

量子ドット分子の電子構造

(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って、少数の電子をナノスケールの微小空間に閉じ込めた、量子ドットと呼ばれる擬似原子系を構築することが可能となった [1]. このような電子系は、閉じ込めの強さを変化させることによって、電子的性質を自在に制御することができることから、「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.

量子ドット単体の閉じ込めポテンシャルは、「Kohnの定理を満足する」という実験結果から、調和振動子形のポテンシャルが広く用いられている [2]. 一方、量子ドットが複数個結合した「量子ドット分子」においては、ドット間のポテンシャル障壁を電子がトンネリングし、分子全体に波動関数が広がりを持つため、無限大の束縛エネルギーを持つ調和振動子ポテンシャルをそのまま用いることはできない. そこで、本研究では、量子ドット分子を記述する単純な理論モデルを構築し、その基本的な電子物性を明らかにすることを目的として、以下に示すガウス形ポテンシャルの線形結合を用いて量子ドット分子の閉じ込めポテンシャルを表現し、そのポテンシャル中に束縛された複数個の電子の基底関数系の構築を行った.

【理論モデル】本研究で用いたガウス形ポテンシャルを以下に示す:

$$g(\mathbf{r}; V, \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{R}) = V \exp[-\gamma_x(x - R_x)^2 - \gamma_y(y - R_y)^2 - \gamma_z(z - R_z)^2]. \quad (1)$$

ポテンシャル(1)は、ポテンシャルの中心 (R_x, R_y, R_z) のまわりでテイラー展開をすることによって、次式で表される振動数を持つ3次元非等方調和振動子によって近似できることが示される:

$$\omega_\xi^2 = 2\gamma_\xi |V|. \quad (\xi = x, y, z) \quad (2)$$

すなわち、ポテンシャル(1)の低い励起状態は、Kohnの定理を近似的に満足する. このポテンシャルの線形結合を用いることによって、複数個の量子ドットが結合した量子ドット分子のハミルトニアンは次式で表される:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right] + \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^M g(\mathbf{r}_i; V_\alpha, \boldsymbol{\gamma}_\alpha, \mathbf{R}_\alpha) + \sum_{i>j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3)$$

N は電子数、 M はガウスポテンシャルの数、すなわち「分子」を構成する核の数を表す. ガウスポテンシャル(1)は、調和振動子ポテンシャルとは異なり有限の束縛エネルギーを持つため、量子ドット間の電子のトンネリングを表現することができる.

【基底関数系】まず、式(1)で表される単一のガウスポテンシャルに束縛された電子の基底関数系を構築する. 非等方なポテンシャル場に拘束された電子の電子密度分布を適切に表現するために、次式で表わされるカーテシアン非等方ガウス型関数 [3] を用いて基底関数系を構成する:

$$\chi^{\vec{a}, \vec{\zeta}}(\vec{r}; \vec{R}) = x_{R_x}^{a_x} y_{R_y}^{a_y} z_{R_z}^{a_z} \exp(-\zeta_x x_{R_x}^2 - \zeta_y y_{R_y}^2 - \zeta_z z_{R_z}^2). \quad (4)$$

ここで、 $\xi_{R_\xi} = (\xi - R_\xi)$ ($\xi = x, y, z$). この非等方ガウス型基底関数系の最適な指数 ζ_ξ は、調和

振動子ポテンシャルの場合には、調和振動数 ω_ξ の半分、すなわち、

$$\zeta_\xi = \frac{1}{2} \omega_\xi, \quad (\xi = x, y, z) \quad (5)$$

であることが知られている [3]. ガウスポテンシャル(1)の非調和性が小さい場合には、ガウスポテンシャルは調和振動子ポテンシャルによって非常に良く近似されるため(図 1.(a)), 基底関数の指数 ζ_ξ は調和振動子の場合の指数と同じものを選ぶことができる. 一方、非調和性が大きい場合には、ガウスポテンシャルは調和振動子ポテンシャルと比較して、より広い空間領域に広がるため(図 1.(b)), 式(5)よりも小さい指数を選ぶ必要がある.

そこで本研究では、式(5)の ω_ξ を次式で定義される調和振動数 $\tilde{\omega}_\xi$ に置き換えることによって、基底関数の指数を定義する:

$$\frac{1}{2} \tilde{\omega}_\xi^2 \xi_c^2 = |V| - |V| \exp(-\gamma_\xi \xi_c^2), \quad (6)$$

$$\frac{1}{2} \tilde{\omega}_\xi^2 \xi_c^2 = \tilde{\omega}_\xi (v_{\max} + \frac{1}{2}). \quad (7)$$

v_{\max} は基底関数の最大量子数、 ξ_c は v_{\max} の場合における調和ポテンシャルの古典的転回点を表わす. すなわち式(6), (7)は、基底関数の中で最も空間的な広がりが大きい関数の古典的転回点が、ガウスポテンシャルと交差する条件を表わす.

この基底関数の構成法を用いて、1つのガウスポテンシャルに束縛された2電子のエネルギースペクトルを、異なるサイズの基底関数系を用いて計算した結果を図2に示す.

複数のガウスポテンシャル核が結合した量子ドット分子の計算においては、上で求めた基底関数系を個々のガウスポテンシャルの中心に配置し、これらを量子ドットの原子内殻関数とする. そしてこれらの関数に、量子ドット間のトンネリングを表現する原子価関数および励起状態関数を加える. 量子ドット分子のエネルギースペクトルの計算結果の詳細は当日報告する.

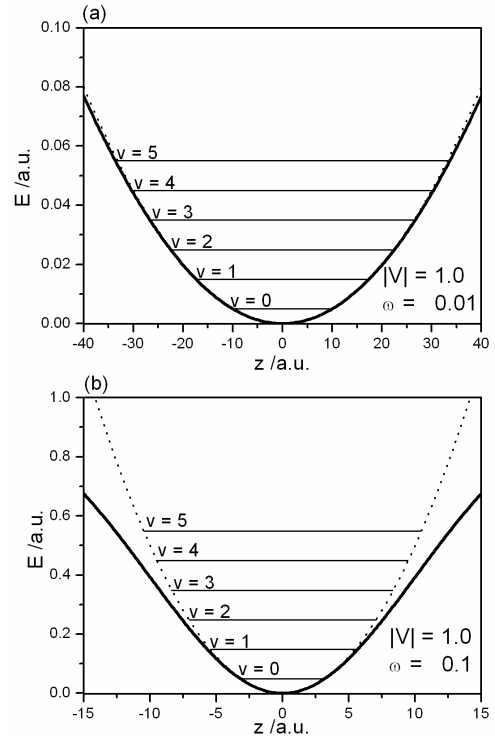


図 1. ガウスポテンシャルと調和振動子ポテンシャル. (a) 非調和性が小さい場合. (b) 非調和性が大きい場合.

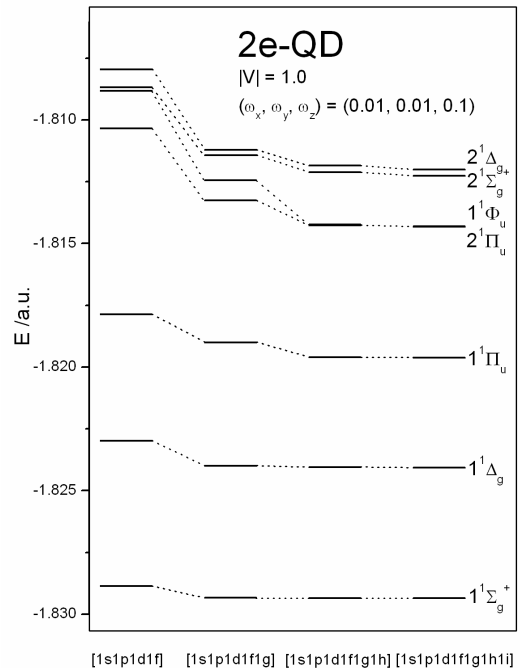


図 2. 2電子ガウス形量子ドットのエネルギースペクトルの基底関数依存性

[1] R.C. Ashoori, Nature **379** (1996) 413-419.

[2] N.F. Johnson, J. Phys.: Condens. Matter **7** (1995) 965-989.

[3] T. Sako and G.H.F. Diercksen, J. Phys.: Condens. Matter **15** (2003) 5487-5509.