一次元波動方程式の回路モデル

信号処理研究分野　鈴木正清，真田博文，永井信夫

波数の 2 乗がエネルギーの実有理関数で表現される $E-k$ 関係が，確率保存則を満たす一様な連続体モデルを持つための必要十分条件は，無損失分布定数回路モデルが存在することであることを示した．また，与えられた $E-k$ 関係を満たす波動方程式の一つが，モデルとなる回路網を合成することにより，回路方程式として導かれることを示した．さらに，非放物形の $E-k$ 特性を表現する一つのモデルを回路表現から導いた．

1　はじめに

電子の挙動を記述する方程式には，Newton 力学系の波動方程式としての Schrödinger の波動方程式，相対論的力学系に対応した Dirac 方程式，さらに，固体内部の Γ 点近傍での電子の挙動を記述する有効質量近似 Schrödinger 方程式 [1]，近似精度がより高い 2 バンドモデル [2, 3] および 3 バンドモデルの方程式 [4] 等がある．後者の 3 方程式は，いずれも波動関数そのものに対する方程式ではなく，Bloch 関数で表される波動関数の係数あるいは正規直交基底による展開係数に対する方程式であり，電子波の包絡成分に対する一様な連続体モデルと捉えられる．

電子波の $E-k$ 関係は，物質の 3 次元的なポテンシャル構造中の電子の量子論的振舞いから導かれるものではあるが，多重バリア構造における共鳴トンネル現象や Interband Resonant Tunneling 等の現象を記述する上では，有効質量近似 Schrödinger 方程式や 2 バンドモデルおよび 3 バンドモデルの等の一様な連続体モデルが有効である [8].

近年，期待を集めている量子効果デバイスの設計には，固体中の電子の挙動を体系的に把握することが必要と考えられ，回路網理論を応用する試みがなされている [5]-[8]．これまでに，多重バリア構造における共鳴トンネル現象が，インピーダンス整合と等価であることが明らかにされている [5]．また，波動関数の時間域発展を記述するディジタルフィルタモデルが，回路表現から導かれている [6].

本文では，次の結論を導く．波数の 2 乗がエネルギーの実有理関数で表現される $E-k$ 関係が，確率保存則を満たす一様な連続体モデルを持つための必要十分条件は，等価な無損失分布定数回路が存在することである．また，与えられた $E-k$ 関係を満たす波動方程式の一つが，等価回路の回路方程式として導かれることを示す．

本文で得られる波動方程式の回路モデルに基づけば，非放物形の $E-k$ 特性を表現するものとして，より柔軟なモデルが得られることを示す．

2　波動方程式と分布定数回路

本章では，波動方程式と回路モデルの間の対応関係を得るための規則を導く．ただし，空間的に一次元の場合のみを扱う．

2.1　無損失回路

ある回路素子に流れ込む複素数値電流を $i(t)$，両端の複素数値電圧を $v(t)$ とし，この素子で消費される瞬時電力を

$$p_i(t)=\mathrm{Re}\{v(t)i^*(t)\} \tag{1}$$

で定義する．$\mathrm{Re}\{\}$ は複素数の実部を，肩付けの $*$ は複素共役を表す．この定義は，実数値の電圧，電流と両立する．

複素数値の電圧，電流を持つ回路は，通常の回路素子に加えて，虚数抵抗 [7] を用いて構成される．虚数抵抗は無損失である．以下では，複素数値電圧，複素数値電流を持つ無損失回路を取り扱う．

2.2 基本的対応関係

波動関数の正規直交基底による展開係数は，電子波の確率保存則に対応して展開係数の二乗総和一定となるので，これらの展開係数に対しても保存則が成り立つ．

無損失な分布定数回路における保存量はエネルギーである．回路中のエネルギーは，インダクタンスあるいはキャパシタンスにのみ蓄えられる．微小等価回路に含まれるインダクタンス $L(x)\Delta x$ および キャパシタンス $C(x)\Delta x$ に蓄えられるエネルギー密度は，

$$\frac{1}{2}L(x)|i_L(x,t)|^2, \quad \frac{1}{2}C(x)|v_C(x,t)|^2 \tag{2}$$

で与えられる．$i_L(x,t)$ は $L(x)\Delta x$ を流れる電流であり，$v_C(x,t)$ は $C(x)\Delta x$ の両端の電圧である．インダクタンスでは $\sqrt{L(x)/2}\cdot i_L(x,t)$ を，キャパシタンスでは $\sqrt{C(x)/2}\cdot v_C(x,t)$ を波動関数に対応させれば，回路のエネルギー密度が量子論の確率密度に対応する．

本文では，一様な連続体モデルを取り扱うため，Hamiltonian は運動量のみの関数であり，エネルギー固有状態を表す波動関数は，$e^{j(kx-\omega t)}$ である．一方，回路理論では周波数 ω の定常状態は，関数 $e^{j(\omega t-kx)}$，あるいは $e^{st-\gamma x}$ を用いて表現される．s は Laplace 変換における複素周波数変数，γ は伝搬定数である．以下では回路理論の表現に従うものとする．この表現は，量子論の位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ に対する基本的原理の要請である交換関係

$$\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}=j\hbar \quad \text{を} \quad \hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}=-j\hbar$$

で置き換えることに相当する．またエネルギー E，運動量 p は，それぞれ次式で対応付けられる．

$$E=\hbar\omega \to -j\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p=\hbar k \to j\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{3}$$

3 確率保存則を満たす E−k 関係

次の形式で表現される $E-k$ 関係について考える．

$$k^2=K(E)=\frac{B(E)}{A(E)} \tag{4}$$

$K(E)$ は E の実係数有理関数

確率保存則が成り立つ系では，任意の波数 k に対して，エネルギー固有方程式が方程式の次数と同一個数の実数値解を持たなければならない．

定理 1 任意の波数 k に対して，式(4) の E の解の全てが実数ならば，一位の零点と一位の極が拡張実数軸上で交互に現れる適当な二つの実係数有理関数 $K_1(E)$，$K_2(E)$ が存在し，$K(E)$ は，

$$K(E)=K_1(E)K_2(E) \tag{5}$$

と表される．また

$$\mathrm{sign}\{\frac{dK_1(E)}{dE}\}=\mathrm{sign}\{\frac{dK_2(E)}{dE}\} \tag{6}$$

が成り立つ．

定理 1 は，k^2 を 0 から ∞ に変化させるときの E の解軌跡が $K(E)$ の零点から始まり $K(E)$ の極に終ること，及び解軌跡は互いに交差しないことから証明される．

式(6) を満たす $K_1(E)$, $K_2(E)$ は一般性を失わずに「導関数は正」が仮定できる．このような $K_1(E)$, $K_2(E)$ を用いて，

$$\begin{aligned} Z(j\omega) &= jK_1(\hbar\omega) \quad (7)\\ Y(j\omega) &= jK_2(\hbar\omega) \quad (8)\end{aligned}$$

を定義すれば，$Z(s)$, $Y(s)$ はリアクタンス関数となる．$Z(s)$, $Y(s)$ をそれぞれインピーダンス関数及びアドミタンス関数と見なして，微小区間等価回路が図 1 で表される分布定数回路を考える．

図 1 の線路上の電圧 $v(x,t)$，電流 $i(x,t)$ の Fourier 変換を $V(x,j\omega)$，$I(x,j\omega)$ とすると，線路の基本方程式は次式で表される．

$$\left.\begin{aligned} -\frac{dV(x,j\omega)}{dx} &= Z(x,j\omega)I(x,j\omega)\\ -\frac{dI(x,j\omega)}{dx} &= Y(x,j\omega)V(x,j\omega)\end{aligned}\right. \tag{9}$$

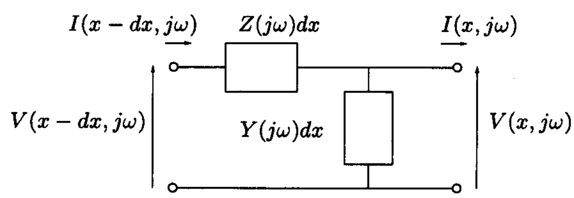


図 1. 単一線路モデルの微小区間等価回路.

回路の定常状態を考えれば，次の分散関係が得られる．

$$k^2 = -Z(j\omega)Y(j\omega) \tag{10}$$
$$= K_1(\hbar\omega)K_2(\hbar\omega) = K(\hbar\omega) \tag{11}$$

以上より，式 (4) が確率保存則を満たすならば，これの回路モデルが図 1 で与えられ，また逆に図 1 をモデルに持つ $E-k$ 関係は，回路の無損失性より確率保存則を満たす．すなわち次のことが示された．

定理 2 波数の 2 乗がエネルギーの実有理関数で表現される $E-k$ 関係が，確率保存則を満たす一様な連続体モデルを持つための必要十分条件は，$E-k$ 関係に対して無損失分布定数回路モデルが存在することである．

波動方程式は $Z(s)$, $Y(s)$ を回路素子を用いて合成し，回路の内部状態を記述する連立偏微分方程式を導くことによって求められる．

線路の回路方程式は，一般に次の形式で表現される．

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{G}_{11}(jk) & \boldsymbol{G}_{12}(jk) & \boldsymbol{G}_{13}(jk) \\ \boldsymbol{G}_{21}(jk) & \boldsymbol{G}_{22}(jk) & \boldsymbol{G}_{23}(jk) \\ \boldsymbol{G}_{31}(jk) & \boldsymbol{G}_{32}(jk) & \boldsymbol{G}_{33}(jk) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \boldsymbol{\phi}_1 \\ (s\boldsymbol{D}_2 + j\boldsymbol{F}_2)\boldsymbol{\phi}_2 \\ \boldsymbol{\phi}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{\phi}_1 \\ \boldsymbol{\phi}_2 \\ \mathbf{o} \end{bmatrix} \tag{12}$$

ここに，$\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2$ は，L または C を含む枝の電流あるいは電圧を表す．$\boldsymbol{\phi}_3$ は L も C も含まない枝の電圧あるいは電流を表し，蓄積するエネルギー (確率) に無関係であるので，補助的波動関数と捉えるものとする．$\boldsymbol{\phi}_3$ を消去し，空間演算子 $p=\hbar k$ と時間演算子 s を分離し，更に素子値で規格化すれば，次の形の波動方程式が得られる．

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{\psi}(x,t) = -j\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi}(x,t) \tag{13}$$

点 x における回路のエネルギー密度を $\rho(x,t)$ とし，点 x を単位時間に通過するエネルギー流を $S(x,t)$ とすれば，回路の無損失性より，

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial S(x,t)}{\partial x} \tag{14}$$

が成り立つ．$S(x,t)$ は確率流密度はエネルギー流に対応し，図 1 中の $i(x,t)$, $v(x,t)$ を用いて表せば，

$$S(x,t) = \mathrm{Re}\{v(x,t)i^*(x,t)\} \tag{15}$$

で与えられる．

4 非放物形 $E-k$ 特性のモデル

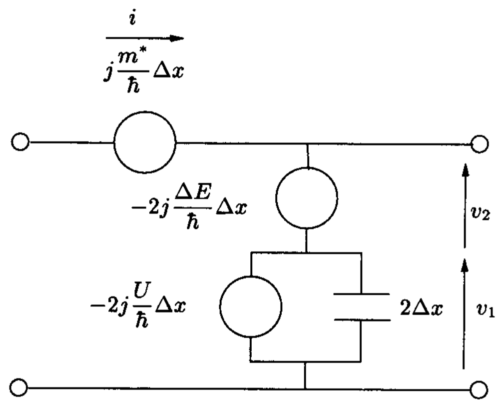
図 2(a) に非放物形 $E-k$ 関係を与える単一線路モデルを示す．このモデルの $E-k$ 関係は，

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m^*} = \Delta E\frac{E-U}{(U+\Delta E)-E} \tag{16}$$

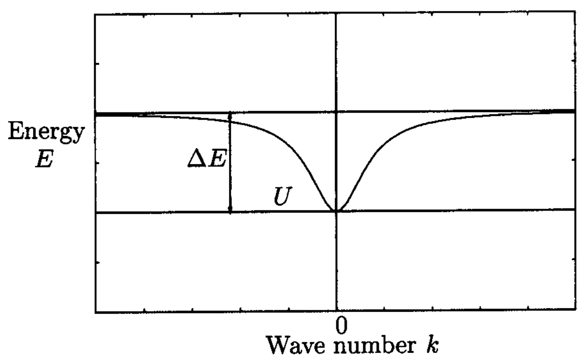
であり，図 2(b) の特性を持つ．m^* は $k=0$ における有効質量

$$m^* = \left\{\frac{\partial^2 E}{\hbar^2\partial k^2}\right\}^{-1} \tag{17}$$

に対応する．補助的波動関数を含む波動方程式は



(a) 微小区間 Δx の等価回路



(b) $E-k$ 関係

図 2. 非放物形 $E-k$ 関係のモデル．

$$
\begin{bmatrix} 2U & 0 & j\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 2\Delta E & j\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} \\ j\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} & j\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} & -m^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1(x,t) \\ v_2(x,t) \\ i(x,t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -j\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}v_1(x,t) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (18)
$$

で与えられる．2 つの補助的波動関数 $v_2(x,t)$, $i(x,t)$ を消去すれば，$v_1(x,t)$ の波動方程式が得られる．

このモデルは，$\Delta E \rightarrow \infty$ のとき有効質量近似Schrödinger 波動方程式に一致する．また，$E-k$ 曲線は $k=0$ から k の増加にともなって，$\partial^2 E/\hbar^2\partial k^2$ が減少し，偏極点を境に符号が逆転する．一方 2 バンドモデルでは，k の増加に従い，$E-k$ 関係は直線に漸近し偏極点はない．GaAs や InP 等の $E-k$ 関係ではΓ 点から X 点に向かう方向で k が増加するとき，$E-k$ 関係は放物形から直線的になり，さらに k が増加すれば偏極点を向かえる．従って，提案モデルは 2 バンドモデルよりも広い k の範囲での近似が成り立つものと考えられる．$E-k$ 曲線上の偏極点の位置は，次式で与えられる．

$$
k^2 = \frac{2}{3}m^*\Delta E, \qquad E = \frac{\Delta E}{4} \qquad (19)
$$

5 むすび

本文では，一次元波動方程式のより一般的な回路モデルについて考察し，波数の 2 乗がエネルギーの実有理関数で表現される $E-k$ 関係に対応して，確率保存則を満たす一様媒質の波動方程式モデルが存在するための必要十分条件は，$E-k$ 関係に対して無損失分布定数回路モデルが存在することであることを示した．また，与えられた $E-k$ 関係を満たす波動方程式の一つが，モデルとなる回路網を合成することにより，回路方程式として導かれることを示した．

本文で得られる波動方程式の回路モデルに基づけば，非放物形の $E-k$ 特性を表現する一つのモデルが得られることを示した．

[参考文献]

[1] 御子柴宣夫: "半導体の物理," 培風館, 1995.

[2] Pereng-fei Yuh and K. L. Wang: "Formalism of the Kronig-Penney model for superlattices of variable basis," Phys. Rev. B,**38**, 18, pp.13307–13315, Dec. 1988.

[3] Rui Q. Yang and J. M. Xu: "Analysis of transmission in polytype interband tunneling heterostrucures," J. Appl. Phys., **72**, 10, pp. 4714–4726, Nov. 1992.

[4] M. H. Liu, Y. H. Wang, and M. P. Houng: "Carrier transport in InAs/AlSb/GaSb interband tunneling structures," J. Appl. Phys.,**74**,10, pp.6222-6226, Nov. 1993.

[5] 大谷直毅, 永井信夫, 鈴木正清, 三木信弘: " 複素等価回路による量子効果現象の定式化 ," 信学論(C-I),**J73-C-I**, 11, pp.683-689, Nov. 1990.

[6] M. Suzuki, N. Ohtani, N. Nagai, and N. Miki: "A complex-valued wave digital filter which simulates time evolution of one-dimensional electron," The 3rd Asia-Pasific Microwave Conference Proceedings, Tokyo, Japan, APMC90, pp.359–362, Sep. 1990.

[7] Belevitch V. : "Classical Network Theory," Holden-Day (1968).

[8] 真田博文, 鈴木正清, 永井信夫: "Kane モデルで記述される量子力学系の複素等価回路表示," 信学技法, **CAS97**-14, pp.99-106, June 1997.