

氏名(本籍)	たか だ ゆき ひろ 高 田 幸 宏 (北 海 道)			
学位の種類	博 士 (理 学)			
学位記番号	博 甲 第 6017 号			
学位授与年月日	平成 24 年 3 月 23 日			
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当			
審査研究科	数理物質科学研究科			
学位論文題目	Theoretical Study of Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nano-Structures ナノ構造体中における多電子波束ダイナミクスの理論的研究			
主査	筑波大学教授	理学博士	白 石 賢 二	
副査	筑波大学教授	工学博士	初 貝 安 弘	
副査	筑波大学教授	Ph.D.	佐 野 伸 行	
副査	筑波大学教授	博士(理学)	野 村 晋 太 郎	
副査	日本電信電話株式会社 物性科学基礎研究所部長	博士(学術)	都 倉 康 弘	

論 文 の 内 容 の 要 旨

本論文は、多電子波束ダイナミクスというこれまで用いられてこなかったアプローチによってナノ構造体中の電子輸送における電子間相互作用の影響を理論的に明らかにすることを目的とした。

電子輸送の物理は、①ドルーデモデルに代表される古典的な手法、②ランダウアー公式で代表される量子力学的な手法、の2つの立場からこれまで精力的に研究されてきた。しかしながら、これら2つの立場の間をつなぐ領域はほとんど研究が行われていない。そのため本論文では、古典および量子力学的な性質を併せ持った電子波束を用いて、古典・量子クロスオーバー領域での電子輸送を考察した。

一方で、低次元ナノ構造体中での電子輸送において電子間相互作用の重要性が指摘されている。Krivchenkoらは低電子密度のシリコンMOSFETを用いた実験において、電子間相互作用の効果によって温度の低下とともに金属-絶縁体転移が起こることを報告している。これらの結果は、1次元および2次元の系において電子波動関数が常に局在すると提案したAbrahamsらのスケーリング理論の結果と本質的に異なる結果であり、この現象を説明する十分な理論的な枠組みは得られていない。さらに、室温動作するMOSFET中での電子輸送においても電子間相互作用が極めて重要な役割を果たすことをSanoらが3次元モンテカルロ法によるシミュレーションによって明らかにしている。以上のような研究は、ナノ構造体中での電子輸送において多体効果を取り込んだ解析が本質的に重要であることを示している。

また、波束ダイナミクスによる研究は、これまで電子励起、トンネル、キャリア輸送と様々な領域で行われてきた。しかしながら、これまでの研究は一体の電子波束を用いており、本研究で行う多体効果を取り入れた多電子波束による解析はほとんど行われていないのが現状である。多体効果を取り入れた多電子波束の解析としては、初貝らによる量子拡散のシミュレーションが報告されているが、彼らの研究は拡散過程の解明を目的としており、電子輸送における多体効果を取り入れた多電子波束による解析は殆ど未踏の状態である。

このような考察から、本研究では1次元系において時間依存ハートリーフォック方程式および時間依存の多体のシュレディンガー方程式を直接数値的に解くことによって、多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の影響を検討した。その結果、系の次元性に依らず電子波束の崩壊が電子間相互作用の効果により強く抑制されることがわかった。これは、電子間相互作用の効果に依って電子が粒子的な性質を保ったまま輸送されることを示唆する結果である。また、速度を持った波束が崩れにくいことを解析的及び数値的に示したことも評価される結果である。

また、純粋な一次元系においては、電子波束はポテンシャル障壁によって閉じ込められるが、y方向に幅を持った系（擬一次元系）においては、電子波束が幾何学的な特徴を生かしてポテンシャル障壁を避けるようにしてプロパゲートできること示した。擬一次元系においても電子波束の寿命が電子間相互作用によって延伸される結果は一次元系とほぼ同じである。

さらに、本論文は、電子間相互作用が電界中での電子の振舞を著しく変調することも明らかにした。電界下の輸送としてよく知られているブロッホ振動の周期が電子間相互作用によって大きく延び、実効的には電子間相互作用によって有効質量が重くなることを明らかにした。

以上の結果は、平均場近似であるハートリーフォック近似と多電子波動関数を直接扱う手法の双方で同様に見出されることも注意深く検討している。この注意深い検討は、ハートリーフォック近似を中心に考察を進めている本論文の結果の正当性を示すものである。

このように本論文で得られた多くの結果より、多電子波束ダイナミクスが電子輸送における多体効果の重要性を明らかにするための新たなツールとなることを示すとともに、ナノ構造中の電子輸送における電子間相互作用の重要性を明らかにするという世界的にみても高い学術的内容を有していると考えられる。

審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文は、これまで殆ど未踏状態であった、多体効果を取り込んだ電子波束ダイナミクスという領域に果敢に挑んだ野心的な研究である。さらに電子波束ダイナミクスにおいて、電子間相互作用が大きな役割を果たすことを明らかにしている。具体的には、電子間相互作用に起因する波束の寿命の延伸、ブロッホ振動の周期の大きな変調等、多体効果に起因する新しい知見が得られており、新しい学問分野に発展することも予感させる優れた研究成果である。以上のように新規に見いだされた計算結果が十分に議論され、本論文は博士（理学）に相当するものである。

平成24年2月14日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。