

ナノデバイスにおける非線形交流応答の 非平衡グリーン関数法による解析

笹岡健二¹、山本 貴博²、渡邊 聰¹

1. 東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻
2. 東京理科大学工学部教養

次世代高速動作デバイスの実現に向けて

重要

メゾスコピック・ナノスケール構造体における量子輸送の理解

定常状態

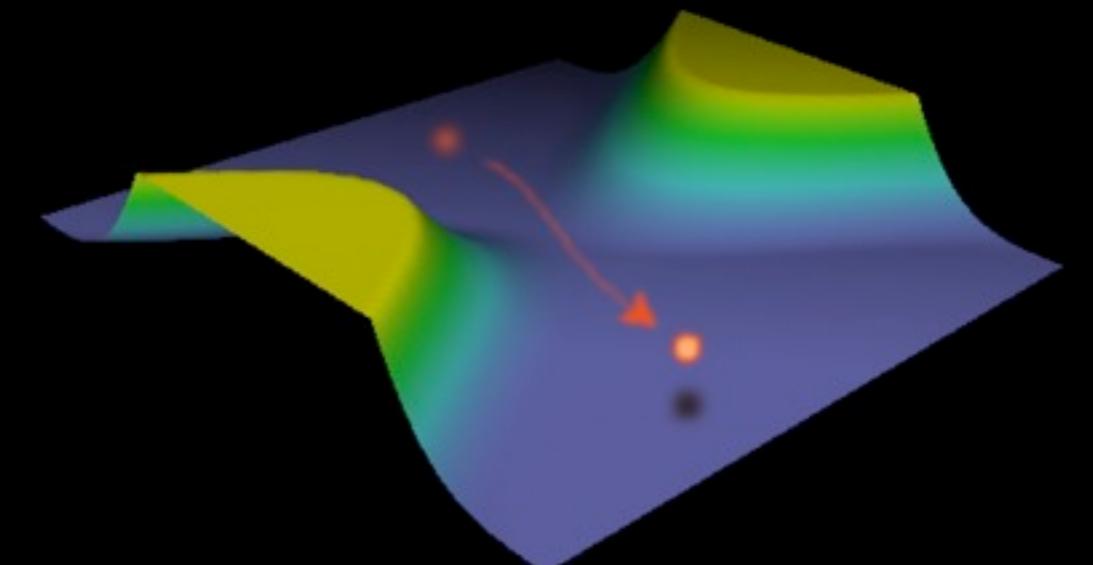
十分な基礎的な理解

理論・シミュレーションは

現実的な系の解析

実験との比較が可能

quantum point contact



非定常状態

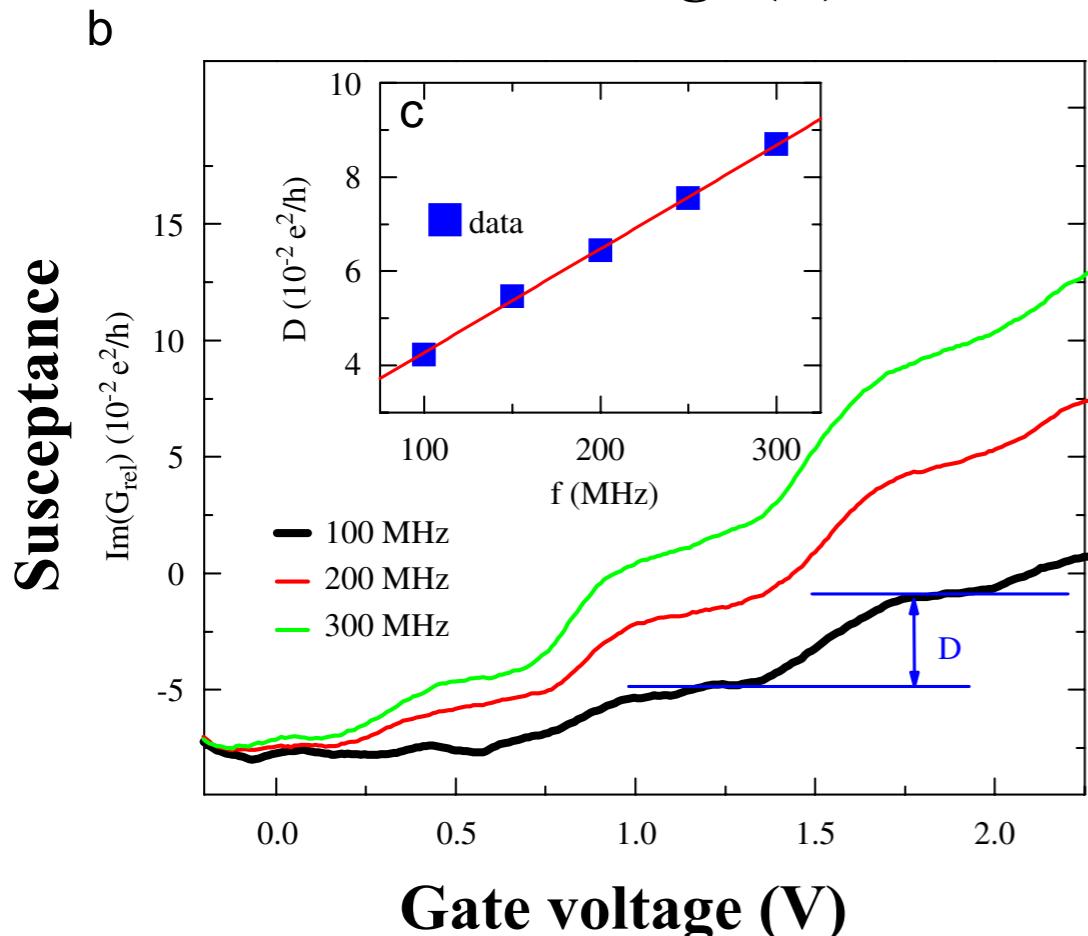
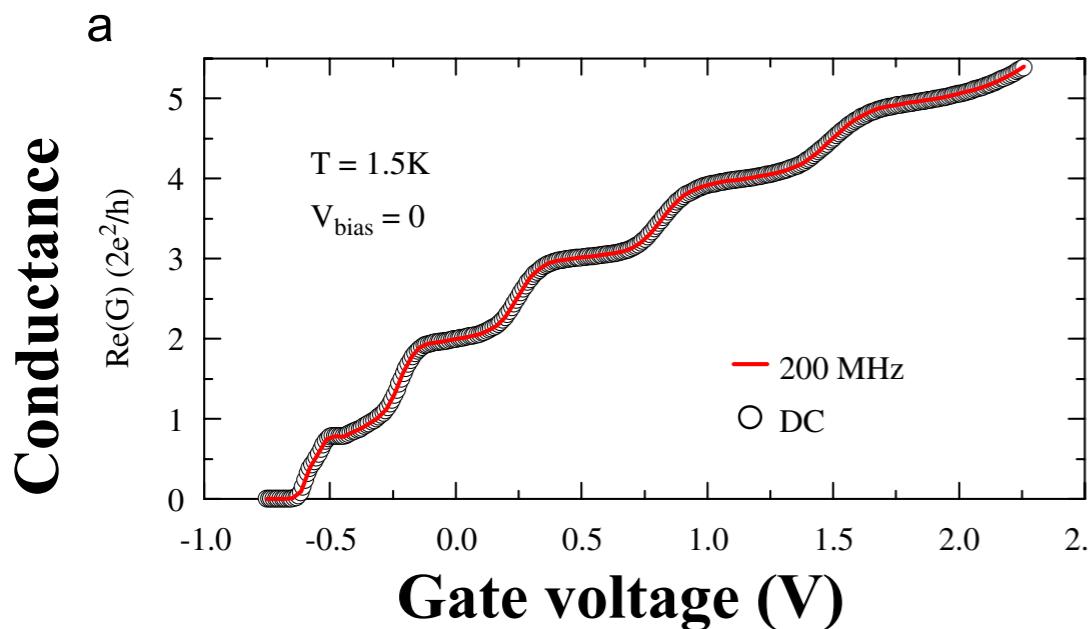
デバイス動作の速度や安定性に關係

基礎的理解は未だ不十分



近年、実験・理論の双方の立場から精力的に研究され始めている。

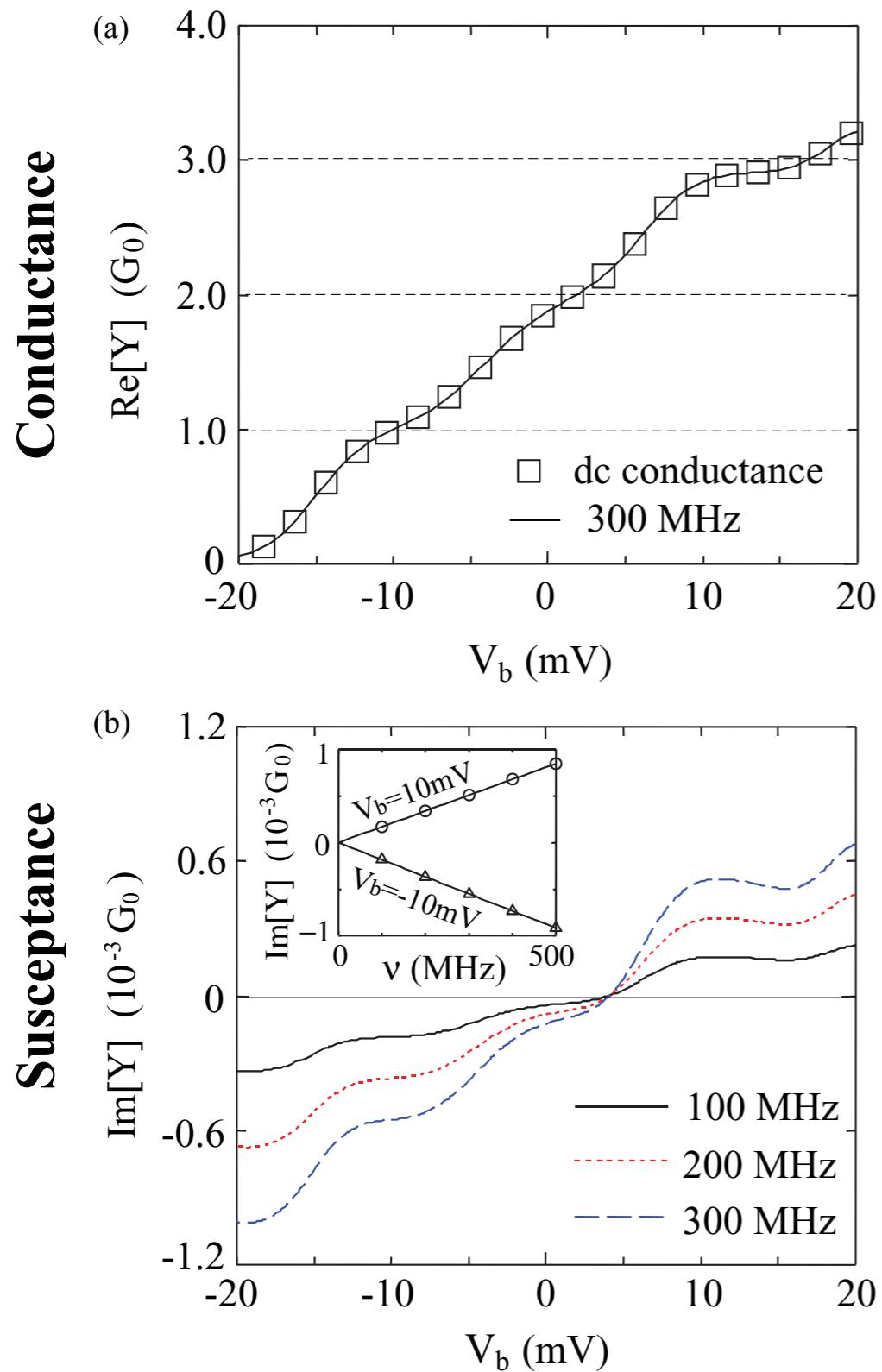
量子ポイントコンタクトにおける 交流線形応答の実験



量子ポイントコンタクト(QPC)における交流応答の実験結果 [1]

1. コンダクタンスプロトーは低ゲート電圧領域では明瞭、高電圧側で不明瞭
2. 交流周波数300MHzまでのACコンダクタンスとDCコンダクタンスがほぼ一致
3. サセプタンスはゲート電圧の変化に対して階段状に変化
4. サセプタンスの階段の高さは交流周波数に比例

量子ポイントコンタクトにおける 交流線形応答の数値シミュレーション



QPCにおける交流線形応答シミュ
レーション [1]

- 有効質量近似
- 非平衡グリーン関数(NEGF)法

我々のシミュレーション結果は実験
結果 [2] と定性的に一致

先行理論研究[3,4]は、条件

Fermi波長 \ll QPCの進行方向の長さ

を用いたため、実験で見られる特徴のい
くつかと不一致

- [1] K. Sasaoka, *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 12540 (2011).
- [2] F. Hohl, *et al.*, Physica E **40**, 1760 (2008).
- [3] T. Christen, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 143 (1996).
- [4] I. E. Aronov, *et al.*, Phys. Rev. B **58**, 9894 (1998).

研究動機

しかし、”線形”交流応答に関する研究だけではナノデバイス設計は不可！

デバイス動作に誤作動を与える因子についての理解も必要

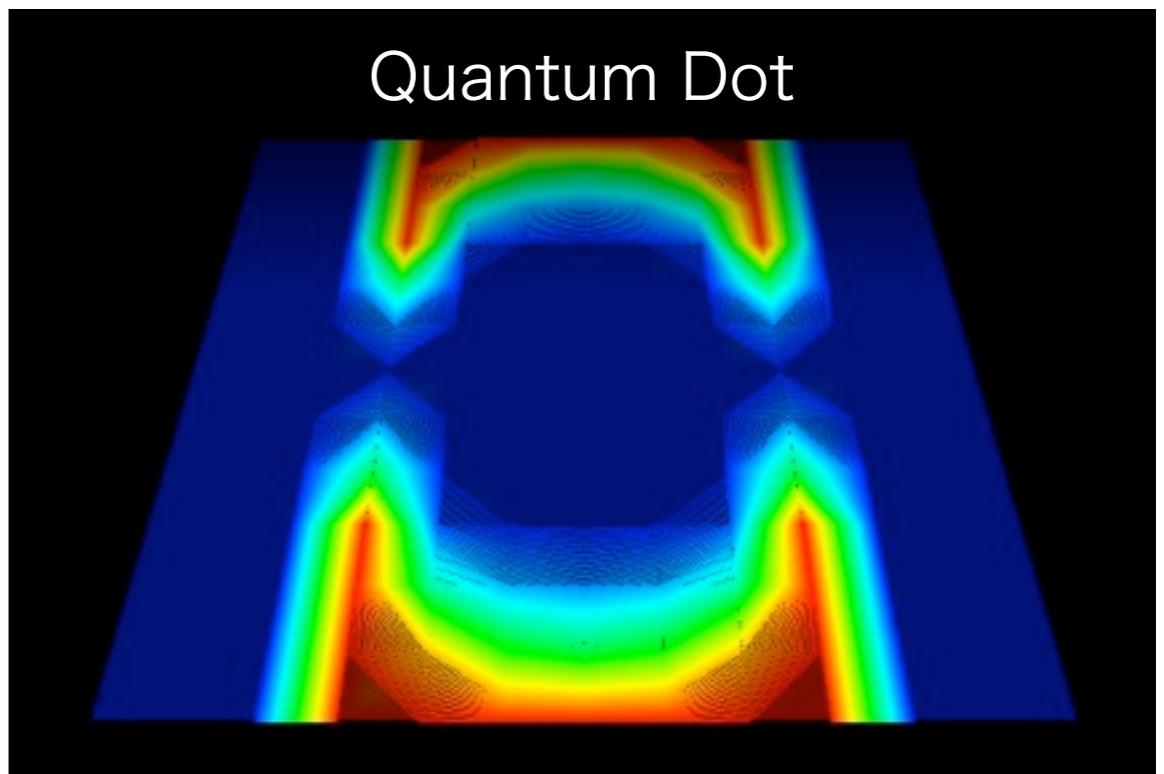
例：非線形性に起因する高次高調波、ノイズなど



非線形応答の研究はまだ僅かで、
その理解は不十分

本研究の目的

ナノ構造体における非線形応答の
基礎理解
(シンプルなモデルとして
量子ドット(QD)を選択)



計算モデル

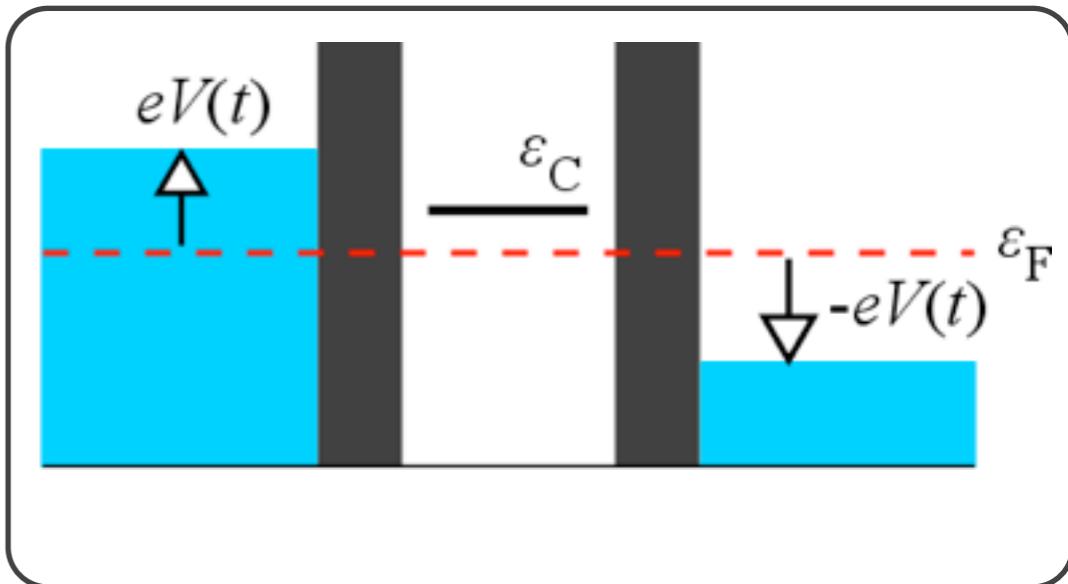
单一エネルギー準位をもつ量子ドット

- ✓ 電極によるエネルギーシフトとスピン自由度はなし
- ✓ 対称的な接触

ϵ_C : エネルギー準位 ϵ_F : Fermi 準位

$$\Gamma_L = \Gamma_R \equiv \Gamma$$

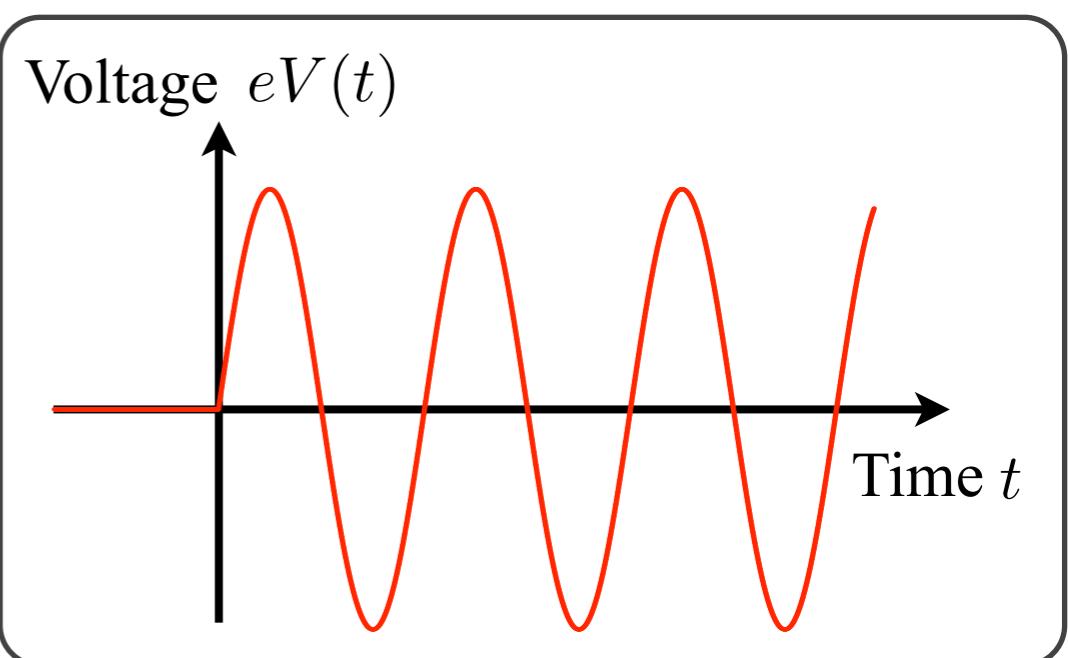
$\Gamma_{L/R}$: 左/右電極との接触強度



交流電圧

- ✓ 反対称的に印加
- ✓ 時刻 $t=0$ まで QD は平衡状態

$$eV(t) = eV^L(t) = -eV^R(t) = \frac{eV_0}{2} \theta(t) \sin \omega_0 t$$



非平衡グリーン関数法

線形応答の表式ではなく、過渡電流に対する表式 [1,2] を使用

QDから左/右電極に流入する伝導電流

$$I^{L/R}(t) = e\Gamma \Im [G^<(t, t)] + \frac{2e}{\hbar}\Gamma \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \Im [A^{L/R}(\epsilon; t)]$$

ただし、 $A^{L/R}(\epsilon; t) = \int_{-\infty}^t dt' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\epsilon - \epsilon_C + i\Gamma) (t - t') + \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt'' eV^{L/R}(t'') \right\}$

$$G^<(t, t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{x=L,R} \Gamma \int_{-\infty}^{\epsilon_F} |A^x(\epsilon; t)|^2$$

通常、時間積分を解析的に実行

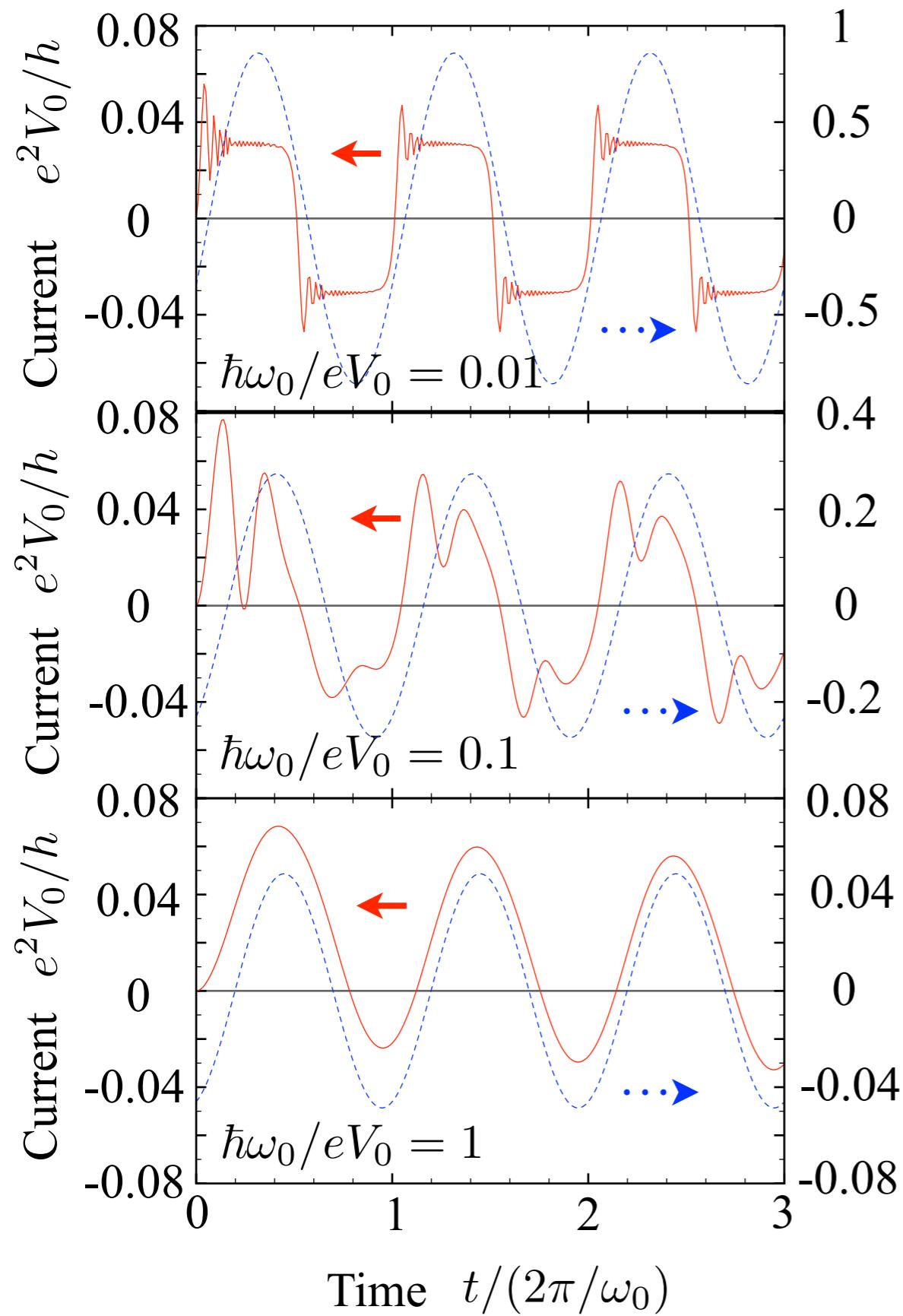
本研究では、時間依存電圧を考慮するため、この積分を数値的に実行

その他の条件 絶対零度

Wide Band Limit (WBL) 近似

- [1] Ned. S. Wingreen, *et al.*, Phys. Rev. B, **48**, 8487 (1993).
- [2] A-P. Jauho, *et al.*, Phys. Rev. B, **50**, 5528 (1994).

交流電圧スイッチング後の時間依存電流



パラメーター

$\epsilon_C/eV_0 = 0 \quad \Gamma/eV_0 = 0.01$ 弱結合領域

実線: シミュレーション結果

AC周波数が低下するにつれて

✓ 高次高調波成分が出現

✓ 電流振幅のオーダーはほぼ変化

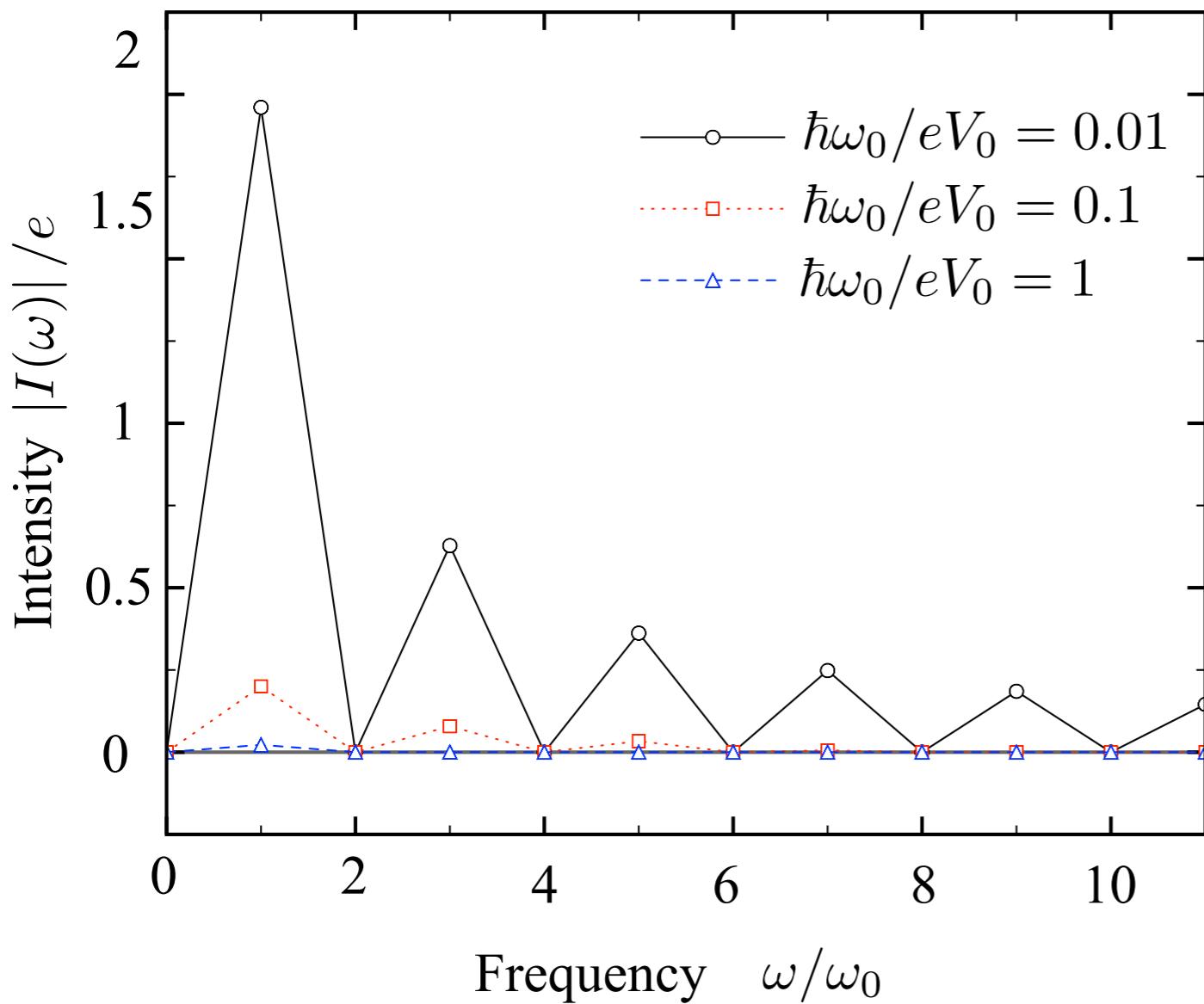
なし

↔ 破線: 線形応答からの評価

✓ 高調波成分なし

✓ 電流振幅増加(過大評価)

十分な時間経過後の電流のスペクトル



Fourier 変換

$$I(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{t_0}^{t_0+T} dt I(t) e^{-i\omega t}$$

偶数次高調波成分 なし

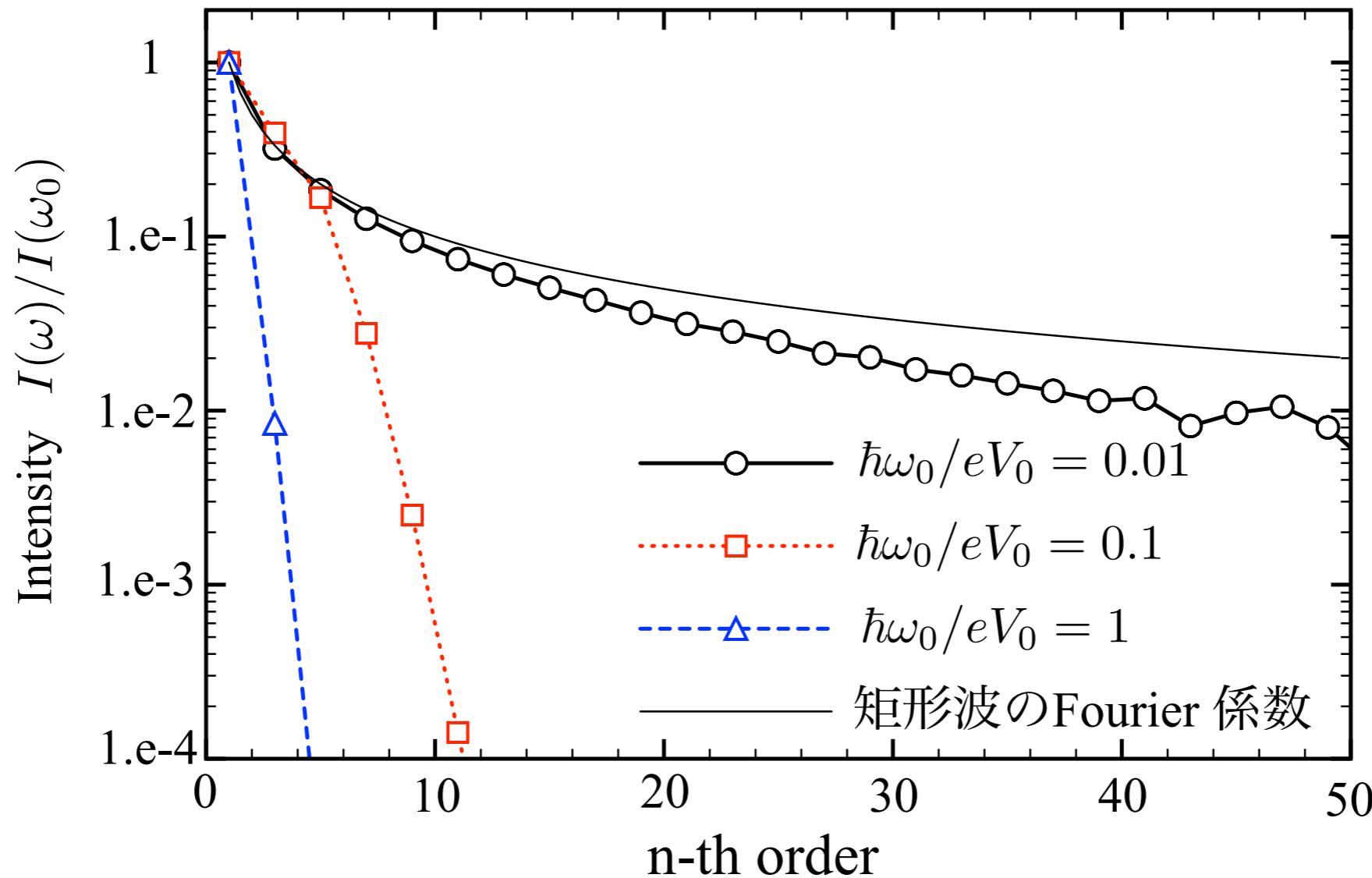
理由

- 量子ドットが対称的
- 印加電圧が反対称的

奇数次高調波成分 あり

AC振動数が低下するにつれて、増加
次数の増加に対して減少

奇数次高調波



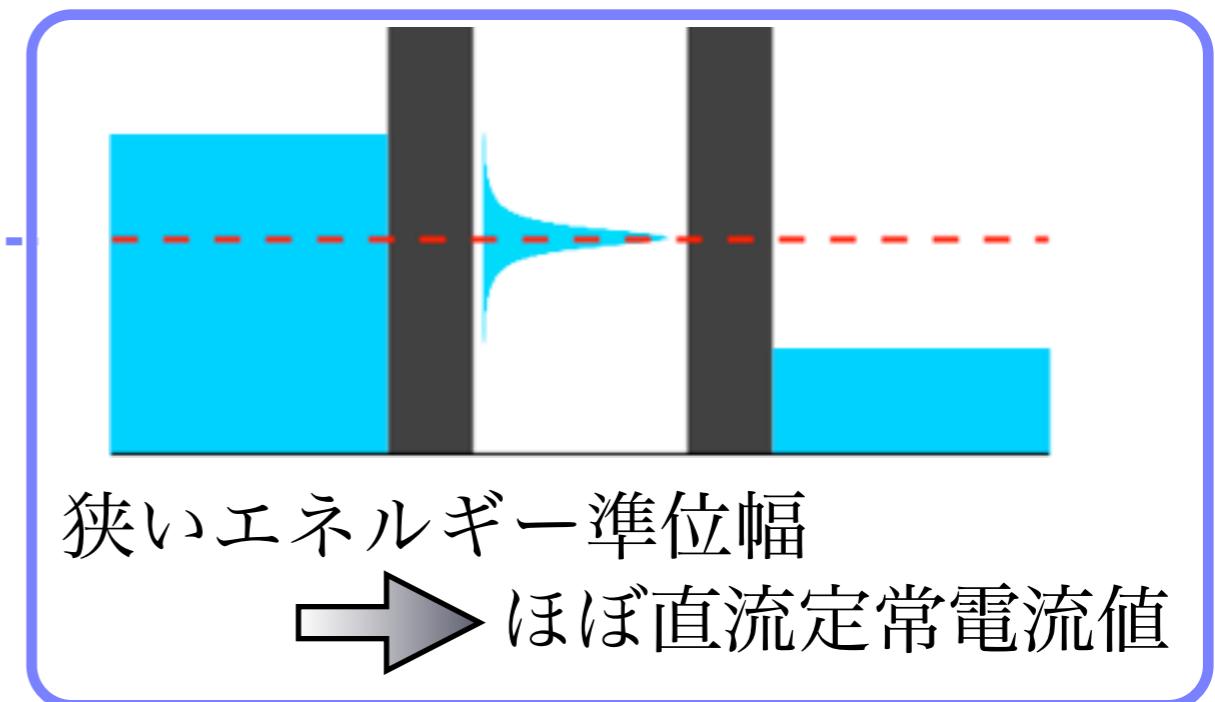
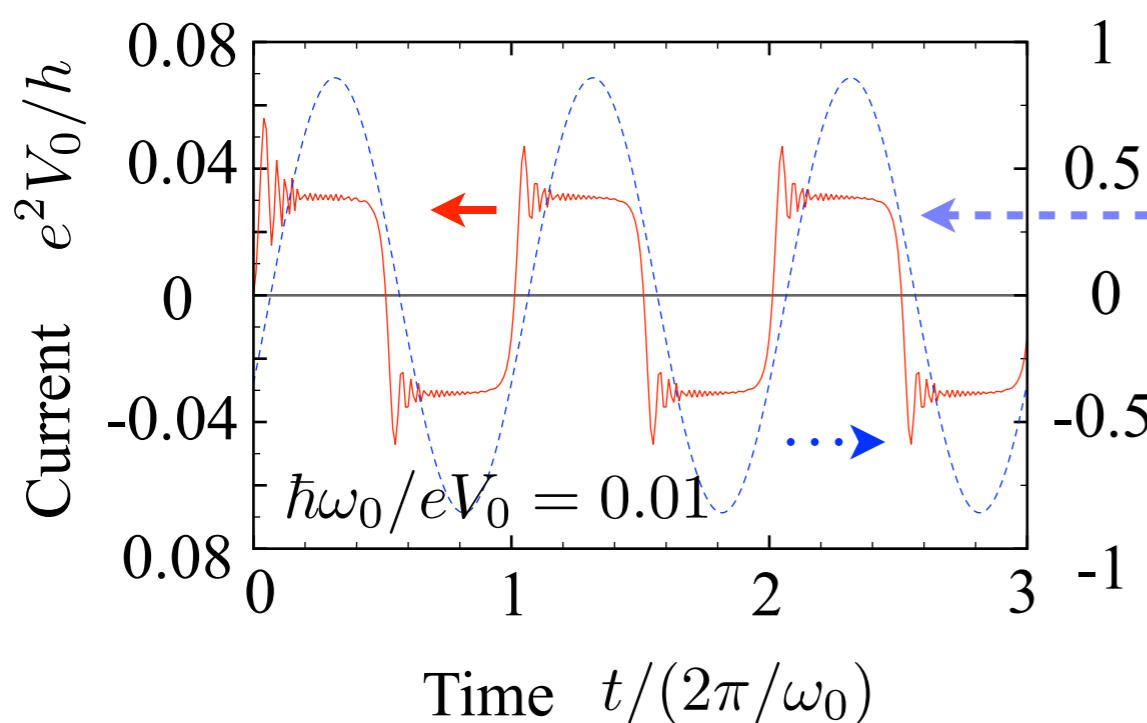
交流振動数が高い場合

高次成分は線形成分と比較して非常に小さい値 → 線形応答

交流振動数が低下するにつれて

高次成分は増加 → 3,5,7次成分の順に矩形波のFourier係数 $1/n$ に接近

交流周波数が小さい場合

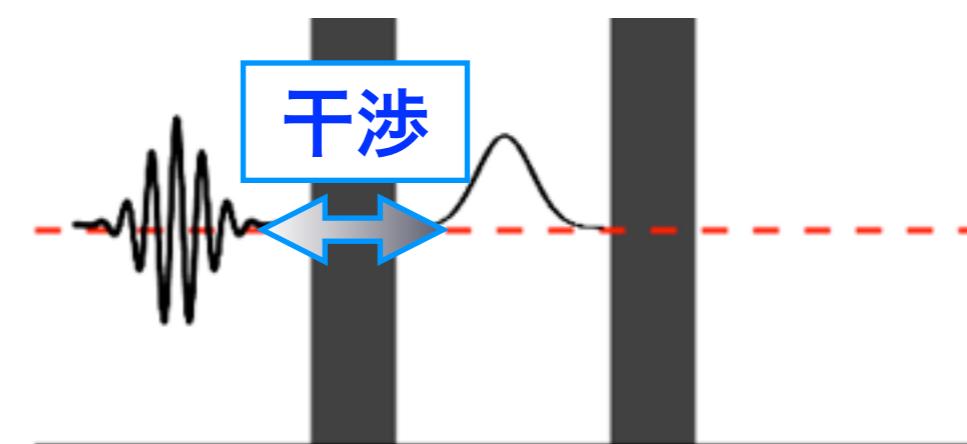


微細な電流振動 [1]

電子の往復運動 (round-trip motion)

による電流オーバーシュート

原因：電極中の波動関数と共鳴準位
中の波動関数の位相差から生じる時
間的干渉効果



[1] H. Ishii, et al., phys. stat. sol. 4, 481 (2007).

まとめ

空間対称性をもつQDにおける非線形交流応答

ただし、QDと電極の接触強度が弱い場合

振幅/周波数

小 線形応答

非線形性

- 奇数次高調波の出現
- 偶数次高調波はない

矩形波 + 微細な電流振動

電子の往復運動が起源

↓
大

断熱的な印加(定常状態を保ちつつ、
ゆっくりと変化)