計的性質を比較し、両者の一致を確認した。

第6章では、センサデバイス開発への応用を期待して、直流磁界下の電子の運動を SODE でモデル化した。このような運動で重要な役割を果たすスピンを表現するため、量子粒子としての電子の運動は2次元ベクトル型の波動関数(スピノル)により表現され、スピノルを変数とする Pauli 方程式に支配される。本研究では、スピノルと Pauli 方程式から SODE を導出したが、このような試みは本研究が初である。両方程式の解を評価し、統計的に一致することを確認した。

第7章では、本論文を総括するとともに、今後の課題を述べる。

論文および国際会議リスト

論文誌

1. **I. Nakamura**, N. Hirami, and H. Fujisaka, “Representation of electrons on multi-stage coupled electron waveguides by waves and particles,” *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE, Vol. 10, No. 2, pp. 206-220, April, 2019.
2. N. Hirami, **I. Nakamura**, and H. Fujisaka, “Wave-to-particle representation transformation for single-electrons on graphene,” *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE, Vol. 11, No. 4, pp. 501-516, October, 2020.
3. **I. Nakamura**, H. Fujisaka, “A classical particle model equivalent stochastically to Pauli spinor,” *Journal of Computational Electronics*, Springer, Vol. 21, No. 3, pp. 551-560, June, 2022.
4. K. Matsuura, **I. Nakamura**, and H. Fujisaka, “Analysis of coupled quantum parametric harmonic oscillators by classical nonlinear modeling,” *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE, Vol. 13, No. 3, pp.570-581, July, 2022.

国際会議 (査読あり)

1. **I. Nakamura**, H. Fujisaka, and M. Fukushima, “Long-PeriodicWalk of a Single-Electron in a Set of Electrically-Excited Quantum Dots,” *Proceedings of the International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications*, pp. 308-311, 2019.
2. S. Hayakawa, N. Hirami, **I. Nakamura**, and H. Fujisaka, “Representation of Quantum Waves and Particles in Hybrid Continuous-Discrete Momentum Fields,” *Proceedings of*

- the International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, pp. 312-315, 2019.
3. **I. Nakamura** and H. Fujisaka, “Classical Particle Model of an Electron in a Potential Generated by a Magnetic Field,” Proceedings of Korea-Japan Joint Workshop on Complex Communication Sciences, pp.26-29, 2020.
 4. **I. Nakamura** and H. Fujisaka, “On the Invariant Curve of the Poincaré Map of Excited Multi-Well Quantum System,” Proceedings of the International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, pp.10-13, 2020.
 5. **I. Nakamura** and H. Fujisaka, “Comparizon Between Spatiotemporally Discrete LCR Circuit Model and a Quantum Counterpart,” Proceeding of the International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, pp.264-267, 2022.

目次

第 1 章 序論	1
1.1 研究背景と目的	2
1.1.1 集積回路と量子効果デバイスの発展	2
1.1.2 量子効果デバイスの応用とデバイス・回路の統合シミュレーション	3
1.1.3 確率過程量子化	3
1.1.4 論文の目的	4
1.2 本論文の構成	5
第 2 章 量子論的確率系と古典論的確率系	7
2.1 量子系の表現 (波動表現)	8
2.1.1 物質波	8
2.1.2 Schrödinger 方程式	9
2.1.3 波動関数の解釈と連続の式	12
2.1.4 スピン	13
2.1.5 Pauli 方程式	15
2.2 確率的古典系の表現 (粒子表現)	17
2.2.1 Langevin 方程式	17
2.2.2 Fokker-Planck 方程式	18
第 3 章 電子の確率的古典粒子モデル	20
3.1 量子系の古典粒子モデル	21
3.1.1 Heisenberg の運動方程式	21
3.1.2 Bohm の量子ポテンシャル論	22
3.1.3 Nelson の確率過程量子化	24
3.2 確率密度関数と確率流密度を用いた粒子モデル構成法の提案	27

3.3	粒子モデルの発展	28
第 4 章	外部電場が印加された多重量子井戸の解析	30
4.1	多重量子井戸内電子の波動表現	31
4.1.1	多重量子井戸内電子の定常状態	31
4.1.2	外部電場による電子の非自律状態	34
4.2	軌道サンプルの決定論的振る舞いの解析	36
4.2.1	電子の粒子表現	36
4.2.2	Poincaré 写像	36
4.3	数値実験	38
4.3.1	電子の軌道サンプルから得られる井戸間遷移現象	38
4.3.2	粒子モデルによる電子の決定論的成分解析	42
第 5 章	多段結合電子導波路の解析	45
5.1	導波路内電子の波動表現	46
5.2	粒子モデルに用いる速度場の計算量削減	52
5.3	数値実験	53
5.3.1	1 段結合電子導波路の解析	53
5.3.2	2 段結合電子導波路の解析	56
第 6 章	対称ゲージ磁場における電子の軌道解析	59
6.1	Pauli 方程式から得られる連続の式	60
6.2	電子の波動的表現	62
6.3	古典粒子モデル	64
6.4	数値実験	65
6.4.1	数値実験条件	65
6.4.2	数値実験結果と考察	65
第 7 章	結論	69
7.1	本研究のまとめ	70
7.2	今後の課題	72

参 考 文 献	73
謝 辞	76

使用単位系

本論文では、計算簡略化のため、表 1 に示す原子単位系を用いて数値実験を行う。原子単位系は 1927 年に Douglas Rayner Hartree によって提案された単位系であり、電子や陽子などを扱う固体物理学や量子化学などで数式表現を簡潔に表現するために用いられる単位系である。この単位系は電気素量 e_0 、電子質量 m_e 、換算 Planck 定数 (Dirac 定数) \hbar 、ボーア半径 a_0 、ハートリーエネルギー E_h を基本単位に選ぶ。

表 1: 原子単位系の基本単位と組立単位

	物理量	記号	値
基本単位	電荷	e_0	1.602×10^{-19} [C]
	質量	m_e	9.109×10^{-31} [kg]
	作用	\hbar	1.055×10^{-34} [J·s]
	長さ	a_0	5.292×10^{-11} [m]
	エネルギー	E_h	4.360×10^{-18} [J]
組立単位	時間	\hbar/E_h	2.419×10^{-17} [s]
	力	E_h/a_0	8.239×10^{-8} [N]
	速度	$a_0 E_h/\hbar$	2.188×10^6 [m/s]
	運動量	\hbar/a_0	1.993×10^{-24} [kg·m/s]
	電流	$e_0 E_h/\hbar$	6.624×10^{-3} [A]
	電荷密度	e_0/a_0^3	1.081×10^{12} [C/m ³]
	電位	E_h/e_0	27.21 [V]
	電場	$E_h/e_0 a_0$	5.142×10^{11} [V/m]
	電気双極子	$e_0 a_0$	8.478×10^{-30} [C·m]
	磁束密度	$\hbar/e_0 a_0^2$	2.351×10^5 [T]
	磁気モーメント	$\hbar e_0/m_e$	1.855×10^{-23} [J/T]
	誘電率	$e_0^2/a_0 E_h$	1.113×10^{-10} [F/m]

第1章

序論

1.1 研究背景と目的

1.1.1 集積回路と量子効果デバイスの発展

集積回路の微細化技術は今日まで半世紀以上にわたり発展し続け、回路の高集積化・低電力化が止まることなく進められてきた [1, 2]. 集積化の進歩は凄まじく、LSI 上の素子集積度は 18ヶ月毎に倍増することが経験則を基に予測されている. この経験則はムーアの法則といい、技術開発の基本指針となっている [3].

しかし、素子のサイズが小さくなると内部の電子は集団的に扱えなくなり、単電子についての振る舞いをシミュレーションする必要がある. このように、統計的な性質に基づく半導体の設計・開発が適用できなくなるデバイスサイズを本論文では、量子限界という [4]. 量子限界における電子は従来のバンド構造と同様に、離散的なエネルギーを持ち、とりうる状態が制限される.

量子限界において、電子は粒子性だけでなく波動性も顕著となる. このような電子の二重性によって古典力学系では説明できない現象が生じる. この現象を量子効果といい、トンネル効果や電子の回折などが例として挙げられる. 量子効果に基づいて設計されるデバイスを量子効果デバイスという [4, 5].

量子効果デバイスの中でも、干渉や回折などの電子の波動性を動作原理としたデバイスを電子波デバイスという [4, 5, 6, 7, 8]. デバイス上の電子が熱エネルギーより大きな間隔で離散的なエネルギー準位をとるため、電子波デバイスは室温下においても安定して動作する.

さらにデバイスサイズが小さくなると動作に関与する電子数も少なくなり、機能が個々の電子の運動制御に基づくデバイスを構想することができる. このようなデバイスを単一電子デバイスという [2, 4, 5, 9, 10]. 代表的な単一電子デバイスとしてクーロン斥力により電子の流れを制御するクーロンブロッケード効果を用いた Single-Electron Tunneling トランジスタ (SET Transistor) がある.

また、昨今では電子の電荷に加えてスピンを積極的に利用するスピントロニクスと呼ばれる技術が注目されて、磁気トンネル接合などが提案・設計されている [11, 12].

単電子の運動を制御する SET デバイスや電子のスピンを利用したスピントロニクスデバイスなどの量子効果デバイスを用いた回路の開発も行われている. 例えば、SET トランジスタを用いて単電子を生成、破棄、移動させることによって論理演算を行う SET 論理回路が提案されている [13, 14]. 一方、スピントロニクスデバイスにおいてもメモリ集積回路への応用が考えられている

[12].

1.1.2 量子効果デバイスの応用とデバイス・回路の統合シミュレーション

量子効果デバイス単体の動作をコンピュータを用いてシミュレーションするとき、電子は波動的に表現される。一方、マクロな電子回路のシミュレータでは、単一電子は素電荷を持つ粒子として扱われなければならない。そのため、量子効果デバイスを含めた回路シミュレーションでの電子は量子効果デバイスモデル内では波動的に、マクロな回路上では粒子的に表現される。本論文では、このようなシステムを波動・粒子混合システムと呼ぶ。

波動・粒子混合システムの例として、単電子を用いた THz 波受信システムが提案されている [15]。このシステムは到来する電磁波を光電効果によって検波する。検波の際に励起された電子はそのエネルギーすなわち電磁波の周波数に応じて電子波デバイスによって弁別される。弁別された電子は SET デバイスに送られ、SET 論理回路が受信した電磁波の表現していたデータを復号する。このように単電子を用いた受信システムは電子の波動性と粒子性を組み合わせたシステムとなっている。

波動・粒子混合システムをシミュレーションするとき、量子効果デバイスと電子回路を分けてシミュレーションする必要がある。すなわち、電子波動の振る舞いは Schrödinger 方程式などの偏微分方程式により、回路の動作は電磁氣的物理量を変数とする常微分方程式を用いて解析する必要がある。これらのシミュレーションが統合できれば、量子効果デバイスを用いた回路シミュレーションの工程が1つとなり、従来のシミュレーションの手法や手続きも継承できる。

1.1.3 確率過程量子化

量子力学と古典力学の対応をつけようとする試みはいくつか行われている。古典力学系の理論から量子力学系における振る舞いを予測する方法は正準量子化と呼ばれる。正準量子化は古典力学系で全エネルギーを表現する Hamiltonian を量子力学系における演算子に置換する。正準量子化によって得られた量子力学系の表現は Schrödinger 表現と Heisenberg 表現の2つがある。この2つの表現は理論的に等価であることが示されている。

Heisenberg は電子波の確率的な解釈により、波動関数から電子の物理量の期待値を計算可能な Heisenberg の運動方程式を導いた [16, 17]。また、Bohm は Schrödinger 方程式の実部を利用し

た量子ポテンシャル理論によって、電子の2重スリット問題とトンネル効果について電子の軌道を追跡し、説明する1つのモデルを提案した [17, 18]. 確率過程量子化法は量子ポテンシャル理論を発展させた理論であり、Nelson によって確立された. この理論に基づけば、電子を Brown 粒子と見なして Langevin 方程式によりモデル化し、電子軌道を追跡できる [19]. これらの理論は、波動関数を電子の運動方程式に組み込むことで、量子系と等価な古典系を提案している. 上述したモデルによって量子現象を古典力学系で説明することができた.

しかし、量子ポテンシャル理論と確率過程量子化は電子の内部自由度であるスピンを考慮した理論ではない. Heisenberg の運動方程式は空間的な積分を用いて期待値を計算するため、スピンの期待値を求めることはできるが、トンネル効果や回折現象を表現できない.

1.1.4 論文の目的

本論文では波動・粒子混合シミュレーションを目指して、電子のスピンを考慮して量子効果を説明することが可能である確率論的古典粒子モデルの提案を行う. 波動関数から計算される確率密度関数とモデルから算出される確率密度関数を比較し、提案モデルの妥当性を検討する. また、これまでのモデルでは困難であった空間的局所点におけるスピンの方向の計算を可能とするモデルを構築することを目指す.

1.2 本論文の構成

本論文では、波動・粒子統合シミュレーションを目標とした電子の古典粒子モデルの提案とその応用例について述べる。

第2章では、本論文で論ずる古典粒子モデルを説明するための準備として、量子力学の基礎(波動表現)と確率的古典力学の基礎(粒子表現)について説明する。電子の波動表現では、微視的粒子の波動性を表現する物質波の考え方と支配方程式である Schrödinger の波動方程式について述べる。さらに、量子系でのみ表れるスピンについて紹介し、電磁場とスピンの相互作用を考慮している支配方程式である Pauli 方程式を説明する。一方、古典確率表現では、ランダム力によって運動する粒子の動きを計算する一般化 Langevin 方程式を紹介する。加えて、一般化 Langevin 方程式の解が従う確率密度関数の時間変化を表す Fokker-Planck 方程式を導出する。

3章では、電子の波動性を考慮した古典粒子モデルについて述べる。はじめに、これまでに提案されていた量子力学の演算子を変数として古典力学的に表現する Heisenberg の運動方程式, Bohm の量子ポテンシャル理論, Nelson の確率過程量子化を説明し、各手法の問題点を述べる。次に、古典確率論において用いられる Fokker-Planck 方程式と量子力学の支配方程式の関係性を基に電子の古典粒子モデルを構築する。提案したモデルは Pauli 方程式のようなスピンを含んだ電子の波動表現でも適用可能であることを示す。加えて、量子力学と古典力学を対応付けるための粒子モデルの発展について述べる。

4章では、多重量子井戸に外部電場を印加した際の電子の運動について説明する。交流電場を印加することにより電子状態が周期的に変動する Rabi 振動と呼ばれる現象が発生する。Rabi 振動によって電子が複数の井戸間を遷移する現象を粒子モデルを用いて表現する。さらに井戸の局在系列の周期性について波動関数の周波数成分と Poincaré 写像を用いて考察する。

5章では、結合電子波線路上の電子に関する粒子モデルを構築する。この線路上の電子の波動関数を伝送行列によって算出し、その電子の運動を粒子モデルで計算し、結合電子波線路が電子の初期運動量 p によって分別するカプラ/スプリッタとしての機能を持つことを示す。

6章では、対称ゲージ磁場における電子の粒子モデルを構築する。磁場 B は電子のスピンと相互作用し、角運動量となって観測される。そのため、運動(波動関数)にも影響を与える。ここでは、スピンの向きを内包しているスピノルを変数とする Pauli 方程式から確率密度関数と確率流密度を求め、粒子モデルを構築する。構築したモデルから算出される確率密度関数が Pauli 方程式から得られる確率密度関数と一致することを示す。また、軌道サンプル上のスピノルのベクト

ル値からスピンの向きを計算する方法についても述べる。

第7章では、本論文についてのまとめと今後の課題について述べる。

第2章

量子論的確率系と古典論的確率系

古典確率系, 量子力学系ともに確率的に振る舞う粒子の運動を記述することができる. 古典確率系は粒子性のみを記述するためマクロ現象を扱うことができる. 一方, 量子力学系は確率を波として表現する. そのため, 干渉や重ね合わせといった量子系波動現象を記述することができる. 本章では, 量子論的確率系と古典論的確率系について説明する.

2.1 量子系の表現 (波動表現)

本節では, 電子など粒子性に加えて波動性を示す電子についての基礎理論を説明する. この理論は量子力学とよばれ, 波動的性質は波動関数によって説明される [4, 16, 17].

2.1.1 物質波

20世紀初頭に波であると考えられていた光が粒子的性質をもつことが明らかになった. 光の粒子性が確認された現象として, 黒体輻射や光電効果, コンプトン効果などが挙げられる. この事実を受けて, de Broglie は「電子も波動性を有する」と仮説を立てた. この仮説を de Broglie の仮説という. de Broglie の仮説は Davisson と Germer らによって行われた電子回折の実験によって実証された. このように, 電子も波動性を有することが明らかとなった. これら光や電子が粒子性と波動性を兼ね備えることを二重性という.

粒子性を特徴づける量はエネルギー E と運動量 p である. 一方, 波動性を特徴づける量は周波数 f と波長 λ である. 電子が粒子性と波動性の二重性を有していることを次式で定義する.

$$E = hf \tag{2.1}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{2.2}$$

ここで, $h (= 6.626 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}])$ は Planck 定数という.

式 (2.1), 式 (2.2) は角周波数 $\omega = 2\pi f$, 波数 $k = 2\pi/\lambda$ を用いると

$$E = \hbar\omega \tag{2.3}$$

$$p = \hbar k \tag{2.4}$$

のように書き直すことができる. ここで, $\hbar = h/2\pi (= 1.055 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}])$ は換算 Planck 定数ま

たは Dirac 定数という.

式 (2.2), (2.4) を 3 次元空間に拡張すると,

$$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = \hbar \mathbf{k} \quad (2.5)$$

と表記される. ここで, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ は波数ベクトルと呼ばれ, その大きさ $|\mathbf{k}|$ は次式で定義される.

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.6)$$

以上から, 光や電子の持つ二重性は式 (2.1), (2.2), (2.3), (2.4), (2.5) によって表現される. このような関係を満たす電子の波を物質波または de Broglie 波という.

2.1.2 Schrödinger 方程式

前項で定義した物質波を波動関数 $\psi(t, x)$ で表現するとして, 物質波が従う方程式を考える. 質量 m の自由粒子が運動量 p を持って x 方向の正方向に進んでいると仮定すると, その粒子の運動エネルギーは

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2.7)$$

この時, 波動関数 $\psi(t, x)$ は平面波として

$$\psi(t, x) = A \exp\{i(kx - \omega t)\} \quad (2.8)$$

のように表現できると仮定する. ここで, i は虚数単位, A は定数, $\omega = \hbar k^2 / 2m$ である. 波動関数 $\psi(t, x)$ が式 (2.8) で表されると, 次の関係が導かれる.

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x) = p\psi(t, x) \quad (2.9)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = E\psi(t, x) \quad (2.10)$$

式 (2.9), (2.10) より, エネルギー E と運動量 p はそれぞれ以下の対応関係が成り立つ.

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.11)$$

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.12)$$

このとき, 1次元の物質波の従う方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(t, x) \quad (2.13)$$

となる.

式 (2.8) を 3次元に拡張すると次のように表現できる.

$$\psi(t, \mathbf{r}) = A \exp\{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)\} \quad (2.14)$$

ここで, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ は位置ベクトルである. 1次元のときと同様に考えると, 運動量 \mathbf{p} は以下の対応関係を満たす.

$$\mathbf{p} \leftrightarrow -i\hbar \nabla \quad (2.15)$$

ただし, $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$. 一方, エネルギー E は式 (2.12) の対応関係が成立する. このとき, 式 (2.14) を満たす波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ が従う方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(t, \mathbf{r}) \quad (2.16)$$

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.17)$$

となる.

一般に, 粒子はポテンシャル $V(t, \mathbf{r})$ によって力 \mathbf{F} を受ける. このとき, 力 \mathbf{F} は

$$\mathbf{F} = -\nabla V(t, \mathbf{r}) \quad (2.18)$$

と表現される. また, エネルギー E と運動量 \mathbf{p} の関係は次式を満たす.

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(t, \mathbf{r}) \quad (2.19)$$

式 (2.19) に式 (2.12), (2.15) を適用することで, ポテンシャル $V(t, \mathbf{r})$ によって力を受けている粒子の波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ が従う以下の方程式が得られる.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) = \hat{H} \psi(t, \mathbf{r}) \quad (2.20)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(t, \mathbf{r}) \quad (2.21)$$

ここで, \hat{H} は Hamilton 演算子と呼ばれ, 系全体のエネルギーを表現する. この方程式 (2.20) を時間に依存する Schrödinger 方程式という.

式 (2.20) を解いて得られる波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ によって, 電子の状態を記述することができる. ここで, エネルギー E が一定となる波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ は式 (2.3) より次式のような時間項を持つ関数である.

$$\psi(t, \mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) \quad (2.22)$$

この波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ をエネルギー E をもった定常状態という. 式 (2.22) を式 (2.20) に代入することで, 位置 \mathbf{r} のみに依存した Schrödinger 方程式が得られる.

$$\hat{H} \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

この式を時間に依存しない Schrödinger 方程式という. 式 (2.23) は Hamiltonian 演算子 \hat{H} の固有値問題となっており, 解である波動関数 $\varphi(\mathbf{r})$ を固有状態, 対応する固有値 E を固有エネルギーという.

次に, 電磁場中の電子に関する Schrödinger 方程式を考える. 電場 \mathbf{E} , 磁場 \mathbf{B} の中を運動する質量 m , 電荷 q の荷電粒子が従う Newton の運動方程式は

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e_0 \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \right] \quad (2.24)$$

である. 電磁場 \mathbf{E}, \mathbf{B} はそれぞれベクトルポテンシャル \mathbf{A} , スカラポテンシャル ϕ を使って次式のように表現される.

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (2.25)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.26)$$

このとき、運動量 \mathbf{p} と Hamilton 演算子 \hat{H} は

$$\mathbf{p} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} + q\mathbf{A} \quad (2.27)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \quad (2.28)$$

となる。ここで、 \mathbf{A}, ϕ はともに演算子である。したがって、Hamilton 演算子 (2.28) を Schrödinger 方程式 (2.20), (2.23) に代入し、式 (2.12), (2.15) を適用することで、電磁場中の荷電粒子に対する Schrödinger 方程式が導かれる。対象とする電子が質量 m_e 、電荷 $-e_0$ の電子とすると、Schrödinger 方程式は

$$\left\{ \frac{1}{2m_e} \hat{\pi}^2 - e_0\phi \right\} \psi(t, \mathbf{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) \quad (2.29)$$

$$\left\{ \frac{1}{2m_e} \hat{\pi}^2 - e_0\phi \right\} \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

となる。ここで、 $\hat{\pi}^2 = \hat{\pi} \cdot \hat{\pi}$ 、 $\hat{\pi} = -i\hbar\nabla + e_0\mathbf{A}$ である。

2.1.3 波動関数の解釈と連続の式

電子の波動関数 $\psi(t, \mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})$ は Schrödinger 方程式の解である。この波動関数 $\psi(t, \mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})$ は統計的に次のように解釈される。時刻 t における電子の位置 \mathbf{r} を測定するとき、点 \mathbf{r} の近傍微小体積 $d\mathbf{r}$ 中に粒子が見つかる確率 $\rho(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r}$ は波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ によって

$$\rho(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} = |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \psi^*(t, \mathbf{r})\psi(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.31)$$

で与えられる。ここで、 $*$ は複素共役を表す。このとき、 $\rho(t, \mathbf{r})$ は確率密度関数という。波動関数が定常状態であるとき、確率密度関数は位置 \mathbf{r} のみに依存する。

式 (2.31) は電子の存在確率を表すため、

$$\int_{\mathbb{R}^3} \rho(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(t, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (2.32)$$

が成り立つ。この式 (2.32) を規格化条件という。

この波動関数の統計的解釈を成立させるために、確率密度の時間変化に関する総和は 0 になる

必要がある。そのため、確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ の時間変化について、以下の方程式が成立する。

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(t, \mathbf{r}) = 0 \quad (2.33)$$

$$\mathbf{j}(t, \mathbf{r}) = -i \frac{\hbar}{2m} \{ \psi^*(t, \mathbf{r}) \nabla \psi(t, \mathbf{r}) - \nabla \psi^*(t, \mathbf{r}) \psi(t, \mathbf{r}) \} \quad (2.34)$$

ここで、* は複素共役を表す。式 (2.34) は粒子の確率流密度といい、存在確率の流れの密度と解釈される。式 (2.33) は連続の式と呼ばれ、時刻 t における位置 \mathbf{r} における確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ の変化量は位置 \mathbf{r} に流入した量と流出した量の差に等しいことを表している。すなわち、波動関数によって表現される電子は考えている系で増減しないことが分かる。

波動関数が統計的に解釈されるため、物理量についても同様に統計的に解釈しなくてはならない。粒子の物理量 Q の期待値 $\langle Q \rangle$ は以下のように計算できる。

$$\langle Q \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \hat{Q} \rho(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(t, \mathbf{r}) \hat{Q} \psi(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.35)$$

ここで、 \hat{Q} は物理量 Q に関する演算子である。このように、量子力学は波動関数 $\psi(t, \mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})$ によって物理量 Q に関する期待値 $\langle Q \rangle$ が予測できる理論である。

2.1.4 スピン

電子は位置 \mathbf{r} 、運動量 \mathbf{p} では表現不可能な内部自由度とそれに伴う角運動量を有する。この内部自由度をスピンといい、スピンによって生じる角運動量をスピン角運動量という。

スピン角運動量はベクトル演算子 $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ で表される。各成分については以下の交換関係を満たす。

$$s_i s_j - s_j s_i = i\hbar \varepsilon_{ijk} s_k \quad (2.36)$$

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & ((i, j, k) = (x, y, z), (y, z, x), (z, x, y)) \\ -1 & ((i, j, k) = (x, z, y), (z, y, x), (y, x, z)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2.37)$$

ここで、 $i, j, k \in \{x, y, z\}$ 、 ε_{ijk} は Levi-Civita 記号である。

電子のスピンの成分を任意の方向で測定した際、その値は $\hbar/2, -\hbar/2$ のいずれかの値をとる。一

一般に, z 成分 s_z の固有値を m_s で表し, これをスピン磁気量子数とよぶ. スピンの角運動量の固有値は $m_s = \hbar/2$ と $m_s = -\hbar/2$ の2つの値のみをとる. スピン変数 σ を用いて, 固有値 $m_s = \hbar/2$ に対応する固有関数を $\alpha(\sigma)$, 固有値 $m_s = -\hbar/2$ に対応する固有関数を $\beta(\sigma)$ と表現し, 両者をスピン関数とよぶ. したがって, 以下の関係が成り立つ.

$$s_z \alpha = \frac{\hbar}{2} \alpha \quad (2.38)$$

$$s_z \beta = -\frac{\hbar}{2} \beta \quad (2.39)$$

s_z の固有値をスピン空間の座標変数とする. すなわち, スピン空間は2個の点しか存在しない空間となる. このスピン座標を変数とするスピン関数は以下の性質をもつ.

$$\alpha\left(\frac{\hbar}{2}\right) = 1, \quad \alpha\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 0, \quad \beta\left(\frac{\hbar}{2}\right) = 0, \quad \beta\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 1 \quad (2.40)$$

スピン関数 α, β は後述する s_z の行列表現により2成分のベクトルで表現することができる.

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

それぞれの状態を上向きスピン, 下向きスピンの状態という. 式(2.41)で与えられる2成分の量をスピノルという. スピンによる角運動量の z 成分 s_z の異なる固有値に対する波動関数 α, β は規格直交関係を満たす.

一般に, スピンの状態を含めた波動関数 $\psi(t, \mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})$ は α, β の線形結合として次のように表示される.

$$\psi(t, \mathbf{r}) = \psi_+(t, \mathbf{r})\alpha + \psi_-(t, \mathbf{r})\beta = \begin{pmatrix} \psi_+(t, \mathbf{r}) \\ \psi_-(t, \mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_+(\mathbf{r})\alpha + \varphi_-(\mathbf{r})\beta = \begin{pmatrix} \varphi_+(\mathbf{r}) \\ \varphi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

式(2.41)を基底とすれば, スピン角運動量演算子 s_z は以下のような行列で表現される.

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

一方, s_x, s_y の行列表現は

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

となる. 各演算子 s_x, s_y, s_z は全てエルミート行列となる. ここで, 以下の行列を定義する.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

式 (2.46) は Pauli 行列と呼ばれ, この行列を用いるとスピンの角運動量演算子は以下のように表現することができる.

$$\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (2.47)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (2.48)$$

2.1.5 Pauli 方程式

Schrödinger 方程式ではスピンについて考慮していない. そこで, スピンと外部電磁場の相互作用を取り入れて定式化された以下のような方程式を Pauli 方程式という.

$$\hat{H}_{\text{Pauli}} \psi(t, \mathbf{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) \quad (2.49)$$

$$\hat{H}_{\text{Pauli}} = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}})^2 - e_0 \phi \quad (2.50)$$

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = (\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y, \hat{\pi}_z) = \hat{\mathbf{p}} + e_0 \mathbf{A} \quad (2.51)$$

Pauli 方程式 (2.49) は磁場 \mathbf{B} の効果を陰に含んでいる. この効果を陽に示すために, 式 (2.50) を変換していくことを考える.

$$\hat{H}_{\text{Pauli}} = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}) - e_0 \phi \quad (2.52)$$

$$= \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 + \frac{1}{2m} i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{\boldsymbol{\pi}} \times \hat{\boldsymbol{\pi}}) - e_0 \phi \quad (2.53)$$

$$= \frac{1}{2m} \hat{\pi}^2 + \frac{e_0 \hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - e_0 \phi \quad (2.54)$$

ここで、式 (2.52) から式 (2.53) への変形は Pauli 行列の性質

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (2.55)$$

$$\sigma_{\xi}\sigma_{\eta} = \delta_{\xi,\eta} + i \sum_{\kappa} \epsilon_{\xi,\eta,\kappa} \sigma_{\kappa} \quad (2.56)$$

を用いた。ここで、 $\xi, \eta, \kappa \in \{x, y, z\}$, $\delta_{\xi,\eta}$ は Kronecker のデルタである。式 (2.54) の第 2 項が磁場 \mathbf{B} とスピンの相互作用を表している。

式 (2.49) の解である波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ は 2 つの波動関数 $\psi_+(t, \mathbf{r}), \psi_-(t, \mathbf{r})$ から構成されるため、式 (2.49) から 2 つの Schrödinger 方程式が得られる。波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ は得られた 2 つの Schrödinger 方程式の解 $\psi_+(t, \mathbf{r}), \psi_-(t, \mathbf{r})$ を式 (2.42) に代入することで求められる。式 (2.49) は相対論的量子力学の基本方程式である Dirac 方程式の非相対論極限によって導かれる [21].

2.2 確率的古典系の表現 (粒子表現)

古典確率系は Newton 力学の枠組みを滑らかでない確率変数を導入することができるように拡張した理論に基づいて表現される系である。この系はマクロな確率的現象を表現することができる。Brown 運動は古典確率系の例である。

2.2.1 Langevin 方程式

Brown 粒子がどのような運動方程式に従うのかを考察する。ここでは、1次元を対象とする。Brown 粒子の運動量を $p(t)$ とする。このとき、Brown 粒子の運動方程式は

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\gamma p(t) + R(t) \quad (2.57)$$

となる。ここで、 $R(t)$ は水分子から受ける揺動力、 $-\gamma p(t)$ は Brown 粒子が受ける摩擦力である。ここでは外力は 0 としておく。水分子の熱運動の時間スケールが Brown 粒子の緩和時間より十分短いと考えると、 $R(t)$ を以下のような白色雑音と仮定する。

$$\langle R(t) \rangle = 0 \quad (2.58)$$

$$\langle R(t)R(t') \rangle = 2\delta(t-t') \quad (2.59)$$

このように、注目している粒子に働く力が制御不可能なランダム力の影響を含むとき、注目している物理量が従う運動方程式を Langevin 方程式という。式 (2.57) は Langevin 方程式の一種であり、線形 Langevin 方程式と呼ばれる。一方で、運動方程式でない確率微分方程式は一般化 Langevin 方程式と呼ばれ、以下のように与えられる。

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \mathbf{b}(t, \mathbf{r}) + \mathbf{W}(t), \quad \langle W_i(t)W_j(t') \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t-t') \quad (2.60)$$

ここで、 $i, j = 1, 2, \dots, N$, $\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ は N 次元空間における粒子の位置ベクトル、 $W_i(t)$ は揺動項 \mathbf{W} の各座標成分、 $\delta(\cdot)$ はデルタ関数である。また、 $\mathbf{b}(t, \mathbf{r}) = (b_1(t, \mathbf{r}), b_2(t, \mathbf{r}), \dots, b_N(t, \mathbf{r}))$ は N 次元空間における速度場、 D は W_i のエネルギーである。

2.2.2 Fokker-Planck 方程式

微視的な運動法則が不確定である場合でも、その自由度を消去した巨視的観測量に対する運動方程式から対象となる物理量の統計的性質を導くことができる。

時刻 t_0 で巨視的状态 \mathbf{x}_0 にあった系が、微視的自由度の影響を受け、後の時刻 $t (> t_0)$ に状態 \mathbf{x} に存在する確率を $\rho(t, \mathbf{x}|t_0, \mathbf{x}_0)$ と表記し、これを条件付き確率という。条件付き確率は規格化条件により

$$\int \rho(t, \mathbf{x}|t_0, \mathbf{x}_0) d\mathbf{x} = 1 \quad (2.61)$$

が成立する。 t' を $t_0 < t' < t$ を満たす任意の時刻として、

$$\rho(t, \mathbf{x}|t_0, \mathbf{x}_0) = \int \rho(t, \mathbf{x}|t', \boldsymbol{\xi}) \rho(t', \boldsymbol{\xi}|t_0, \mathbf{x}_0) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.62)$$

を満たすとき、この確率過程を Markov 過程とよぶ。状態 $\boldsymbol{\xi}$ から単位時間あたりに状態 \mathbf{x} に遷移する確率密度を $T_{\boldsymbol{\xi} \rightarrow \mathbf{x}}$ とおく。この時、微小時間 Δt 秒後に $\boldsymbol{\xi}$ から \mathbf{x} へ遷移する確率密度は、 $T_{\boldsymbol{\xi} \rightarrow \mathbf{x}} \Delta t$ である。一方、同時刻 $\boldsymbol{\xi}$ にとどまる確率密度は $(1 - \Delta t \int T_{\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\xi}} d\mathbf{x}) \delta(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{x})$ であるから、次式が成立する。

$$\rho(t + \Delta t, \mathbf{x}|t_0, \mathbf{x}_0) = \int \left[\left(1 - \Delta t \int T_{\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\xi}} d\mathbf{x} \right) \delta(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{x}) + T_{\boldsymbol{\xi} \rightarrow \mathbf{x}} \Delta t \right] \rho(t, \boldsymbol{\xi}|t_0, \mathbf{x}_0) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.63)$$

式 (2.63) について、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限をとると、

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{x}|t_0, \mathbf{x}_0)}{\partial t} = \int \{ -T_{\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\xi}} \rho(t, \mathbf{x}|t_0, \mathbf{x}_0) + T_{\boldsymbol{\xi} \rightarrow \mathbf{x}} \rho(t, \boldsymbol{\xi}|t_0, \mathbf{x}_0) \} d\boldsymbol{\xi} \quad (2.64)$$

が成立する。式 (2.64) は条件付き確率の時間発展を表現する式であり、式 (2.62) と合わせて Chapman-Kolmogorov 方程式という。

式 (2.64) の両辺を \mathbf{x}_0, t_0 で積分すると、

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \int [-T_{\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\xi}} \rho(t, \mathbf{x}) + T_{\boldsymbol{\xi} \rightarrow \mathbf{x}} \rho(t, \boldsymbol{\xi})] d\boldsymbol{\xi} \quad (2.65)$$

が得られる。ここで、状態間の飛躍を $\mathbf{r} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{x}$ とおいて、式 (2.65) を書き換えると、

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \int \{-T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} \rho(t, \mathbf{x}) + T_{\mathbf{r} + \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{r}} \rho(t, \mathbf{x} + \mathbf{r})\} d\mathbf{r} \quad (2.66)$$

と表現される。式 (2.66) の右辺第 2 項を Taylor 展開し、 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ へ置換すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t, \mathbf{x})}{\partial t} &= \int \left[-\mathbf{r} \nabla (T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} \rho(t, \mathbf{x})) + \frac{\mathbf{r}^2}{2} \nabla^2 (T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} \rho(t, \mathbf{x})) + \dots \right] d\mathbf{r} \\ &= -\nabla \cdot \left[\int \mathbf{r} T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} d\mathbf{r} \rho(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{2} \nabla \left(\int \mathbf{r}^2 T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} d\mathbf{r} \rho(t, \mathbf{x}) \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.67)$$

となる。式 (2.67) は遷移確率の時間発展を表し、Master 方程式と呼ばれる。

一般に式 (2.67) の右辺 $[\cdot]$ 内の展開を有限で打ち切ることができないが、ある条件下の場合では 2 次で打ち切ることが可能である。ここで、 $\int \mathbf{r} T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} d\mathbf{r}$ は速度場 $\mathbf{b}(t, \mathbf{x})$ 、 $\int \mathbf{r}^2 T_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{r}} d\mathbf{r}$ は拡散係数 D となるため、式 (2.60) にある記号を使って

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{x})}{\partial t} = -\nabla \cdot [\mathbf{b}(t, \mathbf{x}) - D \nabla] \rho(t, \mathbf{x}) \quad (2.68)$$

と書くことができる。式 (2.68) を Fokker-Planck 方程式とよび、 $[\dots]$ の微分演算子を Fokker-Planck 演算子という。

第3章

電子の確率的古典粒子モデル

本章では、電子の物理量の時間変化を記述する常微分方程式と確率常微分方程式を導出する。これらの方程式の解は物理量の期待値やサンプル値を与える。本論文の粒子モデルは数理モデルであり、これらの方程式を指す。本研究では、Pauli 方程式の波動関数であるスピノルから粒子モデルを構成する。

3.1 量子系の古典粒子モデル

3.1.1 Heisenberg の運動方程式

時刻 t において、ある物理量 Q が演算子 \hat{Q} で表現されるとする。このとき、物理量 Q の期待値 $\langle Q \rangle$ の時間変化は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle Q \rangle &= \int \left(\frac{\partial \psi^*(t, \mathbf{r})}{\partial t} \hat{Q} \psi(t, \mathbf{r}) + \psi^*(t, \mathbf{r}) \frac{d\hat{Q}}{dt} \psi(t, \mathbf{r}) + \psi^*(t, \mathbf{r}) \hat{Q} \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r})}{\partial t} \right) d\mathbf{r} \\ &= \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int \left\{ \psi^*(t, \mathbf{r}) (\hat{Q} \hat{H} - \hat{H} \hat{Q}) \psi(t, \mathbf{r}) \right\} d\mathbf{r} \\ &= \left\langle \frac{\partial Q}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle QH - HQ \rangle \end{aligned} \quad (3.1)$$

で与えられる。同様の式変形により、演算子を変数とみなした運動方程式は

$$\frac{d}{dt} \hat{Q} = \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{Q} \hat{H} - \hat{H} \hat{Q}) \quad (3.2)$$

となる。式 (3.2) を Heisenberg の運動方程式といい、物理量 Q の期待値に関する時間発展を与えることができる [4, 16].

Heisenberg の運動方程式 (3.2) から得られる位置演算子と運動量演算子についての方程式が Newton の運動方程式と同型となることを示す。いま、質量 m の粒子が力 $\mathbf{F} = -\nabla V(t, \mathbf{r})$ を受けている系について考える。式 (3.2) の \hat{Q} に位置演算子 $\hat{\mathbf{r}}$ を代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{r}} &= \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{\mathbf{r}} \hat{H} - \hat{H} \hat{\mathbf{r}}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\mathbf{r} \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(t, \mathbf{r}) \right\} - \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(t, \mathbf{r}) \right\} \mathbf{r} \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} (\mathbf{r} \hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$= \frac{1}{m} \hat{\mathbf{p}} \quad (3.4)$$

となる。また、式 (3.3) から式 (3.4) への変形には

$$\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{\mathbf{p}}^2\mathbf{r} = 2i\hbar\hat{\mathbf{p}} \quad (3.5)$$

を用いた。同様に、式 (3.2) の \hat{Q} に運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ を代入すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}} &= \frac{\partial\hat{\mathbf{p}}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{p}}\hat{H} - \hat{H}\hat{\mathbf{p}}) \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\mathbf{p}}\left\{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(t, \mathbf{r})\right\} - \left\{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(t, \mathbf{r})\right\}\hat{\mathbf{p}}\right] \\ &= \frac{1}{i\hbar}\{-i\hbar(\nabla V(t, \mathbf{r})) - i\hbar V(t, \mathbf{r})\nabla + i\hbar V(t, \mathbf{r})\nabla\} \\ &= -\nabla V(t, \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.6)$$

となる。式 (3.4) を式 (3.6) に代入すると次の式が得られる。

$$m\frac{d^2\hat{\mathbf{r}}}{dt^2} = -\nabla V(t, \mathbf{r}) \quad (3.7)$$

$d^2\hat{\mathbf{r}}/dt^2$ は加速度にあたる演算子である。よって、式 (3.7) は左辺が質量 m と加速度 $d^2\hat{\mathbf{r}}/dt^2$ の積、右辺は仮定より力 \mathbf{F} となる。したがって、式 (3.7) は Newton の運動方程式と同型である。この方程式は粒子の統計的性質を得ることができる [4, 16]。

3.1.2 Bohm の量子ポテンシャル論

物質波には、トンネル効果や2重スリットの干渉縞などに代表される古典力学では観測されない現象が多く存在する。Bohm はそれらの現象が Schrödinger 方程式に陰に含まれる古典力学には見られないポテンシャルによって生じるという理論を構築した [18, 25, 26]。この理論を Bohm の量子ポテンシャル論という。本節では Schrödinger 方程式から、古典力学では見られない新たなポテンシャル (量子ポテンシャルという) を含んだ運動方程式を導出する。

波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ を次のように表す。

$$\psi(t, \mathbf{r}) = R(t, \mathbf{r}) \exp\left\{i\frac{S(t, \mathbf{r})}{\hbar}\right\} \quad (3.8)$$

ここで、 $R(t, \mathbf{r}), S(t, \mathbf{r})$ は実関数である。波動関数 (3.8) を Schrödinger 方程式に代入すると

$$\frac{\partial S(t, \mathbf{r})}{\partial t} + \frac{(\nabla S(t, \mathbf{r}))^2}{2m} + V(t, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(t, \mathbf{r})}{R(t, \mathbf{r})} = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial (R(t, \mathbf{r}))^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left((R(t, \mathbf{r}))^2 \cdot \frac{\nabla S(t, \mathbf{r})}{m} \right) = 0 \quad (3.10)$$

となる。一方で、波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ について式 (2.14) と式 (3.8) を比較すると次の2つの式が成立する。

$$E = -\frac{\partial}{\partial t} S(t, \mathbf{r}) \quad (3.11)$$

$$\mathbf{p} = \nabla S(t, \mathbf{r}) \quad (3.12)$$

式 (3.11) と式 (3.12) を式 (3.9) に代入すると次の式が得られる。

$$E = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} + V(t, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\nabla^2 R(t, \mathbf{r})}{R(t, \mathbf{r})} \quad (3.13)$$

式 (3.13) の第1, 2項はそれぞれ運動エネルギーとポテンシャルであり、古典力学でみられたエネルギーである。一方、第3項は古典力学系にはないエネルギーの項である。この項を量子ポテンシャルという。また、式 (2.31) に式 (3.8) を代入すると、

$$\rho(t, \mathbf{r}) = |\psi(t, \mathbf{r})|^2 = \{R(t, \mathbf{r})\}^2 \quad (3.14)$$

となる。式 (3.12) と式 (3.14) を式 (3.10) に代入すると次式が得られる。

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} + \nabla \cdot \{ \rho(t, \mathbf{r}) \mathbf{v}(t, \mathbf{r}) \} = 0 \quad (3.15)$$

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (3.16)$$

よって、式 (3.10) は連続の式と解釈することができる。

さらに、運動量 \mathbf{p} の時間微分を式 (3.12) に代入すると、

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{p} = \frac{\partial (\nabla S)}{\partial t} + \frac{\nabla (\nabla S)^2}{2m} \quad (3.17)$$

となる．式 (3.17) と式 (3.9) から S を消去すると，

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla \left(V - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \right) \quad (3.18)$$

を得る．式 (3.18) と Newton の運動方程式を比較すると，ポテンシャルに新しく $-(\hbar^2/2m)(\nabla^2 R/R)$ が加わっている．電子の軌跡は式 (3.12) または (3.18) を解くことにより計算することができる．

3.1.3 Nelson の確率過程量子化

電子は不確定性原理によって電子の位置と運動量を同時に決定することができない．そのため，電子の位置には一定の揺らぎが生じる．Nelson の確率過程量子化は，その揺らぎを含んだ電子の運動を確率過程とみなして，電子の軌道サンプルを計算する方法である [19, 25, 26]．

Nelson による確率過程量子化では，位置の確率変数 \mathbf{r} が以下に示す一般化 Langevin 方程式によって記述される．

$$d\mathbf{r} = \mathbf{b}(t, \mathbf{r}) \cdot dt + \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} d\mathbf{\Gamma}(t) \quad (3.19)$$

ここで，右辺第 1 項は速度場 $\mathbf{b}(t, \mathbf{r})$ による電子の運動を表している．この速度場 $\mathbf{b}(t, \mathbf{r})$ は次式のように計算される．

$$\mathbf{b}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) + \mathbf{v}(t, \mathbf{r}) \quad (3.20)$$

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \ln R(t, \mathbf{r}) \quad (3.21)$$

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{r}) = \frac{\nabla S(t, \mathbf{r})}{m} \quad (3.22)$$

一方，右辺第 2 項は拡散係数 $\sqrt{\hbar/2m}$ の不確定性原理を満たすものであり， $\hbar \rightarrow 0$ の極限で消失する．また， $\mathbf{\Gamma}$ は以下の統計的性質を満たす Wiener 過程である．

$$\langle d\Gamma_i(t) \rangle = 0 \quad (3.23)$$

$$\langle d\Gamma_i(t) d\Gamma_j(t) \rangle = 2\delta_{i,j} dt \quad (3.24)$$

ただし， $i, j \in \{x, y, z\}$ ．以上より，一般化 Langevin 方程式 (3.19) を解くことで電子の軌跡サンプルを算出できる．

Nelson によって提案された粒子モデルは一般化 Langevin 方程式 (3.19) によって表される。したがって、式 (3.19) の解として得られる電子の軌道サンプルに関する確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ は Fokker-Planck 方程式を満たす。

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[\mathbf{b}(t, \mathbf{r}) - \frac{D}{2} \nabla \right] \rho(t, \mathbf{r}) \quad (3.25)$$

$$D = \frac{\hbar}{m} \quad (3.26)$$

一方で、確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ は Schrödinger 方程式の解である波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ から計算できる。この確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ も Fokker-Planck 方程式の解となる。したがって、一般化 Langevin 方程式は電子の確率的古典粒子モデルとなる。

ここで、Nelson のモデルが Schrödinger 方程式と等価であることを示す。確率微分方程式の解は滑らかではないため、前方差分だけでなく、後方差分についても考慮しなければならない。前方微分によって得られる Fokker-Planck 方程式は式 (3.25) で与えられる。一方、後方微分によって得られる Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[\mathbf{b}_*(t, \mathbf{r}) + \frac{D}{2} \nabla \right] \rho(t, \mathbf{r}) \quad (3.27)$$

で与えられる。ここで、式 (3.25) と式 (3.27) の速度場 \mathbf{b}, \mathbf{b}_* はそれぞれ平均前方微分と平均後方微分によって与えられる。

$$\mathbf{b}(t, \mathbf{r}) = D\mathbf{r}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\langle \frac{\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t)}{\Delta t} \right\rangle \quad (3.28)$$

$$\mathbf{b}_*(t, \mathbf{r}) = D_*\mathbf{r}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\langle \frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \Delta t)}{\Delta t} \right\rangle \quad (3.29)$$

式 (3.25) と (3.27) から和と差を求めると

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{1}{2} \nabla \cdot (\mathbf{b} + \mathbf{b}_*) \rho = 0 \quad (3.30)$$

$$\frac{1}{2} (\mathbf{b} - \mathbf{b}_*) \rho = \frac{\hbar}{2m} \nabla \rho \quad (3.31)$$

となる。また、確率的古典粒子の運動は次式に示す運動方程式から決定される。

$$m\mathbf{a} = -\nabla \cdot V \quad (3.32)$$

$$\mathbf{a} = \frac{1}{2}(DD_* + D_*D)\mathbf{r} \quad (3.33)$$

この式は Newton-Nelson の運動方程式と呼ばれている。ここで、各速度場 \mathbf{b}, \mathbf{b}_* の時間微分を次式で近似する。

$$\hat{D}_* \hat{D}\mathbf{r} = \hat{D}_*\mathbf{b} \approx \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} + \mathbf{b}_* \cdot \nabla \mathbf{b} - \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \mathbf{b} \quad (3.34)$$

$$\hat{D} \hat{D}_*\mathbf{r} = \hat{D}\mathbf{b}_* \approx \frac{\partial \mathbf{b}_*}{\partial t} + \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b}_* + \frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \mathbf{b}_* \quad (3.35)$$

式 (3.32) に式 (3.34), (3.35) を代入すると、

$$m \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2}(\mathbf{b} + \mathbf{b}_*) + \frac{1}{2}(\mathbf{b} \nabla \cdot \mathbf{b}_* + \mathbf{b}_* \nabla \cdot \mathbf{b}) - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{2m} \nabla(\nabla \cdot (\mathbf{b} - \mathbf{b}_*)) \right\} = -\nabla V \quad (3.36)$$

が得られる。ここで、各速度場の和と差をそれぞれ

$$\mathbf{u} = \frac{1}{2}(\mathbf{b} - \mathbf{b}_*) \quad (3.37)$$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{2}(\mathbf{b} + \mathbf{b}_*) \quad (3.38)$$

とする。式 (3.37), (3.38) を式 (3.30), (3.31), (3.36) に代入し、波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ に式 (3.8) の変換を適用することで式 (2.20) を導くことができる。

3.2 確率密度関数と確率流密度を用いた粒子モデル構成法の提案

本節では、本論文における量子系のモデル化方法を説明する。

確率的古典粒子の確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ の時間発展は Fokker-Planck 方程式 (3.25) で表現される。この式を展開すると次のように書き換えることができる。

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -\nabla(\mathbf{b}(t, \mathbf{r})\rho(t, \mathbf{r})) + D\nabla^2(\rho(t, \mathbf{r})) \quad (3.39)$$

(3.39) 式を変形することで連続の式を得ることができる。このとき、確率流密度は

$$\mathbf{j}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{b}(t, \mathbf{r})\rho(t, \mathbf{r}) - D\nabla\rho(t, \mathbf{r}) \quad (3.40)$$

となる。

速度場 $\mathbf{b}(t, \mathbf{r})$ を量子力学系の確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ と確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ によって表現できれば、 $D = \hbar/m$ を用いて量子に関する古典粒子モデルを構築することができる。非相対論的量子力学系の方程式は Schrödinger 方程式と Pauli 方程式が代表的なものである。それらから導かれる確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ や確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ を用いて得られる速度場 $\mathbf{b}(t, \mathbf{r})$ は式 (3.40) より以下のようになる [24]。

$$\mathbf{b}(t, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} \frac{\nabla\rho(t, \mathbf{r})}{\rho(t, \mathbf{r})} + \frac{\mathbf{j}(t, \mathbf{r})}{\rho(t, \mathbf{r})} \quad (3.41)$$

式 (3.41) で得られた速度場を式 (3.19) に代入し、数値積分を行うことで量子の軌跡サンプルを得ることができる。

3.3 粒子モデルの発展

本節では、3.1, 3.2 節で述べた電子の古典粒子モデルの関係を示し、モデルの進展を説明する。

量子力学では、電子の確率的な振る舞いを取り扱う。つまり、量子力学で記述されるのは物理量に関する期待値の振る舞いである。Heisenberg の運動方程式 (3.2) は、物理量に関する演算子を変数とみなした微分方程式である。電子の運動量 \mathbf{p} について、Heisenberg の運動方程式 (3.2) と式 (2.35) を適用すると、

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = - \langle \nabla V(t, \mathbf{r}) \rangle \quad (3.42)$$

が得られる。式 (3.42) は Ehrenfest の定理とよばれ、量子力学から得られる電子の運動についての期待値が Newton の運動方程式と同等になることを表している。このように、Heisenberg の運動方程式は量子力学から算出される電子の物理量の期待値が古典力学系で記述される支配方程式と同等になることを示している。しかしながら、期待値であるゆえ、それはトンネル効果や電子回折などの量子現象を必ずしも説明できるものではない。

Bohm は量子現象を説明するために量子ポテンシャル論を構築した。この理論では、式 (3.12) を位置 \mathbf{r} についての微分方程式に書き直した

$$d\mathbf{r} = \frac{\nabla S(t, \mathbf{r})}{m} dt \quad (3.43)$$

によって電子の運動が算出される。このとき、計算の対象となる系の全エネルギーは式 (3.13) である。したがって、電子の運動を決定づける運動方程式は式 (3.18) となる。式 (3.18) によれば、電子の運動は外力 \mathbf{F} によって生じるポテンシャル $V(t, \mathbf{r})$ と波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ の振幅成分 $R(t, \mathbf{r})$ から与えられる量子ポテンシャルによって支配されていると解釈できる。しかし、この Newton 力学モデルは Schrödinger 方程式と等価でない。そのため、Bohm の量子ポテンシャル論によるモデルは量子現象を説明できるが、式 (3.18), 式 (3.43) は確率微分方程式ではないため、軌道は初期値のみによって確定し決定論的であり、確率的 (統計的) ではない。

Nelson は電子の運動を一般化 Langevin 方程式 (3.19) で表現する確率過程量子化法を提案した。Nelson の確率過程量子化法では、量子ポテンシャル論と同様に、波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ は式 (3.8) のよ

うに振幅と位相に分けられ、電子の位置 \mathbf{r} は次式によって算出される。

$$d\mathbf{r} = \left[\frac{\nabla S(t, \mathbf{r})}{m} + \frac{\hbar \nabla \ln R(t, \mathbf{r})}{m} \right] dt + \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} d\mathbf{\Gamma} \quad (3.44)$$

この式(3.44)はBohmの量子ポテンシャル論を拡張したものと見ることができ、右辺第1項は量子ポテンシャルによって生成される速度場を表している。また、第2項は確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r}) = |R(t, \mathbf{r})|^2$ が大きくなる場所へ電子を向かわせる項を表している。さらに、第3項は電子のエネルギーが微小時間内において一定値をとらない現象(量子的揺らぎ)をWiener過程によって表現した項である。このモデルは理論的にSchrödinger方程式と等価であることが3.1.3, より詳しくは[19]に示されている。ここで、算出される結果は実在が証明されていない仮想的な軌道サンプルであることに注意が必要である。Nelsonの理論はスピンを持ち、それが電子の運動に影響を与える量子系をモデル化できない。そのほかにも、Nelsonは自身の理論についての問題点をいくつか示している[20]。

これまでに述べたモデルはすべて量子力学の支配方程式に基づいて構築、提案されている。それに対して、本論文で提案している粒子モデルは確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ の時間発展を表すFokker-Planck方程式(2.68)に基づいている。Fokker-Planck方程式を満たす電子の軌道サンプルは一般化Langevin方程式によって計算できる。すなわち、確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ がFokker-Planck方程式を満たす系のサンプルは一般化Langevin方程式によって算出可能である。このとき、サンプルを計算するための一般化Langevin方程式は

$$d\mathbf{r} = \left\{ \frac{\mathbf{j}(t, \mathbf{r})}{\rho(t, \mathbf{r})} + \frac{\hbar}{2m} \frac{\nabla \rho(t, \mathbf{r})}{\rho(t, \mathbf{r})} \right\} dt + \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} d\mathbf{\Gamma} \quad (3.45)$$

となる。ここで、 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ は確率流密度である。式(3.45)に式(3.8)を代入するとNelsonの確率過程量子化で提案された式(3.44)が得られる。すなわち、提案モデルはNelsonの確率過程量子化を包含したモデルといえる。式(3.45)より、波動関数 $\psi(t, \mathbf{r})$ から確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ と確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ を計算できれば電子の軌道サンプルを算出することができる。したがって、スピンを含んだ電子であっても非相対論的運動であれば軌道サンプルを算出することが可能である。

第4章

外部電場が印加された多重量子井戸の 解析

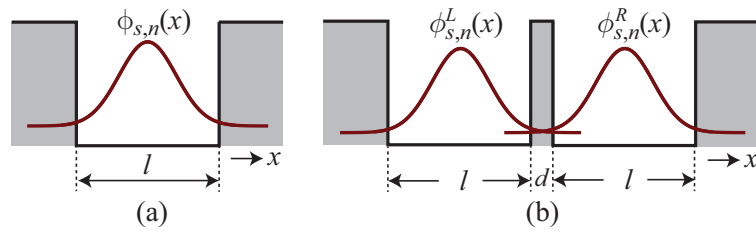


図 4.1: 1次元井戸と波動関数

2種類の異なった半導体の接合をヘテロ接合という。このヘテロ接合で形成されるバンド構造のうち、エネルギーの低い方をその形から井戸層、もう一方を障壁層という。ヘテロ接合において、井戸層内部の電子のエネルギー状態が離散的な状態になった時、この井戸構造を量子井戸構造という。量子井戸構造は電子を空間的に閉じ込めることができる。この量子井戸を近接して配置した多重量子井戸はレーザーなどに応用されている。

本章では、外部電場が印加された多重量子井戸の電子の振る舞いを古典粒子モデルを用いて解析する。

4.1 多重量子井戸内電子の波動表現

本節では、はじめに多重量子井戸内の電子の定常状態を時間に依存しない Schrödinger 方程式の波動関数として求め、次に、外部電場が印加された場合の電子状態としての波動関数を時間に依存する摂動法により求める。

4.1.1 多重量子井戸内電子の定常状態

あるポテンシャル $V(t, x)$ を持つ 1次元量子系を次の Schrödinger 方程式により記述する。

$$H\psi(t, x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) \quad (4.1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(t, x) \quad (4.2)$$

単一量子井戸は、図 4.1(a) に示す有限井戸型ポテンシャルであり、次式により表す。

$$V_s(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \frac{l}{2} \\ V_0 & |x| > \frac{l}{2} \end{cases} \quad (4.3)$$

ここで、式 (4.3) を式 (4.2) の $V(t, x)$ に代入して得られるハミルトニアンを H_s と表記する。 H_s の固有関数を $\varphi_{s,n}(x)$, $n = 1, 2, \dots$ とし、下式のように正規化されているものとする。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{s,n}^*(x) \varphi_{s,n}(x) dx = 1 \quad (4.4)$$

固有エネルギー $E_{s,n}$ は H_s と $\varphi_{s,n}(x)$ を用いて次式により計算される。

$$E_{s,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{s,n}^*(x) H_s \varphi_{s,n}(x) dx \quad (4.5)$$

有限井戸型ポテンシャル系は解析的に解くことができる [4, 16, 17].

次に、図 4.1(b) の様な 2 重量子井戸ポテンシャルについて考える。このポテンシャルは以下のように与えられる。

$$V_w(x) = \begin{cases} 0 & (\frac{d}{2} < |x| < \frac{d}{2} + l) \\ V_0 & (|x| \leq \frac{d}{2}, \frac{d}{2} + l \leq |x|) \end{cases} \quad (4.6)$$

ここで、式 (4.6) を式 (4.2) の $V(t, x)$ に $V_w(x)$ を代入して得られるハミルトニアンを H_w と表記する。また、ハミルトニアン H_w に関する時間に依存しない n 番目の固有関数とその固有エネルギーを $\varphi_{w,n}(x), E_{w,n}$ とする。すなわち、次式が成り立つものとする。

$$E_{w,n} \varphi_{w,n}(x) = H_w \varphi_{w,n}(x) \quad (4.7)$$

ここではタイトバインディング法によって固有関数 $\varphi_{w,n}(x)$ と固有エネルギー $E_{w,n}$ を計算する [4, 16, 27]. はじめに、エネルギー準位 n の状態にある電子が一方の井戸内に存在するときの波動関数を単一井戸系の固有関数を用いて次のように近似できると仮定する。

$$\varphi_{s,n}^L(x) = \varphi_{s,n}\left(x + \frac{d+l}{2}\right), \quad \varphi_{s,n}^R(x) = \varphi_{s,n}\left(x - \frac{d+l}{2}\right) \quad (4.8)$$

2 重量子井戸の波動関数は $\varphi_{s,n}^{L/R}(x)$ の線形結合で与えられるものとする。

$$\varphi_{w,n}(x) = A \varphi_{s,n}^L(x) + B \varphi_{s,n}^R(x) \quad (4.9)$$

式 (4.7) に $\varphi_{s,n}^{L/R}(x)$ を乗じた後に, x について積分すると

$$E_{w,n} \begin{pmatrix} 1 & \delta \\ \delta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} E_{s,n} & \varepsilon \\ \varepsilon & E_{s,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

が得られる. ここで, ε と δ は

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{s,n}^{R/L*}(x) H_w \varphi_{s,n}^{L/R}(x) dx, \quad \delta = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{s,n}^{R/L*}(x) \varphi_{s,n}^{L/R}(x) dx \quad (4.11)$$

とした. 次に, 以下に示すような近似を利用した.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{s,n}^{L/R*}(x) H_w \varphi_{s,n}^{L/R}(x) dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{s,n}^*(x) H_{s,n} \varphi_{s,n}(x) dx = E_{s,n} \quad (4.12)$$

式 (4.10) の固有エネルギー $E_{w,n}$ を求めると

$$E_{w,n}^e = \frac{E_{s,n} - \varepsilon\delta}{1 - \delta^2} + \frac{\varepsilon - \delta E_{s,n}}{1 - \delta^2} = E_{w,n}^{(0)} + E_{w,n}^{(1)} \quad (4.13)$$

$$E_{w,n}^o = \frac{E_{s,n} - \varepsilon\delta}{1 - \delta^2} - \frac{\varepsilon - \delta E_{s,n}}{1 - \delta^2} = E_{w,n}^{(0)} - E_{w,n}^{(1)} \quad (4.14)$$

が得られる. ここで, $\varepsilon \ll E_{s,n}, \delta \ll 1$ となるため ε と δ に関する 2 次以上の項を無視すると, それらは次式となる.

$$E_{w,n}^{(0)} = E_{s,n}, \quad E_{w,n}^{(1)} = \varepsilon - \delta E_{s,n} \quad (4.15)$$

また, 式 (4.10) の単位固有ベクトルは以下のように計算される.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

得られた $E_{w,n}^e, E_{w,n}^o, A, B$ を用いて, 時間に依存した固有関数を表現することができる.

$$\varphi_{w,n}^e(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{s,n}^L(x) + \varphi_{s,n}^R(x)) \exp\left(-i \frac{E_{w,n}^e}{\hbar} t\right) \quad (4.17)$$

$$\varphi_{w,n}^o(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{s,n}^L(x) - \varphi_{s,n}^R(x)) \exp\left(-i \frac{E_{w,n}^o}{\hbar} t\right) \quad (4.18)$$

式 (4.13), (4.14), (4.17), (4.18) に含まれる e, o はそれぞれ偶パリティ, 奇パリティを表す. こ

のとき、 $\delta \neq 0$ より、 $\varphi_{w,n}^{e/o}$ は正規化されていない事に注意が必要である。

次に、多重量子井戸内の波動の振る舞いを考える。左(右)に局在する初期状態にとる波動関数、すなわち、

$$\varphi_{w,n}^L(0, x) = \varphi_{s,n}^L(x), \quad \varphi_{w,n}^R(0, x) = \varphi_{s,n}^R(x) \quad (4.19)$$

である波動関数 $\varphi_{w,n}^L(t, x), \varphi_{w,n}^R(t, x)$ は以下の式によって与えられる。

$$\varphi_{w,n}^L(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{w,n}^e(t, x) + \varphi_{w,n}^o(t, x)) \quad (4.20)$$

$$\varphi_{w,n}^R(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{w,n}^e(t, x) - \varphi_{w,n}^o(t, x)) \quad (4.21)$$

式 (4.13), (4.14) を式 (4.17), (4.18) に代入して、Euler の公式を適用すると次の式が得られる。

$$\varphi_{w,n}^L(t, x) = \left\{ \cos\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar}t\right)\varphi_{s,n}^L(x) - i \sin\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar}t\right)\varphi_{s,n}^R(x) \right\} \exp\left(-i\frac{E_{w,n}^{(0)}}{\hbar}t\right) \quad (4.22)$$

$$\varphi_{w,n}^R(t, x) = \left\{ \cos\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar}t\right)\varphi_{s,n}^R(x) - i \sin\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar}t\right)\varphi_{s,n}^L(x) \right\} \exp\left(-i\frac{E_{w,n}^{(0)}}{\hbar}t\right) \quad (4.23)$$

式 (4.22), (4.23) は波動 $\varphi_{w,n}^L(t, x), \varphi_{w,n}^R(t, x)$ が偶奇パリティをもつ波動関数の干渉により周期的に井戸間を遷移することを表している。

4.1.2 外部電場による電子の非自律状態

交流電場 $E(t; \omega_r, \lambda) = \lambda \cos(\omega_r t)$ が量子井戸に印加されたときの波動関数 $\psi(t, x)$ を求める [4, 16, 27]. 電場が x 方向に加わるとき、 e を負の素電荷として電子は逆方向の力 $e \cdot E(t; \omega_r, \lambda)$ が加わる。言い換えると、電子は以下のようなポテンシャルの影響を受ける。

$$\hat{H}'(t, x; \omega_r, \lambda) = e x \lambda \cos(\omega_r t) \quad (4.24)$$

次に、式 (4.1) のハミルトニアンを $H + \hat{H}'$ で置換した

$$\left\{ H + \hat{H}'(t, x; \omega_r, \lambda) \right\} \psi(t, x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) \quad (4.25)$$

について摂動論によって解を求める． λ の 1 次まで展開した摂動波動関数を次のように仮定する．

$$\begin{aligned}\psi_n(t, x) &= \sum_{m \in \{e, o\}} c_m(t) \varphi_n^{(m)}(x) \exp\left(-i \frac{E_n^{(m)}}{\hbar} t\right) \\ &= \sum_{m \in \{e, o\}} \left\{ c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} \right\} \varphi_n^{(m)} \exp\left(-i \frac{E_n^{(m)}}{\hbar} t\right)\end{aligned}\quad (4.26)$$

初期条件として $c_e(t=0) = 1, c_o(t=0) = 0$ を与えた時， λ の 0 次の係数は初期条件から決まる定数であるため，

$$c_m^{(0)}(t) = c_m(t=0) \quad (4.27)$$

となる．また， λ について 1 次の係数は次のように与えられる．

$$c_e^{(1)}(t) = -i I_{ee} \sin(\omega_r t) \quad (4.28)$$

$$c_o^{(1)}(t) = -\frac{I_{oe}}{2\hbar(\omega_{oe} + \omega_r)} e^{i(\omega_{oe} + \omega_r)t} - \frac{I_{oe}}{2\hbar(\omega_{oe} - \omega_r)} e^{i(\omega_{oe} - \omega_r)t} + \frac{I_{oe}}{2\hbar} \frac{2\omega_{oe}}{\omega_{oe}^2 - \omega_r^2} \quad (4.29)$$

ここで， I_{pq} と ω_{pq} ， $p, q \in \{e, o\}$ はそれぞれ以下のように計算される．

$$I_{pq} = eE_0 \int \varphi_n^{(p)}(x) x \varphi_n^{(q)}(x) dx \quad (4.30)$$

$$\omega_{pq} = \frac{E_n^{(p)} - E_n^{(q)}}{\hbar} \quad (4.31)$$

式 (4.27)，(4.28)，(4.29) を式 (4.26) に代入することによって，外部電場が量子井戸に印加されたときの電子の波動関数を近似できる．

4.2 軌道サンプルの決定論的振る舞いの解析

本節では、古典粒子モデルによって得られる電子の軌道サンプルの決定論的な振る舞いを解析し、古典粒子モデルの性質を明らかにする。モデルの性質を知ることはモデルを包含する系のシミュレーション結果の妥当性を判断する上で非常に重要なことである。

4.2.1 電子の粒子表現

式 (4.26) で求めた波動関数 $\psi_n(t, x)$ はスピンを考慮していないため、ここでは Nelson の確率過程量子化法を用いる。はじめに、波動関数 $\psi_n(t, x)$ を式 (3.8) のように変換する。変換した波動関数 $\psi_n(t, x)$ の振幅成分 $R(t, x)$ と位相成分 $S(t, x)$ を式 (3.20) に代入することで電子の軌道サンプルを計算するために必要な速度場 $b(t, x)$ を算出できる。

ここでは、粒子モデルによる決定論的な振る舞いを考察する。そのため、量子雑音である式 (3.19) の第 3 項 $d\Gamma$ を取り除いた以下の式

$$dx = b(t, x) dt \quad (4.32)$$

を解析の対象とする。

4.2.2 Poincaré 写像

式 (4.32) の数値積分により得られる決定論的な電子軌道サンプルの振る舞いを Poincaré 写像を用いて解析する [28]。

式 (4.29) には高周波数 $\omega_{oe} + \omega_r$ の成分と低周波数 $\omega_{oe} - \omega_r$ の成分が含まれている。ここで、以下のような位相 θ_p を定義する。

$$\theta_p = (\omega_{oe} + \omega_r) \times T_p \pmod{2\pi} \quad (4.33)$$

$$T_p = \frac{2\pi}{\omega_{oe} - \omega_r} \times p \quad (4.34)$$

ここで、 $p \in \mathbb{Z}$ 。式 (4.33) は低周波成分の位相 $(\omega_{oe} - \omega_r)t$ が $2\pi p$ ときの高周波成分の位相であ

る。電子の位置 x_p は式 (4.32) を積分して

$$x_p = x_0 + \int_{t_0}^{T_p} b(t, x_0) dt \quad (4.35)$$

によって計算できる。ここで、 x_0 は電子の初期位置である。

式 (4.33), (4.35) を用いて、次のような写像 P を定義する。

$$\mathbf{x}_{p+1} = P(\mathbf{x}_p) \quad (4.36)$$

$$\mathbf{x}_p = (x_p, \theta_p) \quad (4.37)$$

式 (4.36) の写像を Poincaré 写像とよぶ。Poincaré 写像は微分方程式の解軌道の周期性等定常性、非定常性を調べるために用いられる。

4.3 数値実験

本節では、交流電場が印加された2重量子井戸内の電子について、エネルギー期待値 $\langle E \rangle$ 、速度場 $b(t, x)$ 、軌道サンプルを数値実験により求める。また、軌道サンプルから位相分布 x_p と Poincaré 写像 $P(x_p)$ を算出し、その結果から電子軌道サンプルの決定論的振る舞いが有する定性的性質について考察する。

実験パラメータとして、量子井戸に対するパラメータと外部電場に対するパラメータを考える。量子井戸については $V_0 = 10.0$, $l = 0.8$, $d = 0.05$ に設定した。一方、外部電場については $\omega_r = C_\omega \omega_{oe}$, $\lambda = 0.05$ に設定した。 C_ω は後に定める係数である。

4.3.1 電子の軌道サンプルから得られる井戸間遷移現象

図 4.2 は式 (4.26) から得られた波動関数を式 (2.35) に代入して算出されるエネルギー期待値 $\langle E \rangle$ を示す。図中の一点鎖線はそれぞれ式 (4.13) と式 (4.14) から算出される固有エネルギー $E_{w,n}^e, E_{w,n}^o$ を表している。また、図 4.3 は式 (4.26) から計算される速度場 $b(t, x)$ の時空間分布を示す。次に、速度場 $b(t, x)$ を式 (4.32) に代入し数値積分で算出した電子の軌道サンプルを図 4.4 に示す。各図について、(a) は $C_\omega = 0.4\sqrt{5}$, (b) は $C_\omega = 0.3\pi$, (c) は $C_\omega = 0.7\sqrt{2}$ のときの結果をそれぞれ示している。

図 4.2 より、電子が式 (4.13) と式 (4.14) のエネルギー状態間を遷移していることがわかる。このようなエネルギー期待値の時間変化を Rabi 振動という。

図 4.3 から、速度場は低周波数と高周波数の変動が重なり合って変化していることが分かる。これは波動関数が式 (4.29) にある $\omega_{oe} \pm \omega_r$ の成分を有しているためと考えられる。また、図 4.4 から電子がいずれかの固有状態にあるときには量子井戸に定在し、重ね合わせ状態にあるときには障壁をトンネリングしていることが確認できる。電子の軌道サンプルは式 (4.32) から算出されるため、速度場が 0 のときにサンプルはその場にとどまろうとする。そのため、電子が固有状態のときは速度場の正負の入れ替わりが $(-0.5 < x < 0.5)$ 付近で頻発することはなく、重ね合わせ状態のときは頻発する。

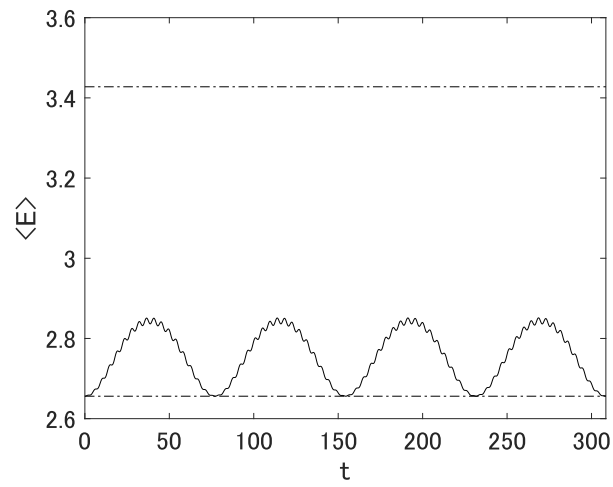
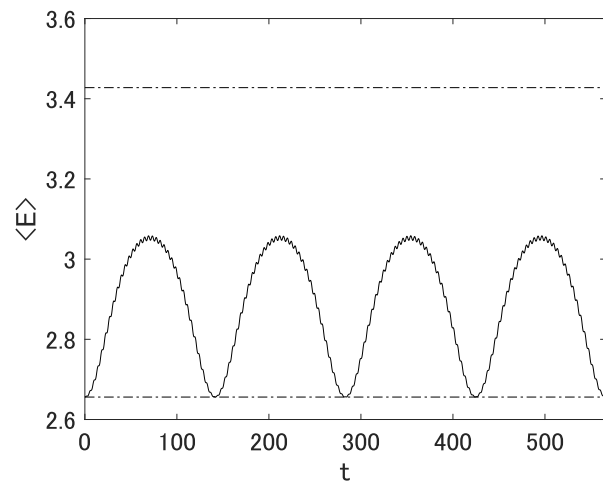
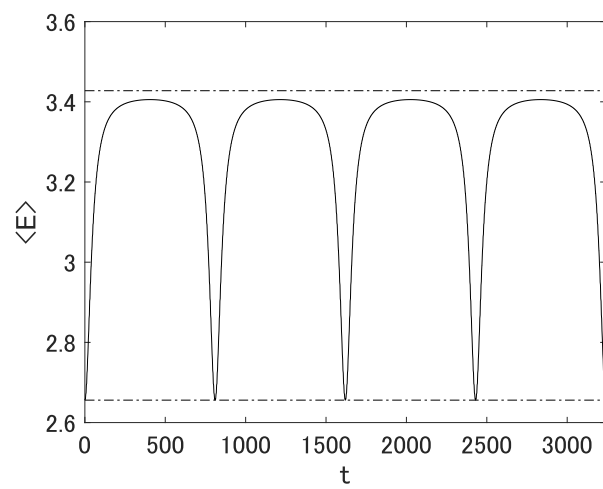
(a) $C_\omega = 0.4\sqrt{5}$ (b) $C_\omega = 0.3\pi$ (c) $C_\omega = 0.7\sqrt{7}$

図 4.2: 外部電場が印加された多重量子井戸系における電子のエネルギー期待値

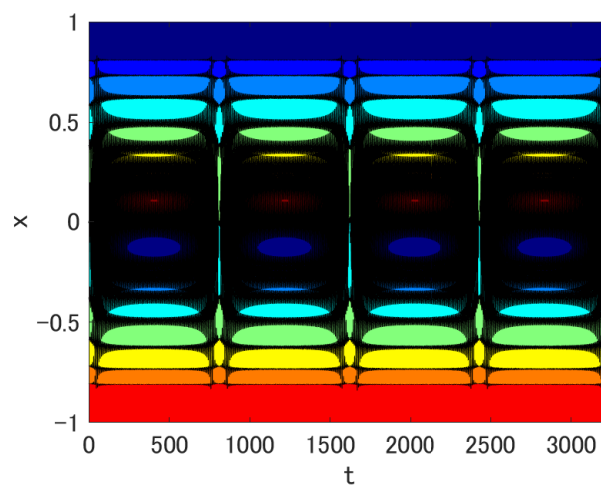
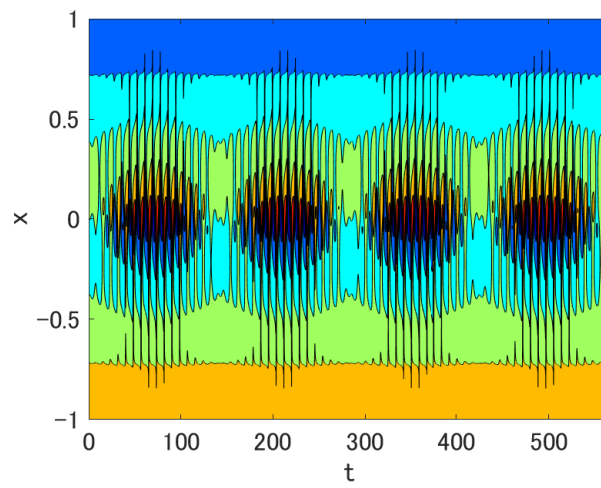
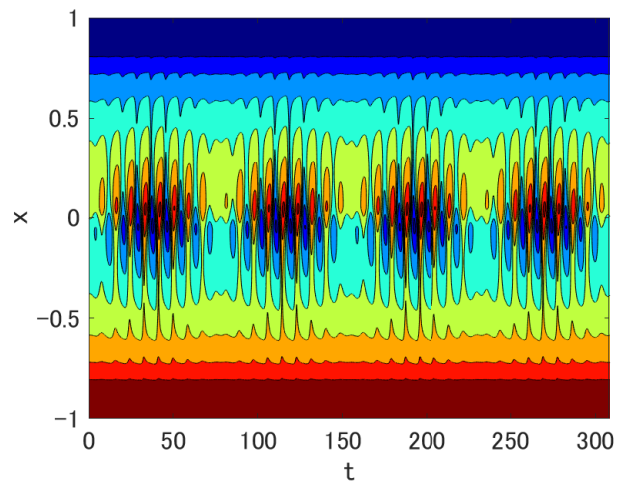


図 4.3: 外部電場が印加された多重量子井戸系における速度場

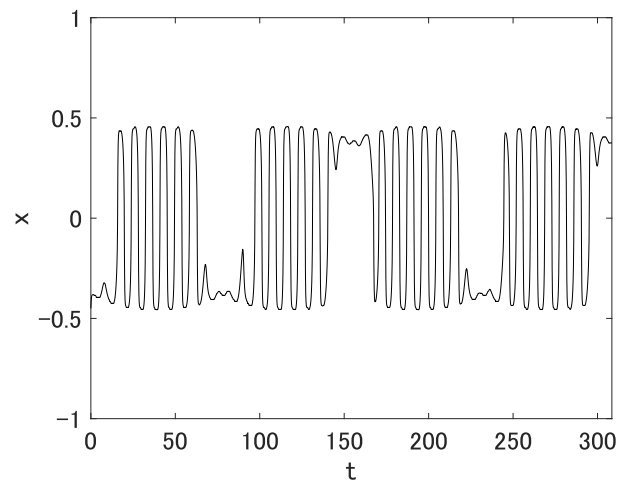
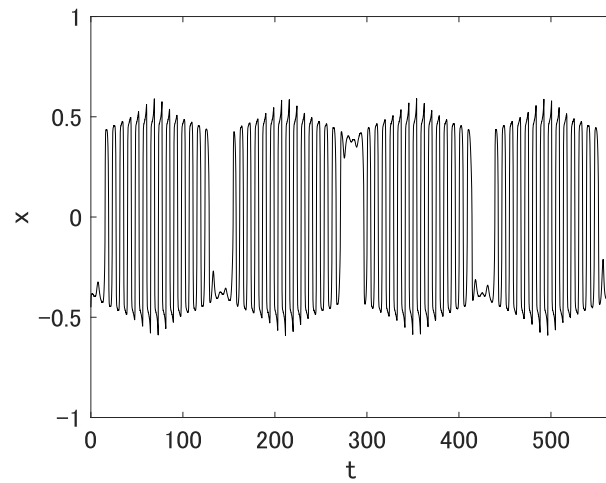
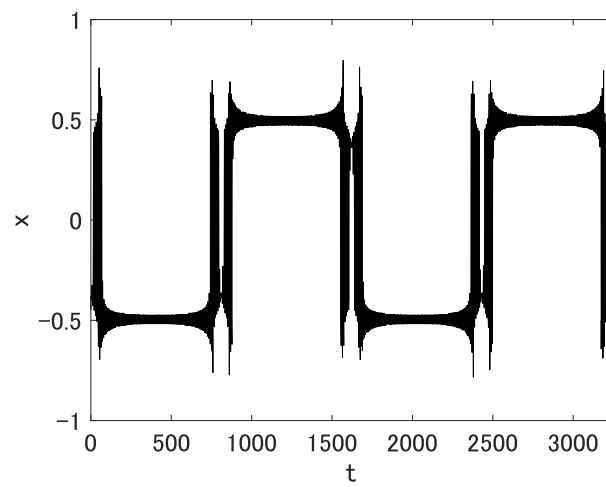
(a) $C_\omega = 0.4\sqrt{5}$ (b) $C_\omega = 0.3\pi$ (c) $C_\omega = 0.7\sqrt{7}$

図 4.4: 外部電場が印加された多重量子井戸系における電子軌道サンプル

4.3.2 粒子モデルによる電子の決定論的成分解析

4.3.1で計算した軌道サンプルから電子の決定論的な振る舞いについて考察する. 図4.5は (θ_p, x_p) の散布図を $p = 1, \dots, 20000$ までプロットした結果を示している. 結果から, 角周波数比 C_ω によらず散布図は不変曲線を描くことが分かる.

図4.6には, 式(4.36)によって計算される電子の軌道サンプルのPoincaré写像を示している. 結果より, 電子の軌道サンプルが空間的な連続性を有することが確認できる. また, 描かれるアトラクターが外部電場によって変化することが分かる. アトラクターが閉曲線を描いていることから, 電子の軌道サンプルの決定論的成分は準周期運動すると考えられる.

以上に述べたように, 粒子モデルによって量子系を波動表現やHeisenbergの運動方程式からは得られない新しい角度で考察することができる. 得られた結果の意味をどのようにとらえていくかは今後の課題である.

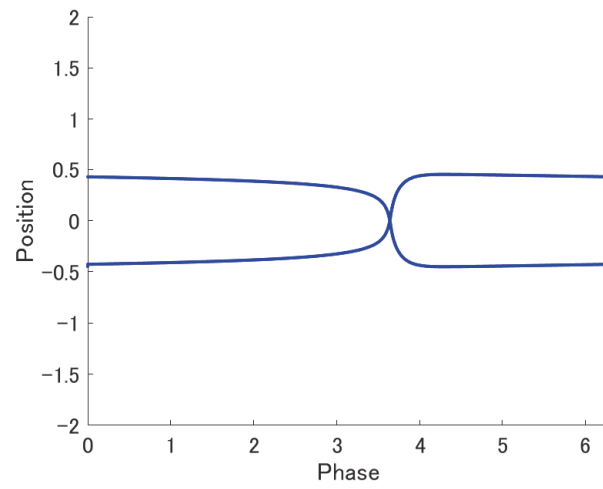
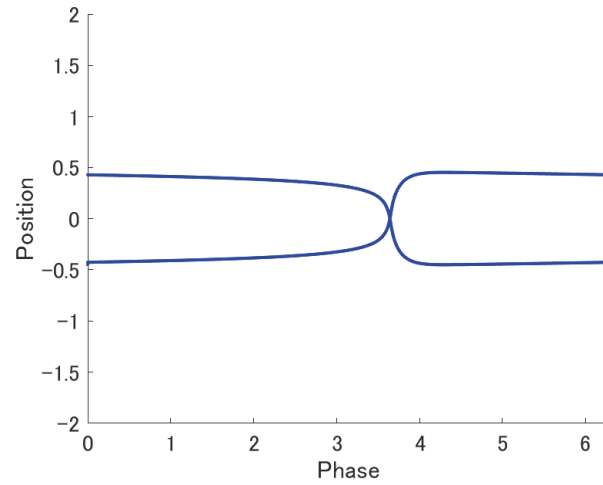
(a) $C_\omega = 0.4\sqrt{5}$ (b) $C_\omega = 0.3\pi$

図 4.5: 電子軌道サンプルの位相-変位図

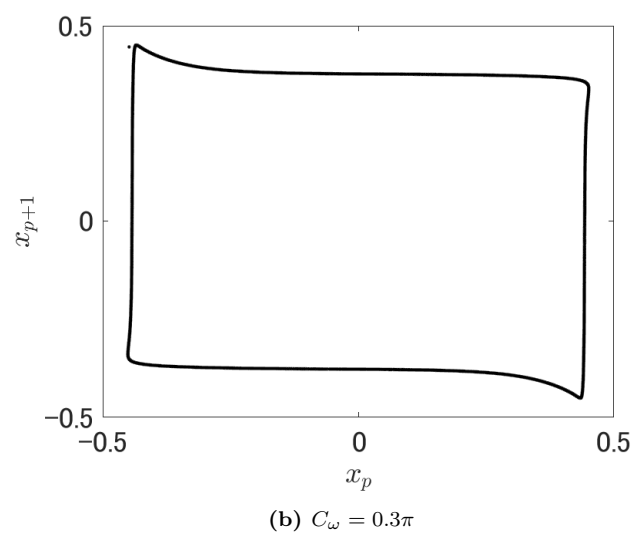
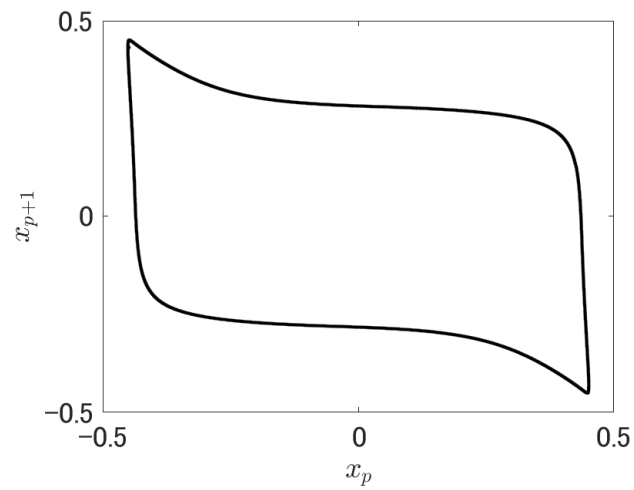


図 4.6: 電子軌道サンプルの Poincaré 写像

第5章

多段結合電子導波路の解析

量子井戸構造によって作られた電子の通り道のことを電子導波路という。この電子導波路を障壁を介して平行に複数近接して並べた構造を結合電子導波路という。結合電子導波路はトンネリングにより結合される。この結合電子導波路を複数縦続接続した構造を多段結合電子導波路という。電子波は導波路端点で反射するため、多段結合電子導波路は電子波を干渉させる。結合方法によって電子波の干渉を制御できる(多段)結合電子導波路はスプリッタやフィルタへの応用が提案されている。

多段結合電子導波路の電子の振る舞いは波動表現によってシミュレーションされている。一方、SET トランジスタなど量子効果デバイスの回路シミュレーション用モデルはすでに実現され、電子を粒子として扱い、他のマクロな電子デバイスと同様に集中定数表現される。そのため、多段結合電子導波路を素子として組み込んだ回路のシミュレーションはデバイスとしてのシミュレーションと回路としてのシミュレーションをそれぞれで行う必要がある。これらのシミュレーションを統合することができれば、量子効果デバイスを用いた回路シミュレーションの工程が1つとなり、従来のシミュレーションの手法も継承することができる。

本章では、多段結合電子導波路上の電子の振る舞いを古典粒子モデルによってシミュレーションする方法について説明する。

5.1 導波路内電子の波動表現

電子導波路はポテンシャル $V(t, x, y)$ で表現される。導波路上の電子の波動関数 $\psi(t, x, y)$ は次の2次元の Schrödinger 方程式によってその振る舞いが支配される。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x, y) = H\psi(t, x, y) \quad (5.1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(t, x, y) \quad (5.2)$$

ここで、ポテンシャル $V(t, x, y)$ は図 5.1(a) のように与える。このとき、 x 方向の波動関数は 4.1.1 に示した多重量子井戸における波動関数の求め方を適用することによって計算できる [4, 16, 27].

次に、1 段結合電子導波路の波動関数について考える。 y 方向に平面波成分を持つ波動関数は

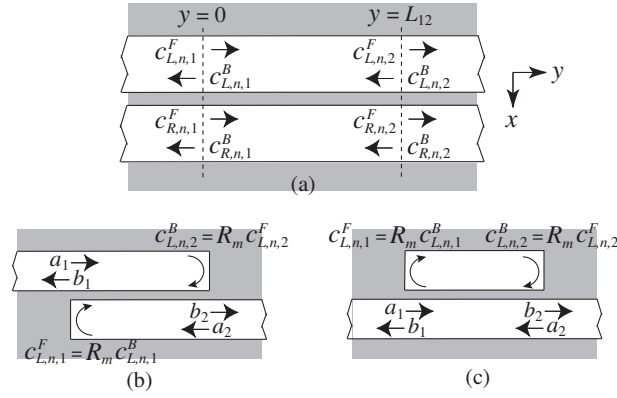


図 5.1: 1 段結合電子導波路

以下のように与えられる.

$$\psi_{n,m}(t, x, y) = \varphi_n(t, x)\varphi_m(t, y) \quad (5.3)$$

$$\varphi_n(t, x) = c_{L,n}\varphi_{w,n}^L(t, x) + c_{R,n}\varphi_{w,n}^R(t, x)$$

$$\varphi_m(t, y) = \begin{cases} \{c_F \exp(ik_m y) + c_B \exp(-ik_m y)\} \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right), & E_m - V \geq 0 \\ c_\gamma \exp(-\gamma_m y) \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right), & E_m - V < 0 \end{cases}$$

$$E_m = \begin{cases} \frac{(\hbar k_m)^2}{2m} + V & E_m - V \geq 0 \\ -\frac{(\hbar \gamma_m)^2}{2m} + V & E_m - V < 0 \end{cases} \quad V : \text{Potential height}$$

ここで, γ_m は減衰率を表す. このとき, 波数 k_m を持つ平面波 $\varphi_m(t, y)$ の y 方向の運動量は $\hbar k_m$ によって得られる. したがって, $y = 0$ から $y = L_{12}$ 間を伝搬する y 方向の速度と時間は以下のように与えられる.

$$v_m = \frac{\hbar k_m}{m} \quad (5.4)$$

$$\tau_{12,m} = \frac{L_{12}}{v_m} \quad (5.5)$$

図 5.1 のように, 導波路上の $y = 0$ と $y = L_{12}$ の前方波と後方波の係数は以下のように示される.

$$c_{L,n,1}^{F/B} = c_{L,n} c_{F/B}, \quad c_{L,n,2}^{F/B} = c_{L,n} c_{F/B} \exp(\pm i k_m L_{12}) \quad (5.6)$$

$$c_{R,n,1}^{F/B} = c_{R,n} c_{F/B}, \quad c_{R,n,2}^{F/B} = c_{R,n} c_{F/B} \exp(\pm i k_m L_{12}) \quad (5.7)$$

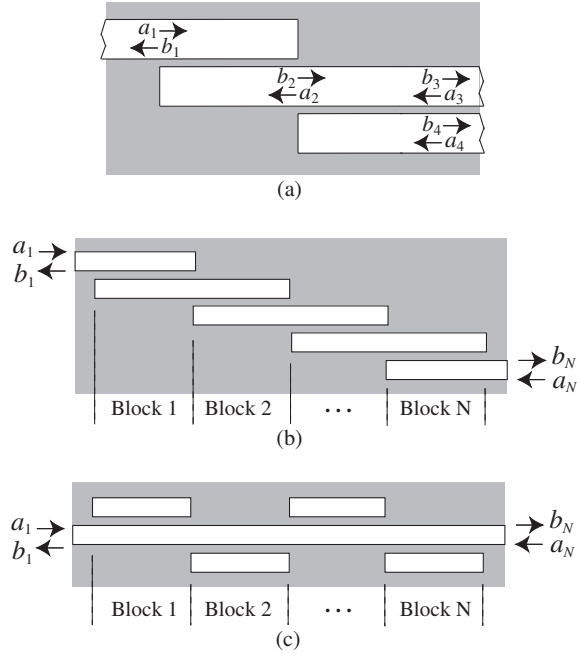


図 5.2: 多段結合電子導波路

ここで, F, B は式 (5.6), (5.7) の第 2 式における + と - に対応する. 式 (4.22), (4.23), (5.4), (5.5), (5.6), (5.7) から, 以下のような伝送行列 $M_{cpl,12}^F, M_{cpl,12}^B$ を得ることができる.

$$\begin{bmatrix} c_{L,n,2}^F \\ c_{R,n,2}^F \end{bmatrix} = M_{cpl,12}^F \begin{bmatrix} c_{L,n,1}^F \\ c_{R,n,1}^F \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

$$M_{cpl,12}^F = \exp(ik_m L_{12}) \exp(-s\tau_{12,m}) \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) & -i \sin\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) \\ -i \sin\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) & \cos\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} c_{L,n,2}^B \\ c_{R,n,2}^B \end{bmatrix} = M_{cpl,12}^B \begin{bmatrix} c_{L,n,1}^B \\ c_{R,n,1}^B \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

$$M_{cpl,12}^B = \exp(-ik_m L_{12}) \exp(-s\tau_{12,m}) \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) & -i \sin\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) \\ -i \sin\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) & \cos\left(\frac{E_{w,n}^{(1)}}{\hbar} \tau_{12,m}\right) \end{bmatrix}$$

上述した 1 段結合電子導波路による波動表現を基礎として, 多段結合電子導波路について説明する. 図 5.2(b) に示すように, 結合電子導波路が終端されていると仮定する. 障壁で終端された

両端の反射係数は以下によって与えられる.

$$R_m = \frac{1 + \frac{\gamma_m}{ik_m}}{1 - \frac{\gamma_m}{ik_m}}, \quad |R_m| = 1 \quad (5.10)$$

このとき, 以下の関係式が得られる.

$$c_{R,n,1}^F = R_m c_{R,n,1}^B, \quad c_{L,n,2}^B = R_m c_{L,n,2}^F \quad (5.11)$$

1 段結合電子導波路の入出力各端子における入射波と反射波の係数を図 5.1(b) に示すように定める. また, 新たに係数関係と 2 つの 2×2 行列を定義する.

$$a_1 = c_{L,n,1}^F, \quad a_2 = c_{R,n,2}^B \quad (5.12)$$

$$b_1 = c_{L,n,1}^B, \quad b_2 = c_{R,n,2}^F \quad (5.13)$$

$$\begin{bmatrix} M_{11}^F & M_{12}^F \\ M_{21}^F & M_{22}^F \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{\text{cpl},12}^F \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_m \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} M_{11}^B & M_{12}^B \\ M_{21}^B & M_{22}^B \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{\text{cpl},12}^B \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_m \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

このとき, 図 5.2(b) の導波路における 2 端子表現は次のようになる.

$$\begin{bmatrix} c_{L,n,2}^F \\ c_{R,n,1}^B \end{bmatrix} = \left(\mathbf{E} - \begin{bmatrix} 0 & M_{12}^F \\ M_{12}^F & 0 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} M_{11}^F & 0 \\ 0 & M_{11}^B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \mathbf{S}_{12}^I \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

$$\mathbf{S}_{12}^I = \begin{bmatrix} 0 & M_{21}^B \\ M_{21}^F & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} M_{22}^B & 0 \\ 0 & M_{22}^F \end{bmatrix} \left(\mathbf{E} - \begin{bmatrix} 0 & M_{12}^F \\ M_{12}^B & 0 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} M_{11}^F & 0 \\ 0 & M_{11}^B \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

ここで, \mathbf{E} は単位行列である. また, \mathbf{S}_{12}^I は散乱行列と呼ばれている.

次に, 図 5.2(c) に示されるような結合線路について考える. ここで, 反射は以下のように与えられる.

$$c_{L,n,1}^F = R_m c_{L,n,1}^B, \quad c_{L,n,2}^B = R_m c_{L,n,2}^F \quad (5.17)$$

また、以下のように係数を置きなおす。

$$a_1 = c_{R,n,1}^F, \quad a_2 = c_{R,n,2}^B \quad (5.18)$$

$$b_1 = c_{R,n,1}^B, \quad b_2 = c_{R,n,2}^F \quad (5.19)$$

これらの係数を用いると、この結合線路は式 (5.15) と同様に次のように 2 端子表現できる。

$$\begin{bmatrix} c_{L,n,2}^F \\ c_{R,n,1}^B \end{bmatrix} = \left(\mathbf{E} - \begin{bmatrix} 0 & M_{22}^F \\ M_{22}^B & 0 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} M_{21}^F & 0 \\ 0 & M_{21}^B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \mathbf{S}_{12}^{II} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

$$\mathbf{S}_{12}^{II} = \begin{bmatrix} 0 & M_{11}^B \\ M_{11}^F & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} M_{12}^B & 0 \\ 0 & M_{12}^F \end{bmatrix} \left(\mathbf{E} - \begin{bmatrix} 0 & M_{22}^F \\ M_{22}^B & 0 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} M_{21}^F & 0 \\ 0 & M_{21}^B \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

1 段結合電子導波路はカプラーやスプリッタとして機能する。図 5.2(b), (c) に示される 2 段カプラー/スプリッタは図 5.2(a) に示される 1 段の導波路に対して入射される電子波の運動エネルギーや運動量の選択性を向上させることができる。電子波が図 5.2(a) に示される導波路を通過するとき、この結合電子導波路はスプリッタとして機能する。伝搬を特徴づける値は以下のように与えられる。

$$\mathbf{S}_{12}^I(21) \mathbf{M}_{\text{clp},12}^F(11) \quad \text{for route } a_1 \rightarrow b_2 \rightarrow b_3, \quad (5.22)$$

$$\mathbf{S}_{12}^I(21) \mathbf{M}_{\text{clp},12}^F(21) \quad \text{for route } a_1 \rightarrow b_2 \rightarrow b_4, \quad (5.23)$$

ここで、 $\mathbf{S}_{12}^I(ij)$ と $\mathbf{M}_{\text{clp},12}^F(ij)$ はそれぞれ式 (5.15), (5.8) の行列 \mathbf{S}_{12}^I と $\mathbf{M}_{\text{clp},12}^F$ の (i, j) 成分である。また、電子波の経路が $a_3/a_4 \rightarrow a_2 \rightarrow b_1$ のように伝搬する時、電子導波路はカプラーとして機能する。この伝搬を特徴づける値は以下のように与えられる。

$$\mathbf{M}_{\text{clp},12}^B(21) \mathbf{S}_{12}^I(12) \quad \text{for route } a_3 \rightarrow a_2 \rightarrow b_1, \quad (5.24)$$

$$\mathbf{M}_{\text{clp},12}^B(22) \mathbf{S}_{12}^I(12) \quad \text{for route } a_4 \rightarrow a_2 \rightarrow b_1, \quad (5.25)$$

ここで、 $\mathbf{M}_{\text{clp},12}^B(ij)$ は式 (5.9) の行列 $\mathbf{M}_{\text{clp},12}^B$ の (i, j) 要素である。図 5.2(a) の 2 段電子導波路

における波動関数は式 (5.3), (5.8), (5.9), (5.11), (5.15) から導出できる.

図 5.2(b), (c) の多段結合電子導波路は特定の波数の電子波を通過, 阻止するフィルタ機能を備えている. このような電子導波路は特定の波数の電子波を通過, 排除する機能を備えることができる. 散乱行列 $S_{12}^{I/II}$ を伝送散乱行列 $T_{12}^{I/II}$ に変換することで, 入射波と反射波の関係の記述を次のように簡単にできる.

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ a_1 \end{bmatrix} = T_{12}^{I/II} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

任意の段数 (N) の多段結合線路の 2 端子表現は次式となり, これにより線路のフィルタ特性を求めることができる.

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ a_1 \end{bmatrix} = \prod_{i=1}^{N-1} T_{i(i+1)}^{I/II} \begin{bmatrix} a_N \\ b_N \end{bmatrix} \quad (5.27)$$

図 5.2(b), (c) のような多段結合電子導波路の波動関数は式 (5.3), (5.11), (5.15), (5.17), (5.20), (5.26), (5.27) から計算できる.

5.2 粒子モデルに用いる速度場の計算量削減

導波路内の電子の古典粒子モデルである Langevin 方程式の速度場を導出する。結合した電子導波路上の波動関数 $\psi(t, x, y)$ を式 (5.3) で与えられる波動関数 $\psi_{n,m}(t, x, y)$ の線形結合として表現する。

$$\psi(t, x, y) = \sum_n \sum_m \psi_{n,m}(t, x, y) = \sum_n \sum_m \varphi_n(t, x) \varphi_m(t, y) \quad (5.28)$$

結合導波路上の波の伝搬は x 方向に単一モードであると仮定する。すなわち、 $\psi(t, x, y)$ は x に関して1つの固有関数 $\varphi_{n_0}(t, x)$ で構成されるものとする。したがって、波動関数 $\psi(t, x, y)$ は以下のように変数分離できる。

$$\psi(t, x, y) = \psi(t, x) \psi(t, y) \quad (5.29)$$

$$\psi(t, x) = c_{L,n_0} \varphi_{w,n_0}^L(t, x) + c_{R,n_0} \varphi_{w,n_0}^R(t, x)$$

$$\psi(t, y) = \sum_m \varphi_m(t, y)$$

波動関数 $\psi(t, x)$ が2重量子井戸系の基底状態であるとき、単一モードの伝搬は安定に持続すると考えられる。波動関数を式 (3.8) のように変換すると、式 (3.21) と式 (3.22) は

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \operatorname{Re}(\log \psi(t, \mathbf{r})) \quad (5.30)$$

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla \operatorname{Im}(\log \psi(t, \mathbf{r})) \quad (5.31)$$

となる。したがって、式 (5.29) を式 (5.30), (5.31) に代入することで速度場 $\mathbf{u}(t, x, y), \mathbf{v}(t, x, y)$ が次式のように得られる。

$$\mathbf{u}(t, x, y) = \frac{\hbar}{m} \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\partial \psi(t, x) / \partial x}{\psi(t, x)} \right), \operatorname{Re} \left(\frac{\partial \psi(t, y) / \partial y}{\psi(t, y)} \right) \right] \quad (5.32)$$

$$\mathbf{v}(t, x, y) = \frac{\hbar}{m} \left[\operatorname{Im} \left(\frac{\partial \psi(t, x) / \partial x}{\psi(t, x)} \right), \operatorname{Im} \left(\frac{\partial \psi(t, y) / \partial y}{\psi(t, y)} \right) \right] \quad (5.33)$$

式 (5.32), (5.33) より、速度場の x, y 成分はそれぞれ x, y のみに依存することを示している。式 (5.32), (5.33) を式 (3.41) に代入することで速度場が計算できる。式 (3.19) に算出した速度場を代入し、数値積分することで電子の軌道サンプルを計算することができる。以上のように、速度場の計算に変数分離が適用できるので軌道サンプルの計算量を削減することができる。

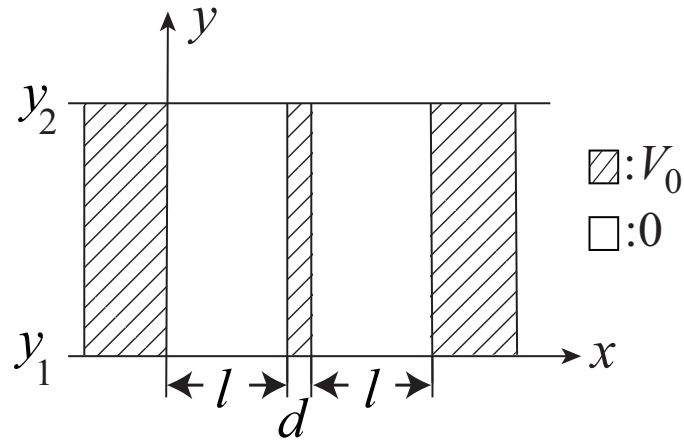


図 5.3: モデル化の対象とした 1 段結合電子導波路

表 5.1: 1 段結合電子導波路の数値実験パラメータ

Dimension	Value
$y_2 - y_1$	2.5
l	0.8
d	0.1
V_0	10

5.3 数値実験

本節では、1 段および 2 段結合電子導波路上の電子の波動関数とサンプル軌道を計算する。また、両者を統計的に比較する。

5.3.1 1 段結合電子導波路の解析

図 5.3 に解析する 1 段結合電子導波路を示す。表 5.1 にこの線路のパラメータを示す。

電子導波路上の波動関数の初期分布は以下の式で与えた。

$$\psi(0, x, y) = \psi(0, x)\psi(0, y) \quad (5.34)$$

$$\psi(0, x) = \varphi_{w,1}^L(0, x)$$

$$\psi(0, y) = \sum_m \varphi_m(0, y) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \exp\left\{-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2} + ik_{y_0}y\right\}$$

x 方向は 2 重量子井戸系の基底状態、 y 方向は平均 $y_0 = 0.25$ 、分散 $\sigma_y^2 = 1.25 \times 10^{-2}$ を持つガウ

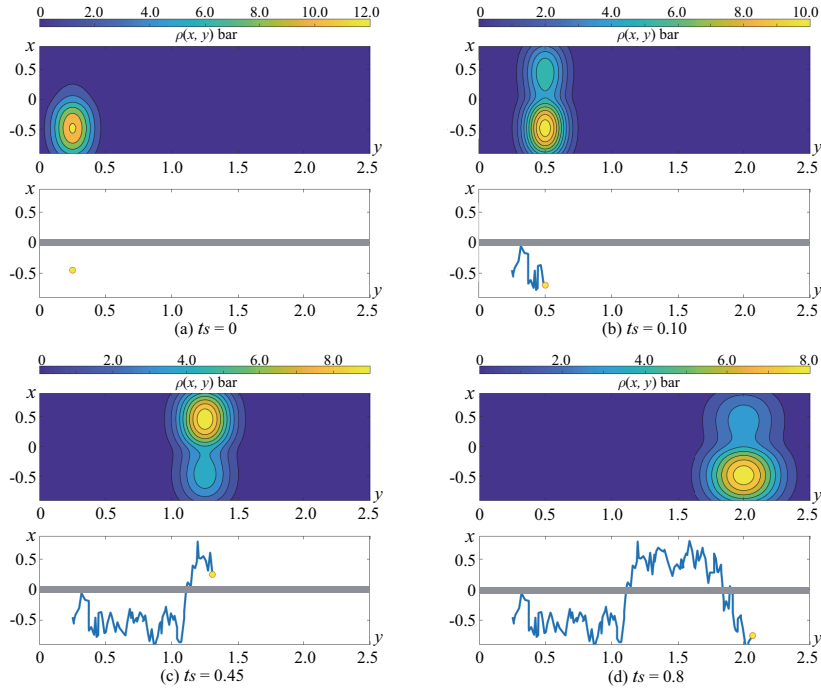


図 5.4: $t = 0, 0.1, 0.45, 0.8$ における 1 段結合電子導波路上の波動関数と軌道サンプル

ス分布とした。また、波動関数 $\psi(t, x, y)$ の y 方向の初期運動量 $\hbar k_{y0}$ は 5.0 で与える。このとき、不確定性原理により電子の位置と波数の偏差 σ_y, σ_{k_y} は $\sigma_y \sigma_{k_y} = 1/2$ を満たす。そのため、波数空間におけるガウス分布の分散は $\sigma_{k_y}^2 = 1/(4\sigma_y^2)$ となる。

式 (5.34) の初期条件の下、式 (5.29) から波動関数 $\psi(t, x, y)$ を計算した。 x 方向の波動関数 $\psi(t, x)$ は 2 重量子井戸の基底状態としたため、式 (4.22) より $\psi(t, x) = \varphi_{w,1}^L(t, x)$ で与えた。また、 y 方向の波動関数 $\psi(t, y)$ はガウス分布をフーリエ展開することによって得られる $\sum \varphi_m(t, y)$ の形の波動関数である。波動関数の時間発展は図 5.4 の (a)-(d) 各上列に確率密度関数 $\rho(t, x, y) = \psi(t, x, y)\psi^*(t, x, y)$ として示している。これらの図はそれぞれ時刻 $t_s = 0, 0.1, 0.45, 0.8$ の確率密度関数 $\rho(t_s, x, y)$ を示している。

次に、軌道サンプルの計算方法について述べる。速度場 $\mathbf{b}(t, x(t), y(t))$ は波動関数 $\psi(t, x, y)$ から得られる。古典粒子モデルの軌道サンプル $(x(t), y(t))$ は次式を数値積分することで計算できる。

$$\begin{aligned} \left[x(t + \Delta t), y(t + \Delta t) \right] \leftarrow & \left[x(t), y(t) \right] + \{ \mathbf{u}(t, x(t), y(t)) + \mathbf{v}(t, x(t), y(t)) \} \Delta t \\ & + \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \Delta t \left[d\Gamma_x(t), d\Gamma_y(t) \right] \end{aligned} \quad (5.35)$$

ここで、 Δt は時間刻み幅である。また、式 (5.35) の揺らぎ要素である第 3 項の平均値は $\sqrt{(\hbar/2m)\Delta t} =$

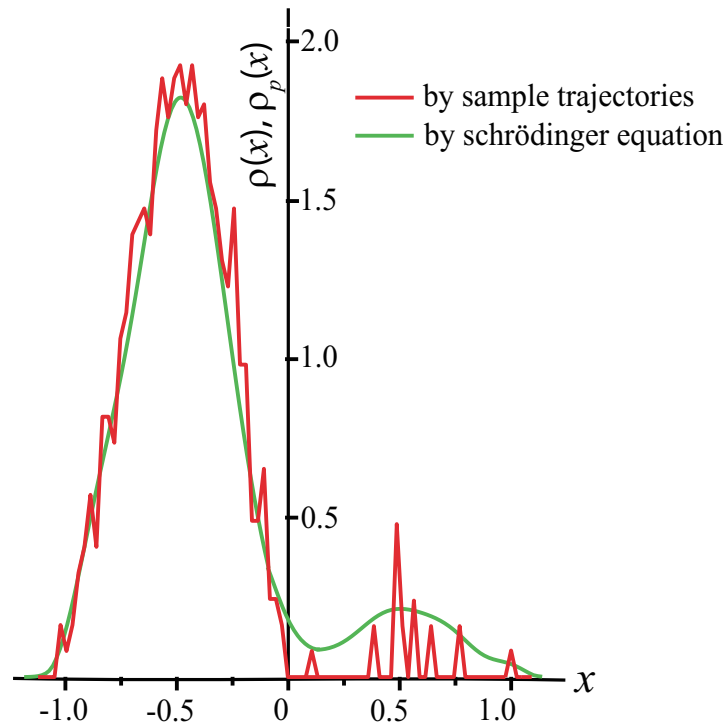


図 5.5: 1 段結合電子導波路上における電子の存在確率密度関数

$\sqrt{\Delta t}/2$ となる。この実験では時間刻み幅 Δt を 0.01 に設定した。図 5.4 の各下図は式 (5.35) を時刻 $0 \sim t_s$ まで数値積分して得られた電子軌道サンプルを示している。結果より、ジグザグな変化をする電子軌道サンプルが得られた。このジグザク運動は $d\Gamma_{x/y}(t)$ によって生じる。また、図 5.4 の各サンプルの終点は確率密度関数 ρ のほぼ中央に位置し、 ρ にしたがっていることが分かる。

次に、算出された軌道サンプルの統計的な性質を考察する。図 5.5 は 2 つの確率密度関数を示している。1 つは $(x, 2.5)$ を通過した 500 サンプル分の確率密度関数である。もう一方は、以下の式によって導かれた確率密度関数である。

$$\rho_p(x) = \int_0^{\infty} \psi(t, x, 2.5) \psi^*(t, x, 2.5) dt \quad (5.36)$$

2 つの分布を比較すると、確率密度関数の曲線がほとんど重なっていることが読み取れる。

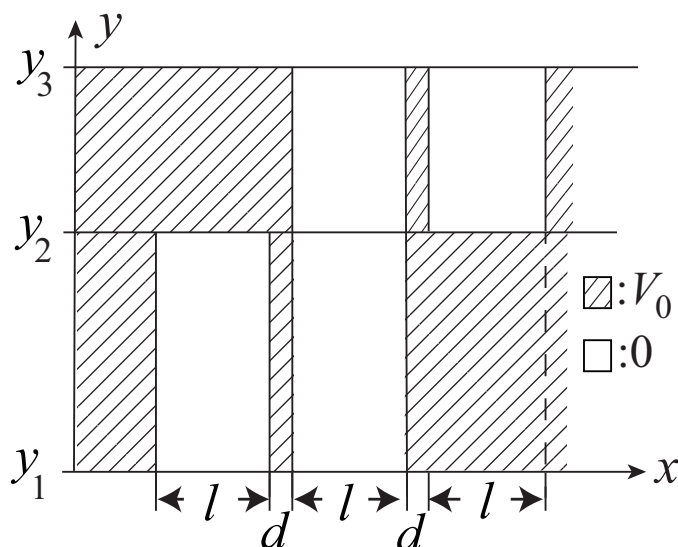


図 5.6: モデル化の対象とした多段結合電子導波路

表 5.2: 多段結合電子導波路の数値実験パラメータ

Dimension	Value
$y_2 - y_1$	2.5
$y_3 - y_2$	1.0
l	0.45
d	0.1
V_0	10

5.3.2 2 段結合電子導波路の解析

図 5.6 に 2 重電子導波路を示す。これは図 5.2 に示されるようなカプラ、スプリッタと同様の構造を持つ。表 5.2 に多段結合電子導波路パラメータを示す。

式 (5.34) によって波動関数の初期条件を与えた。 y 方向の初期分布については平均値 $y_0 = 0.1$, 分散 $\sigma_y^2 = 0.05$ のガウス分布とした。

図 5.7 に 2 段結合電子導波路上の確率密度関数 $|\psi(x, y)|^2$ を示す。図 5.7 の左は $t = 0.50, \hbar k_{y0} = 15.0$, 右は $t = 0.70, \hbar k_{y0} = 10.0$ のときの結果を示している。初期運動量 $\hbar k_{y0} = 15.0$ のとき、電子の確率密度関数は $0.5 < x \leq 1.0$ において高くなる。一方で、初期運動量 $\hbar k_{y0} = 10.0$ のときは $1.0 < x \leq 1.55$ の線路上の電子の確率密度関数が高くなる。結果より、どちらの線路において確率密度関数が高くなるかは初期運動量に依存することが分かる。

初期運動量の異なる 2 つの波動関数を用いてそれぞれの電子軌道サンプルを計算した。図 5.8 には各運動量における電子軌道サンプルの計算例を示す。図 5.8 の左は初期運動量 $\hbar k_{y0} = 15.0$ に

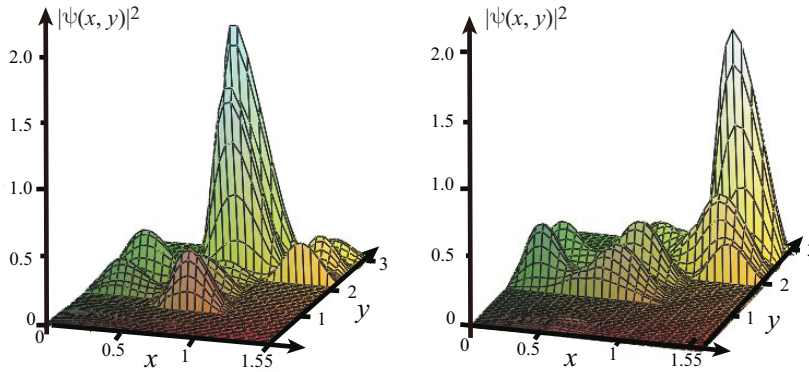


図 5.7: 2 段結合電子導波路上の確率密度関数の例

設定した波動関数から得られる Langevin 方程式を $t \in [0, 0.5]$ で数値積分した結果を示している。同右図は初期運動量 $\hbar k_{y0} = 10.0$, 積分範囲 $t \in [0, 0.7]$ とした電子軌道サンプルの計算例である。この計算例では 5 サンプルの計算結果を示しており, \circ はサンプルの最終到達点を表す。結果より, 確率密度関数にしたがって運動する電子の軌道サンプルが得られた。この結果では確率密度が 0 でない領域にサンプル軌道の最終点が存在していないが, これは計算したサンプル軌道が少ないためである。また, 図 5.8 の右図では線路内を反射するサンプルを確認できる。これは図 5.7 の $x \in [0, 0.5]$ に存在する反射波の要素が反映されている。

5.3.1 の電子の動きと比較すると, 5.3.2 で計算した軌道サンプルの方が y 方向の平均速度が大きいことが分かる。これは, 5.3.1 で与えた電子の初期運動量の方が大きいためである。また, 5.3.2 の電子は 1 つの導波路に存在する時間が 5.3.1 の電子に比べて短い。この現象は 5.3.2 の導波路幅の方が 5.3.1 の導波路幅よりも狭いため生じる。 x 方向の固有エネルギー $E_{w,1}^e, E_{w,1}^o$ とエネルギーギャップ $E_{w,1}^{(1)}$ は導波路幅が狭いほど大きくなる。 x 方向の波動関数 $\psi(t, x)$ は式 (4.22), (4.23) で与えられるため, エネルギーギャップ $E_{w,1}^{(1)}$ が大きくなる狭い導波路上の波動関数の方が高周波数で振動する。そのため, 線路上に留まる時間が短くなると考えられる。

図 5.7, 5.8 より初期運動量の違いにより電子は 2 段結合電子導波路上を分かれて動く。したがって, 結合線路がスプリッタとして機能する。図 5.9 は横軸を初期運動量 $\hbar k_{y0}$, 縦軸を $y = y_3$ に到達したときの確率密度をプロットしたものである。各曲線は十分時間経過した後で得られた波動関数を $y > y_3$ で積分した値である。Schrödinger 方程式を有限差分法で数値計算した結果からも同様の確率密度を得ることができた。

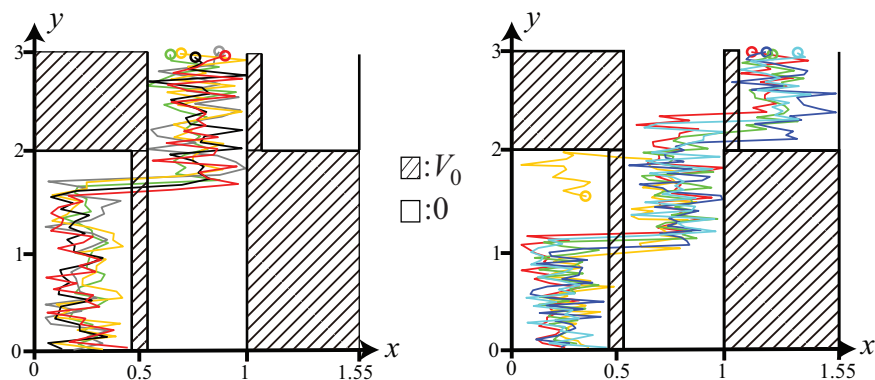


図 5.8: 多段結合電子導波路上の電子軌道サンプル計算例

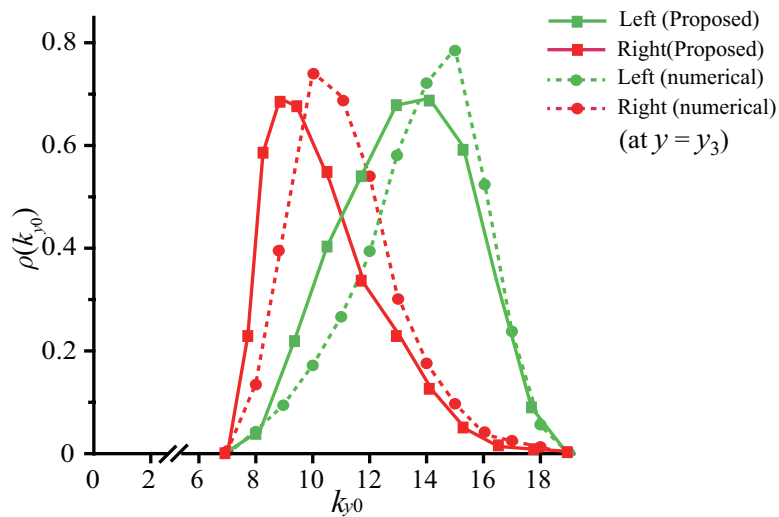


図 5.9: 2 段結合電子導波路上の $y = y_3$ における確率密度関数 (Proposed: 本手法, Numerical: 有限差分法)

第6章

対称ゲージ磁場における電子の軌道 解析

本章では、磁場によって生じるスピンの変動を伴う電子軌道サンプルを 3.2 節で説明したモデルを用いて計算する方法を説明する。スピンを含んだ電子の振る舞いはスピノルによって表現され、Pauli 方程式に支配される。Pauli 方程式から粒子モデルを構築するために、連続の式を導く。次に、対称ゲージポテンシャル $\mathbf{A}_{\text{sym}}(t, \mathbf{r})$ 上の電子のスピノル、確率密度関数、確率流密度、を求め、粒子モデルである Langevin 方程式の速度場を定める。さらに、この Langevin 方程式を数値積分により、電子軌道サンプルを計算でき、サンプル軌道上の位置とそこに至った時間をスピノルに与えてスピンの向きを決定できることを示す。

6.1 Pauli 方程式から得られる連続の式

Pauli 方程式 (2.49) はスピンと外部電磁場の相互作用をとり入れた方程式である。この方程式から連続の式を導く [29]。確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ は次式により得られる。

$$\rho(t, \mathbf{r}) = \boldsymbol{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r})\boldsymbol{\psi}(t, \mathbf{r}) = |\psi_+(t, \mathbf{r})|^2 + |\psi_-(t, \mathbf{r})|^2 \quad (6.1)$$

ここで、 \dagger はエルミート転置である。

式 (6.1) の確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ を時間 t で微分する。

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} = \boldsymbol{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) \frac{\partial \boldsymbol{\psi}(t, \mathbf{r})}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r})}{\partial t} \boldsymbol{\psi}(t, \mathbf{r}) \quad (6.2)$$

式 (6.2) に Pauli 方程式 (2.49) と Pauli 方程式のエルミート共役

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}})^2 \boldsymbol{\psi}(t, \mathbf{r}))^\dagger + e_0 A_0 \boldsymbol{\psi}^\dagger(t, \mathbf{r}) \quad (6.3)$$

を代入すると式 (6.2) は

$$\frac{\partial \rho(t, \mathbf{r})}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \sum_k \sum_s \nabla_k \left\{ \boldsymbol{\psi}^\dagger \sigma_k \sigma_s (\hat{\boldsymbol{\pi}}_s \boldsymbol{\psi}) + (\hat{\boldsymbol{\pi}}_s \boldsymbol{\psi})^\dagger \sigma_s \sigma_k \boldsymbol{\psi} \right\} \quad (6.4)$$

となる。このとき、演算子 $\hat{\boldsymbol{\pi}}_k$ に関する性質

$$\alpha^\dagger (\hat{\boldsymbol{\pi}}_k \beta) - (\hat{\boldsymbol{\pi}}_k \alpha)^\dagger \beta = \frac{\hbar}{i} \nabla_k (\alpha^\dagger \beta) \quad (6.5)$$

を用いた。式 (6.4) は Pauli 方程式から導かれる連続の式、また、

$$\mathbf{j}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \sum_s ((\hat{\pi}_s \psi)^\dagger \sigma_s \boldsymbol{\sigma} \psi + \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \sigma_s (\hat{\pi}_s \psi)) \quad (6.6)$$

を確率流密度とみなすことができる。式 (6.6) の x 成分は

$$j_x(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_s (\hat{\pi}_s \psi)^\dagger \sigma_s \sigma_x \psi + \psi^\dagger \sigma_x \sigma_s (\hat{\pi}_s \psi) \quad (6.7)$$

となる。式 (6.7) を式 (2.56), (6.5) を用いて変形すると

$$\begin{aligned} j_x(t, \mathbf{r}) &= \frac{1}{2m} ((\hat{\pi}_x \psi)^\dagger \psi + \psi^\dagger (\hat{\pi}_x \psi)) + \frac{i}{2m} \sum_k \sum_s \epsilon_{xsk} (-\hat{\pi}_s \psi)^\dagger \sigma_k \psi + \psi^\dagger \sigma_k (\hat{\pi}_s \psi) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - e_0 A_x \right) \psi \right)^\dagger \psi + \psi^\dagger \left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - e_0 A_x \right) \psi \right) \right) \\ &\quad + \frac{i}{2m} \sum_k \sum_s \epsilon_{xsk} \frac{\hbar}{i} \nabla_s (\psi^\dagger \sigma_k \psi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x} \psi - \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{e_0}{m_e} A_x \rho + \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial y} (\psi^\dagger \sigma_z \psi) - \frac{\partial}{\partial z} (\psi^\dagger \sigma_y \psi) \right) \quad (6.8) \end{aligned}$$

となる。確率流密度の y, z 成分についても同様に求めることができる。よって、確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ は

$$\mathbf{j}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{j}_{\text{orbital}}(t, \mathbf{r}) + \mathbf{j}_{\text{spin}}(t, \mathbf{r}), \quad (6.9)$$

$$\mathbf{j}_{\text{orbital}}(t, \mathbf{r}) = i \frac{\hbar}{2m} ((\nabla \psi(t, \mathbf{r}))^\dagger \psi(t, \mathbf{r}) - \psi^\dagger(t, \mathbf{r}) (\nabla \psi(t, \mathbf{r}))) - \frac{e_0}{m_e} \mathbf{A} \rho \quad (6.10)$$

$$\mathbf{j}_{\text{spin}}(t, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} (\nabla \times (\psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi)) \quad (6.11)$$

のように表すことができる。式 (6.10) の右辺最終項は確率流密度のゲージ不変性、式 (6.11) は確率流密度のスピンからの影響を表している。

6.2 電子の波動的表現

本節では、6.1節の具体例として、 $\mathbf{A} = \mathbf{A}_{\text{Sym}}$ のときのスピノル $\psi(t, \mathbf{r})$ 、確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ 、確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ を求める。ここでは円筒座標系 $\mathbf{r} = (t, \theta, z)$ を用いる。

z 方向に一様な磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ を与える次の示すベクトルポテンシャルを

$$\mathbf{A}_{\text{Sym}} = (A_r, A_\theta, A_z) = \left(0, \frac{B_0}{2}r, 0 \right) \quad (6.12)$$

のように対称ゲージとする。一方、スカラポテンシャル ϕ は $\phi = 0$ を仮定する。

Hamilton 演算子 (2.54), (2.53) に磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ とベクトルポテンシャル \mathbf{A}_{Sym} を代入すると、Pauli 方程式の各要素は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - i\hbar\omega_C \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2}m\omega_C^2 r^2 + \hbar\omega_C \right] \varphi_+(r, \theta, z) = E\varphi_+(r, \theta, z) \quad (6.13)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - i\hbar\omega_C \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2}m\omega_C^2 r^2 - \hbar\omega_C \right] \varphi_-(r, \theta, z) = E\varphi_-(r, \theta, z) \quad (6.14)$$

となる。式 (6.13), (6.14) をそれぞれ解くことで、以下のように固有関数とエネルギー固有値が求められる [30]。

$$\varphi_{n, m_z, +/-}(\mathbf{r}; k_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{n, m_z}(\xi(r)) \exp\{im_z\theta\} \exp\{ik_z z\}, \quad (6.15)$$

$$\xi(r) = \frac{e_0 B_0}{2\hbar} r^2 \quad (6.16)$$

$$\psi_{n, m_z, +/-}(t, \mathbf{r}; k_z) = \varphi_{n, m_z, +/-}(\mathbf{r}; k_z) \exp\left(i \frac{E_{n, m_z, +/-}}{\hbar} t\right) \quad (6.17)$$

$$R_{n, m_z}(x) = \sqrt{\frac{m\omega_C}{\pi\hbar}} \sqrt{\frac{n!}{(n+|m_z|)!}} L_n^{|m_z|}(x) \exp\left(-\frac{x}{2}\right) x^{\frac{|m_z|}{2}}, \quad (6.18)$$

$$E_{n, m_z, +/-}(k_z) = (2n + |m_z| + 1)\hbar\omega_C + m_z\hbar\omega_C + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \pm \omega_C B_0, \quad (6.19)$$

$$\omega_C = \frac{e_0 B_0}{2m} \quad (6.20)$$

式 (6.17) を式 (6.1), (6.6) に代入すると、確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$ 、確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ は以下のよ

うになる.

$$\rho(t, \mathbf{r}) = \{R_{n, m_z}(\xi(r))\}^2 \quad (6.21)$$

$$j_r(t, \mathbf{r}) = 0, \quad (6.22)$$

$$j_\theta(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar m_z}{m} \frac{\rho(t, \mathbf{r})}{r} - \frac{e_0 B_0}{2m} r \rho(t, \mathbf{r}), \quad (6.23)$$

$$j_z(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar}{m} k_z \rho(t, \mathbf{r}) + \frac{\hbar}{2m} \left[\frac{\rho(t, \mathbf{r})}{r} - \rho(t, \mathbf{r}) + \frac{\partial}{\partial r} \rho(t, \mathbf{r}) \right] \sin \left(\frac{e_0 B_0}{m} t - \theta \right). \quad (6.24)$$

6.3 古典粒子モデル

本節では前節で導出した確率密度関数 $\rho(t, \mathbf{r})$, 確率流密度 $\mathbf{j}(t, \mathbf{r})$ を用いて電子の古典粒子モデルに必要な速度場を計算する. また, Langevin 方程式の数値積分により, 電子軌道サンプルを計算でき, サンプル軌道上の位置とそこに至った時間をスピノルに与えてスピンの向きを決定できることを示す.

式 (6.21), (6.22), (6.23), (6.24) を式 (3.41) に代入すると

$$b_r(t, \mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial r} \{\ln \rho(t, \mathbf{r})\} \quad (6.25)$$

$$b_\theta(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar m_z}{m} \frac{1}{r} - \omega_C r \quad (6.26)$$

$$b_z(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar}{m} k_z + \frac{\hbar}{2m} \left[\frac{1}{r} - 1 + \frac{\partial}{\partial r} \{\ln \rho(t, \mathbf{r})\} \right] \sin(2\omega_C t - \theta) \quad (6.27)$$

が得られる. 式 (6.25), (6.26), (6.27) を式 (3.19) に代入して数値積分することで電子のサンプル軌道 $\tilde{\mathbf{r}}(t) = (\tilde{r}(t), \tilde{\theta}(t), \tilde{z}(r))$ を算出できる.

算出された電子の位置と時間からスピノルを計算できる. 電子軌道サンプル上の任意の点におけるスピンの向きは計算されたスピノルから次式で計算する.

$$\tilde{\mathbf{S}}(t, \tilde{\mathbf{r}}) = \frac{\psi^\dagger(t, \tilde{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{S}} \psi(t, \tilde{\mathbf{r}})}{\psi^\dagger(t, \tilde{\mathbf{r}}) \psi(t, \tilde{\mathbf{r}})} \quad (6.28)$$

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (6.29)$$

式 (6.28) から求められるスピンをここでは局所スピンという. 一方, スピン角運動量の期待値 $\langle \mathbf{S} \rangle_r(t)$ は以下のように計算される.

$$\langle \mathbf{S} \rangle_r(t) = \int \psi(t, \mathbf{r}) \hat{\mathbf{S}} \psi(t, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (6.30)$$

式 (6.30) によって算出されるスピンは位置で積分して得られる期待値であるため, 軌道サンプルに沿ったスピンの向きを求めることができない.

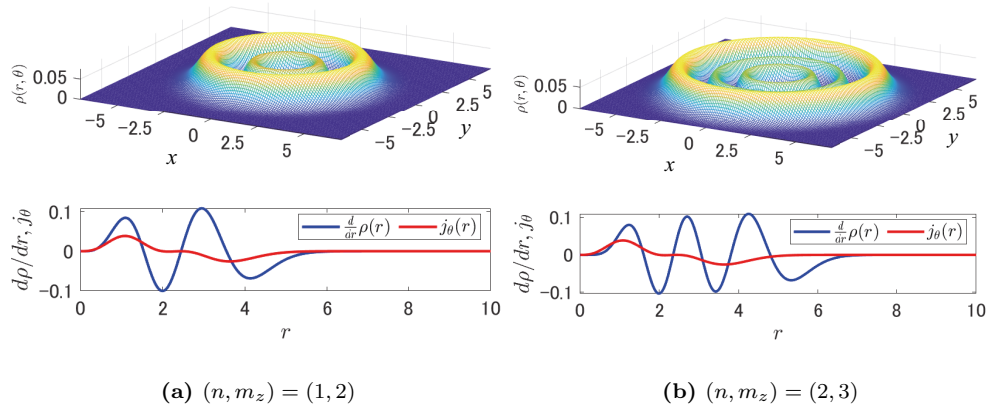


図 6.1: 電子の確率密度関数と確率密度流

6.4 数値実験

本節では、前節に提案した方法 (提案モデルという) により電子の軌道サンプルと局所スピンを計算し、確率密度関数、確率流密度、速度場の値を基に提案したモデルの妥当性を検証する。

6.4.1 数値実験条件

磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$ と式 (6.12) で定義したベクトルポテンシャル \mathbf{A}_{Sym} の B_0 を 1.0 に設定した。さらに、電子は $z = 0$ の $r - \theta$ 平面に閉じ込められており、 $\exp(ik_z z) = 1$ と仮定し、速度場は $b_z(t, r) = 0$ とする。また、Pauli 方程式にはスピン緩和現象を扱う項を取り入れていない。

6.4.2 数値実験結果と考察

図 6.1 は式 (6.1), (6.23) から計算される確率密度関数とその微分、偏角方向成分の確率流密度を示す。また、図 6.2 は式 (6.25), (6.26) から算出される速度場を示す。主量子数 n と磁気量子数 m_z が $(n, m_z) = (1, 2)$ のときを (a), $(n, m_z) = (2, 3)$ のときを (b) に示す。

図 6.1 の上の図から、確率密度関数 $\rho(r)$ は回転対称であることが分かる。これは式 (6.21) から得られる確率密度関数が θ に対して独立であることから得られる結果である。また、図 6.1 の下の図から、確率流密度 $j_\theta(r)$ が周辺確率密度関数 $\rho(r)$ の極小点で回転方向の切り替わりが発生していることが分かる。

式 (6.25) から計算される動径方向成分の速度場 $b_r(r)$ は周辺確率密度関数 $\rho(r)$ が極大値となる位置 r で 0 になることを確認できる。よって、電子は特定の位置 r にとどまることが推測できる。

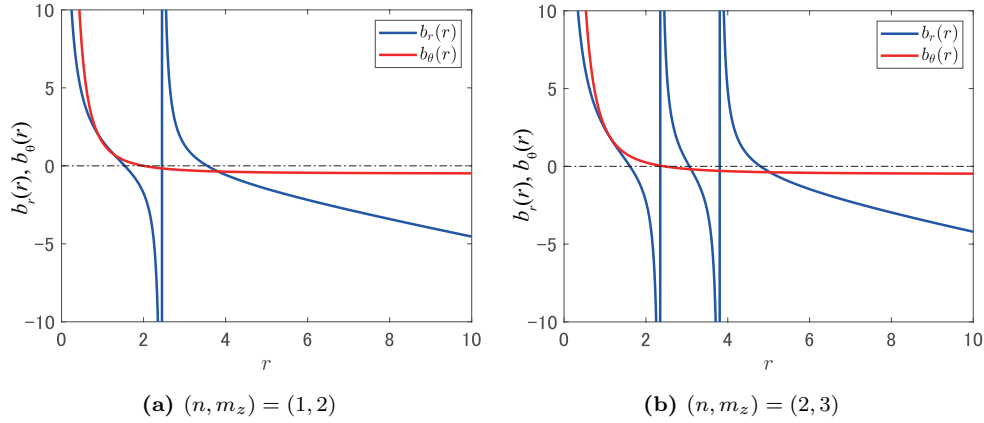


図 6.2: 式 (6.25), (6.26) から計算される速度場

一方, 式 (6.26) から計算される偏角方向成分の速度場 $b_\theta(r)$ は周辺確率密度関数 $\rho(r)$ が 0 となる付近で正負が切り替わる. 以上のことから, 電子は周辺確率密度関数 $\rho(r)$ が局所的な極大値をとる円に沿って, 時計回りまたは反時計回りに円運動すると推測できる.

図 6.3 は式 (3.45) を数値積分した結果得られた電子の軌道サンプルである. 軌道サンプル計算時に用いた初期条件は (a) では $(r_0, \theta_0) = (1.0, \pi/6), (4.0, \pi/6)$ に, (b) では $(r_0, \theta_0) = (1.0, \pi/6), (3.0, \pi/6), (5.0, \pi/6)$ にそれぞれ設定した. また, 図 6.4 は電子軌道サンプルの偏角成分 θ に関する時間変化を示している.

図 6.3 より, 電子の軌道サンプルが確率密度関数 $\rho(r)$ の極大値付近を沿うように円運動をしていることが分かる. さらに, 図 6.4 より, 軌道サンプルの回転方向が動径座標に依存していることが読み取れる. 以上より, 提案した電子の粒子モデルは Pauli 方程式から得られた波動関数により導出された確率密度関数と確率流密度にしたがって運動していることを確認できる.

図 6.5 は式 (6.28) によって得られた局所スピン $\tilde{S}_\theta(t, \vec{r})$ と式 (6.30) によって計算できるスピン角運動量の期待値 $\langle S_\theta \rangle(t)$ をプロットしている.

図 6.5 より, 局所スピン $\tilde{S}_\theta(t, \vec{r})$ とスピン角運動量の期待値 $\langle S_\theta \rangle(t)$ が一致していることを確認できる. これは, 局所スピンの期待値と等価な性質を有しているためと考えられる. また, 一般にスピンは位置と独立して定義される [16, 17]. 図 6.5 から確認できるスピン角運動量の回転と図 6.4 にみられる電子の回転運動は同期していないことが分かる. これは局所スピン $\tilde{S}_\theta(t, \vec{r})$ が位置変数 r と時間変数 t に依存する関数であるためである.

図 6.6 は式 (6.21) から計算される周辺確率密度関数 $\rho(r)$ と電子の軌道サンプルから計算した周

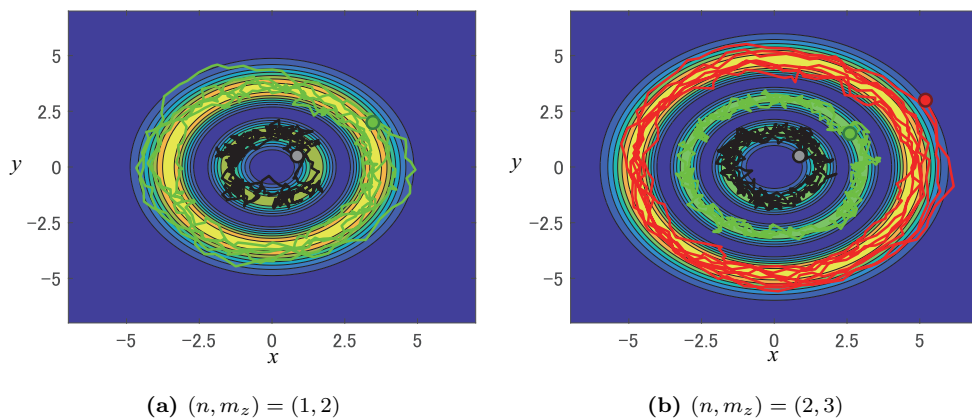


図 6.3: 電子の軌道サンプル

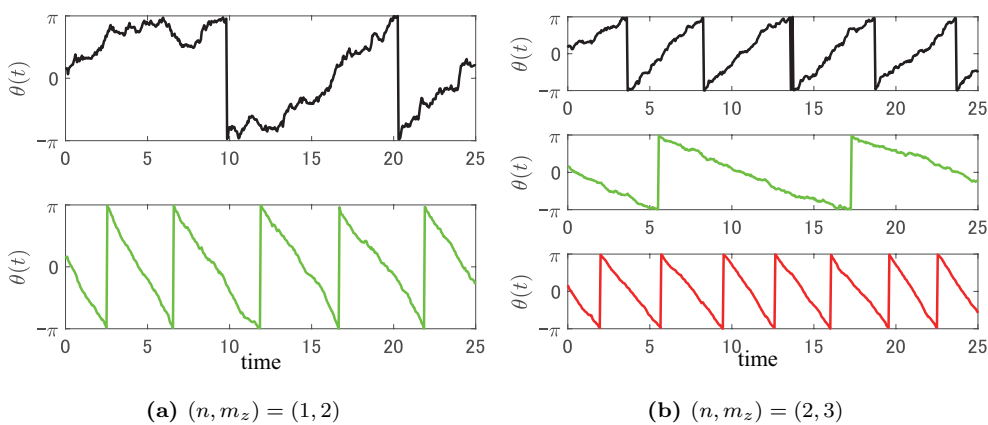


図 6.4: 電子の軌道サンプル (偏角方向)

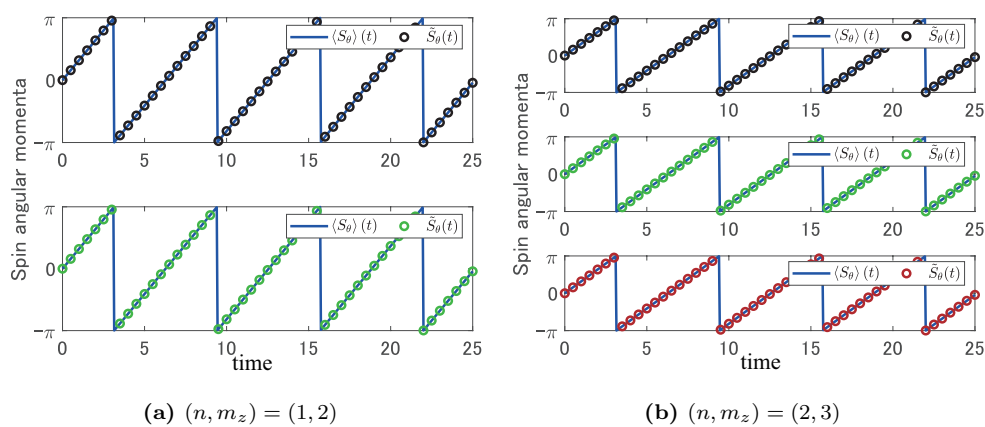


図 6.5: 電子スピン期待値の時間変化

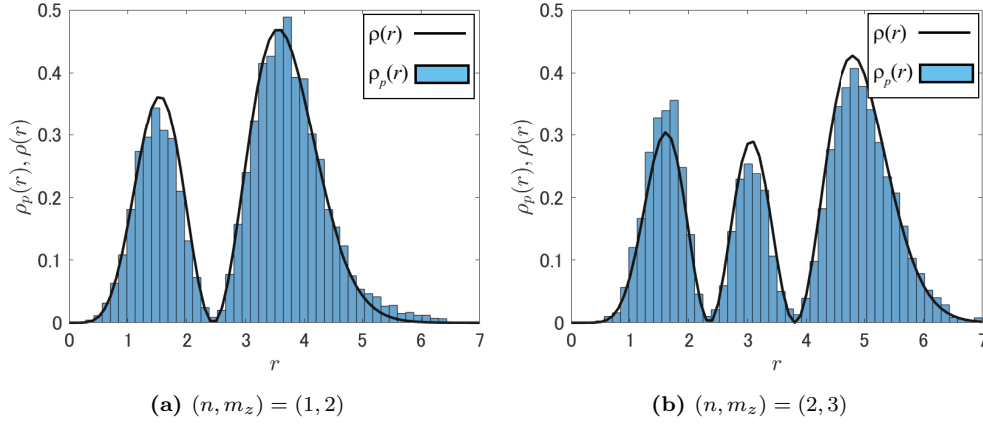


図 6.6: 波動関数から計算される確率密度関数と電子軌道サンプルから得られた確率分布のヒストグラム

表 6.1: 式 (6.31) から計算した周辺確率密度関数の誤差

(n, m_z)	(1, 2)	(2, 3)
Error	0.041	0.039

辺確率密度関数 $\rho_p(r)$ を示している．ここで、 $\rho_p(r)$ は以下にしたがって計算した．

$$\rho_p(r) = \frac{N_i(r)}{N_{\text{total}}}, \quad N_i(r) : \delta r_i \text{ に含まれるサンプル数}$$

$$\delta r_i = \left[\frac{i}{N_{\text{divide}}} r_{\text{max}}, \frac{i+1}{N_{\text{divide}}} r_{\text{max}} \right), \quad 0 \leq i < N_{\text{divide}} \quad N_{\text{divide}} : \delta r_i \text{ の数}$$

図 6.6 内にプロットした $\rho_p(r)$ は総サンプル数 N_{total} を 3000、計算した動径位置の最大値 r_{max} を 7.0、 $[0, r_{\text{max}}]$ の分割数 N_{divide} を 50 として計算した．

図 6.6 から、Pauli 方程式から導かれる周辺確率密度関数 $\rho(r)$ と電子軌道サンプルから算出した周辺確率密度関数 $\rho_p(r)$ の分布がほぼ一致していることが分かる．また、2つの分布の誤差評価を行うために以下の式に基づいて分布の差を計算した．

$$\text{Error} = \int_0^{r_{\text{max}}} |\rho(r) - \rho_p(r)| dr \quad (6.31)$$

得られた誤算結果を表 6.1 に示す．これらの結果から、提案した古典粒子モデルが Pauli 方程式から導出される統計的性質と類似した特性を持っていることが確認できる．

第7章

結論

7.1 本研究のまとめ

微細加工技術の進展により、回路の低電力・高集積化が進んでいる中、電子のマクロな性質だけでなく、ミクロな性質を積極的に活用した素子が研究、提案されている。また、量子力学的な物理量である電子のスピンを応用したスピントロニクスデバイスの研究もされ、電子の量子力学的性質を積極的に応用した素子が研究されている。一方、2030年を目標とする Beyond 5G に向けた主要技術である THz 波通信実現に向けた取り組みとして単電子受信システムの提案がなされている。そこに用いられている素子は電子の粒子性と波動性を巧みに使っており、個々の機能をシミュレーションすることは容易である。しかし、それら素子を組合せて構築されるシステムの機能をシミュレーションするには使用デバイスの電子の記述を粒子に統一する必要がある。

本論文では、電子の確率的な解釈を導入した古典粒子モデルの構築を行った。それまでにも 3.1 節に述べたように Schrödinger 方程式を満たす古典粒子モデルの提案は行われており、Heisenberg の運動方程式は物理量の期待値に関する常微分方程式もその 1 つと言える。この方程式より、物理量の期待値の時間発展が得られる。しかしながら、この手法は電子の平均的性質を見ることしかできず、トンネル効果や電子回折といった量子現象を表現できない。Bohm は新たに量子ポテンシャルと呼ばれる項を見出した。このポテンシャルによって量子力学特有の現象である電子の回折やトンネル効果を説明することができた。しかし、この方法では電子の確率的な振る舞いを表現することが不可能であった。Nelson は、不確定性原理を粒子性に取り入れるために確率微分方程式を用いて電子の運動を記述できる理論を確立した。これにより、量子粒子の不確定性を取り入れた上で軌道サンプルを計算することが可能になった。この方法は量子粒子のスピンを考慮に入れていないため、Pauli 方程式の波動関数 (スピノル) と統計的に等価な量子粒子の運動を表現することができないという問題点もあった。そこで、本論文では古典確率論において定式化されている Fokker-Planck 方程式と量子力学系の支配方程式から導出される連続の式との対応関係から微視的粒子の古典粒子モデルの構築を行った。この方法を用いることで、Pauli 方程式より記述される量子粒子であっても、その軌道サンプルを算出することが可能である。

4 章から 6 章では、古典粒子モデルによって電子の運動をシミュレーションする応用例について説明した。

4 章では、多重量子井戸に外部電場を印加した際の電子の運動を解析した。交流外部電場を印加することで電子の状態が周期的に変動する Rabi 振動と呼ばれる現象が発生する。Rabi 振動によって電子が井戸間を遷移する現象を見ることができる。この現象を波動ではなく粒子モデルを

用いてシミュレーションした。現象を力学系の解析手法、具体的には Poincaré 写像などを用いて解析した結果、粒子は外部電場に対して準周期運動をすることや、外部電場の周波数に不変な振る舞いをすることが明らかになった。このような解析は、粒子モデルを用いた系の解析結果を評価する上で重要である。

5章では、結合電子波線路について数値実験を行った。結合電子波線路は複数の量子線路を近接して配置した量子効果デバイスである。この線路上の電子の波動関数を伝搬行列によって算出し、その電子の軌道サンプルを計算した。結合電子波線路がスプリッター/カプラとして働くときの電子の振る舞いを粒子モデルを用いて表現することができた。

6章では、対称ゲージポテンシャルによる磁場印加環境下の電子の運動を解析した。Pauli 方程式の波動関数 (スピノル) から粒子モデルを構成することによって電子の軌道サンプルを計算でき、その振る舞いが古典物理学的サイクロトロン運動と同様であることを示した。また、軌道サンプルの任意の点における局所的なスピノルを計算し、その値を用いて局所スピンを計算できることを示した。

7.2 今後の課題

今後の課題としては次のようなことが考えられる。はじめに、一般的な系への適用が行えるかの検証としてスピン-軌道相互作用のある量子系の粒子モデルを構築することがあげられる。電子がもつ角運動量はスピン角運動量と軌道角運動量の2つをもち、この2つの相互作用をスピン-軌道相互作用という。この相互作用を取り入れ、より現実に即した粒子モデルを構築することが課題として考えられる。

また、スピン座標に関するモデルの考案も必要である。本論文で提案したモデルは局所スピンを計算することができたが、実際のスピン座標は2値しかとることができない。そのため、モデルから算出される局所スピンを使った電子のスピン座標の軌道計算アルゴリズムの開発が必要である。その際、いずれかのスピン座標に滞在し続ける最小時間の決定方法などを考える必要がある。

加えて、多粒子系への拡張も1つの課題である。一般に、多粒子系は粒子間相互作用が発生する。また、Pauliの排他原理により電子のスピンに制限がかかるため、これらの制約を取り入れた粒子モデルの提案・拡張が必要となる。加えて、多粒子系を考えるうえで、量子系における不可弁別性を古典系のモデルで表現する方法を考える必要がある。

参考文献

- [1] 三菱電機株式会社技術研修所編, わかりやすい半導体デバイス, 改訂 2 版, オーム社, 2001.
- [2] 榊裕之 横山直樹共編, ナノエレクトロニクス, オーム社, 2004.
- [3] 井上 敬介, “「ムーアの法則」の進化についての一考察,” 研究技術計画, vol.35, no.2, pp.263-276 2020.
- [4] 上羽弘著, 工学系のための量子力学: 量子効果ナノデバイスの基礎, 第 2 版, 森北出版, 2005.
- [5] 佐々木昭夫著/電子情報通信学会編, 量子効果半導体, 電子情報通信学会, 2000.
- [6] J. A. Del Alamo, C. C. Eugster, Q. Hu, M. R. Melloch, and M. J. Rooks, “Electron waveguide devices,” *Superlattices and microstructures*, vol. 23, no. 1, pp.121–137, 1998.
- [7] Y. Kawabata, H. Fujisaka, and T. Kamio, “Probabilistic particle modeling of quantum wave propagation with excitation and refraction,” *Proc. of 2014 IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS)*, pp.474–477, 2014.
- [8] N. Hirami, H. Fujisaka, and T. Kamio, “Probabilistic particle modeling of quantum wave propagation with reflection, transmission, and coupling,” *Proc. of 2014 IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS)*, pp.478–481, 2014.
- [9] J. R. Tucker, “Complementary digital logic based on the coulomb blockade,” *Journal of App. Phy.*, vol. 72, no. 9, pp.4399–4413, 1992.
- [10] 春山純志著, 単一電子トンネリング概論: 量子力学とナノテクノロジー, コロナ社, 2002.
- [11] S. Bandyopadhyay, M. Cahay, *Introduction to spintronics*, CRC Press, 2008.
- [12] 遠藤哲郎, 小池洋紀, 池田正二, 羽生貴弘, 大野英男, “スピントロニクスのデバイス応用,” *電子情報通信学会論文誌 C*, vol.99, no.1, pp.1-9, 2016.

- [13] M. W. Keller, J. M. Martinis, N. M. Zimmerman, and A. H. Steinbach, “Accuracy of electron counting using a 7-junction electron pump,” *App. Phy. Letters*, vol.69, no. 12, pp.1804–1806, 1996.
- [14] C. Lageweg, S. Cotofana, and S. Vassiliadis, “A linear threshold gate implementation in single electron technology,” *Proc. of IEEE Computer Society Workshop on VLSI 2001. Emerging Technologies for VLSI Systems*, pp.93–98, 2001.
- [15] J. Sato, S. Hayakawa, A. Setsuie, H. Fujisaka, and T. Kamio, “Single-electron decoder circuits for communication systems using photoelectric effect and electronwave frequency discrimination,” *Proc. of International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications*, vol.29, no. A3L-A-8, 2017.
- [16] David K.Ferry 著, 丹慶勝市 他 訳, *デバイス物理のための量子力学*, 丸善, 1996.
- [17] G. A. Parisi Mauro Fortunato, Giorgio, *Quantum mechanics*, Cambridge University Press, 2009.
- [18] D. Bohm, “A suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables. I,” *Phy. review*, vol.85, no. 2, p.166, 1952.
- [19] E. Nelson, “Derivation of the Schrödinger Equation from Newtonian Mechanics,” *Phy. review*, vol.150, no. 4, pp.1079–1085, 1966.
- [20] E.Nelson, *Quantum Fluctuation*, Princeton Univ. Press, NewJersey, 1985.
- [21] 川村嘉春著, *相対論的量子力学*, 裳華房, 2012.
- [22] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics, 2nd ed*, Springer-Verlag, 1991.
- [23] 藤坂博一著, *非平衡系の統計力学*, 産業図書, 1998.
- [24] H. Risken, *The Fokker-Planck equation: methods of solution and applications, 2nd ed.*, Springer-Verlag, 1996.
- [25] 大崎敏郎, “量子ポテンシャル理論と確率力学,” *核データニュース*, vol.76, pp.35–48, 2003.

- [26] 林久史, “波動関数のわかりやすい説明,” 日本女子大学紀要 理学部, no. 24, pp.1–12, 2016.
- [27] デイヴィス著 樺沢宇紀訳, 低次元半導体の物理, シュプリンガー・フェアラーク東京, 2004.
- [28] R. L. Devaney, *An introduction to chaotic dynamical systems, 2nd ed*, Addison-Wesley, 1989.
- [29] M. S. Shikakhwa, S. Turgut, and N. K. Pak, “Derivation of the magnetization current from the non-relativistic Pauli equation: A comment on ‘ The quantum mechanical current of the Pauli equation ’ by Marek Nowakowski [Am. J. Phys. 67 (10), 916 (1999)],” American Journal of Phy. , vol.79, no. 11, pp.1177–1179, 2011.
- [30] P. E. de Brito and H. N. Nazareno, “Particle in a uniform magnetic field under the symmetric gauge: the eigenfunctions and the time evolution of wave packets,” European Journal of Phy. , vol.28, no. 1, pp.9-22, 2006.

謝辞

本研究を行うにあたり、終始適切なお指導、ご助言をくださり、また主査を引き受けてくださった藤坂尚登教授に感謝いたします。また、副査を引き受けてくださり、数々の貴重なご意見をくださった田中公一教授、鷹野優教授、桑田精一准教授に感謝いたします。さらに、論文をまとめるにあたり、数々の貴重なご意見、多大なご協力をいただき、稚拙な議論にも付き合っていたいた福島勝准教授、辻勝弘助教に感謝いたします。神尾武司講師には鋭い視点から様々なご助言をいただき、本研究をより充実させることができました。そして、研究を共に行い多くのアイデアを出していただいた通信・信号処理研究室の皆様方に心から御礼申し上げます。そして博士後期課程に進学する機会を与えてくださり、あらゆる面で私を支え、暖かく見守り続けてくれた家族に深く感謝いたします。最後になりましたが、本研究のみならず、私の研究生生活全てに渡りご支援いただきました皆様に感謝いたします。