

人工原子における多電子波動関数の節構造

(日大理工) ○佐甲徳栄

【序】近年半導体微細加工技術の進歩により、少数の電子をナノスケールの低次元空間に拘束することが可能となった。このようなシステムは、系のサイズの有限性により原子様の不連続なエネルギー構造を持ち、フントの規則を満たすことから「人工原子」とも呼ばれ、新奇な物性を示す少数多体系として近年大きな注目を集めている。人工原子においては、電子間相互作用の効果が系のサイズに応じて大きく変化をするために、エネルギー準位構造は、閉じ込めの強さの関数として複雑に変化をすることが知られている [1]。最近我々は、この多様な人工原子のエネルギー準位構造を理解することを目的として、擬 1 次元ガウス型ポテンシャル中に拘束された 2 電子系の量子化学計算を行い、波動関数の節構造に基づく解析を行った。その結果、(i)人工原子のエネルギー準位は、波動関数の節の数によって定義されるポリヤッド量子数 [2] を用いて分類できること、そして、(ii)閉じ込めポテンシャルの非調和性が大きい場合には、人工原子内の 2 電子の運動は、お互いに非結合化した局在振動をすることが示されている [3]。本研究では、この 2 電子系での計算を 3 電子以上に拡張することによって、人工原子のエネルギー構造を統一的に理解することを目指した。

【理論モデルおよび計算方法】本研究で用いたハミルトニアンを以下に示す：

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right] + \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \omega_{xy}^2 (x_i^2 + y_i^2) - D \exp\left(-\frac{\omega_z^2}{2D} z_i^2 \right) \right] + \sum_{i>j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (1)$$

式(1)において $\omega_{xy} \gg \omega_z$ の場合には、電子は xy 方向に非常に強く束縛されるために、低エネルギー領域における電子の運動は z 方向のみに限定される。すなわちこの場合には、式(1)は擬 1 次元ガウスポテンシャル中に拘束された電子のハミルトニアンを与える。このモデルを用いて、閉じ込めの強さを表す ω_z を変化させて、 $N=3$ および 4 の場合について、エネルギースペクトルおよび波動関数を配置間相互作用法によって計算した。また、 xy 方向に収縮し z 方向に広がりを持つ非等方な電子分布を表現するために、非等方ガウス型関数を基底関数として用いた [4]。

【エネルギースペクトルと波動関数】人工原子のエネルギー構造は、1 電子エネルギー E_1 と 2 電子エネルギー E_2 の相対的な大小関係に従って大きく変化する [1]。本研究のモデルにおいては、 E_1 と E_2 は、 z 方向の閉じ込めの強さ ω_z に関して、それぞれ、 $E_1 \sim \omega_z$ 、および、 $E_1 \sim \sqrt{\omega_z}$ 、のようにスケールされる。このため、エネルギースペクトルの構造は ω_z の大きさによって次の 3 通りに大別される：(i) ω_z が大きい場合 ($E_1 > E_2$)、(ii) ω_z が中程度の場合 ($E_1 \sim E_2$)、(iii) ω_z が小さい場合 ($E_1 < E_2$)。これら 3 つの場合に対応して、 ω_z の値をそれぞれ、5.0、1.0、0.1 として選び、基底状態から $4\omega_z$ までの範囲に位置する全てのエネルギー準位を計算した。

得られた各エネルギー準位について、多体波動関数の節の数で定義されるポリヤッド量子数 ν_p を調べた。その結果、2 電子系の場合と同様に、 ω_z が大～中程度の場合 ($\omega_z \geq 1.0$) には、エネルギー準位は ν_p を良い量子数とするバンド構造を持つこと、そして、 ω_z が小さい場合 ($\omega_z = 0.1$) には、拡

張されたポリヤッド量子数 ν_p^* [3] によって特徴付けられるバンド構造を持つことが示された. 図 1 に, 3 電子の場合について, ω_z の変化に対する低エネルギー領域の準位相関を示す. 図 1 は, (i) ω_z の減少に伴い, 基底状態と第一励起 2 重項状態, および最低 4 重項状態の準位間隔が減少し, $\omega_z = 0.1$ においてこれらの準位は近縮重すること, (ii) 一方, 第二励起 2 重項状態は, ω_z の変化に対して比較的鈍感であることを示している.

ω_z の変化に対するこれら二つの傾向を理解するために, 3 電子波動関数を 3 次元表示し, その節構造を調べた. 図 2 に最低 4 重項状態の波動関数の節構造を示す. 図 2 が示すように, 最低 4 重項状態は 3 個の節平面を持つ. 一方, 基底状態および第一励起 2 重項状態の波動関数は, 空間部分とスピン部分が絡み合っているために, 空間部分の確率 2 乗分布は明確な節構造を持たないことが示された. そして ω_z が減少すると, 2 重項状態の波動関数は電子間反発ポテンシャルの壁を避けるようにして 4 重項状態と類似した節平面を持つようになり, そのため 4 重項状態と近縮重することが示された. また, ω_z の変化に対して準位エネルギーが鈍感な第二励起 2 重項状態については, 波動関数は図 2 の節平面と直交する重心座標の方向に節を持つこと, すなわち重心モードが励起された状態であることが示された. このため, 一般化された Kohn の定理 [5] の帰結として, 基底状態の励起エネルギーが ω_z に依存しないことが明らかとなった.

[1] N. F. Johnson, *J. Phys.: Condens. Matter* **7** 965 (1995).

[2] T. Sako, P. A. Hervieux, and G.H.F. Diercksen, *Phys. Rev. B* **74** 045329 (2006).

[3] T. Sako and G. H. F. Diercksen, *Phys. Rev. B* **75** 115413 (2007).

[4] T. Sako and G.H.F. Diercksen, *J. Phys.: Condens. Matt.* **15** 5487 (2003).

[5] W. Kohn, *Phys. Rev.* **123** 1242 (1961).

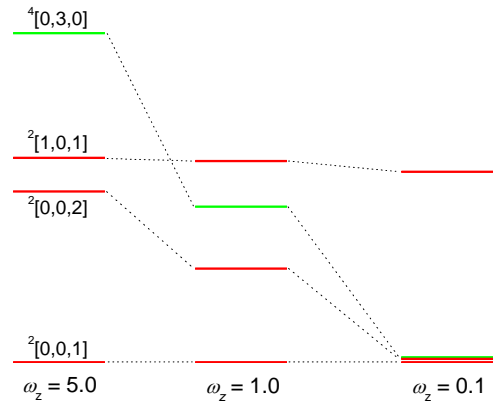


図 1.3 電子擬 1 次元人工原子の準位相関. 赤および緑の準位はそれぞれ 2 重項および 4 重項状態を表す.

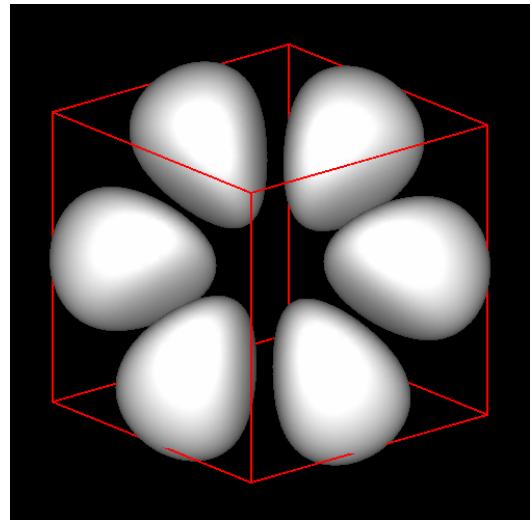


図 2. 最低 4 重項状態の 3 電子波動関数の確率 2 乗分布 ($\omega_z = 5.0$). 図中の赤線の一辺の長さは 2 (a.u.).