

量子箱に閉じこめられた励起子状態の計算方法の開発

(分子研*, 総研大**) ○久保田 陽二*, 信定 克幸*,**

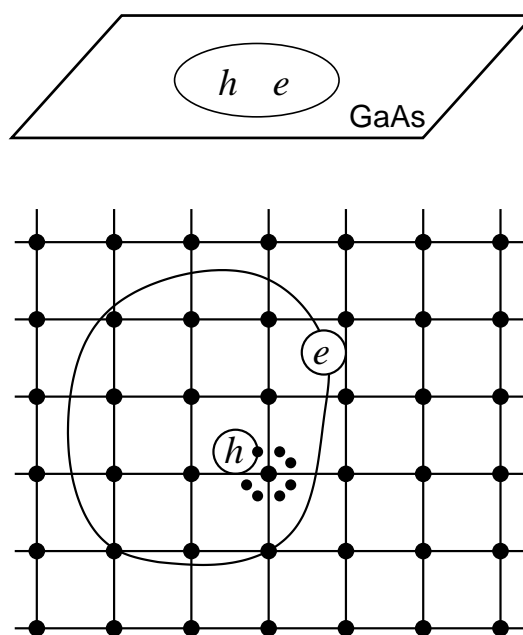
【序論】

分子線エピタキシー法などの薄膜結晶成長法を用いて半導体のナノ構造物質が作成できるようになり、バルク半導体よりも優れた物性が注目されている。例えば、量子細線中の励起子の振動子強度が大きい事を利用した新しいレーザー光源の開発や、半導体の構造制御による光学特性のコントロール等が期待されている。

ナノ構造物質中の励起子状態を数値的に計算する方法として、電子および正孔の1粒子波動関数の積を基底としたCI法が多く用いられている(量子化学計算での1電子励起CI法に対応する)。励起子は電子と正孔がクーロン相互作用で束縛しあった状態であるが、特定の原子核に局在せず自由粒子的に動ける準粒子であるため、一般的な分子の量子化学計算と比べると基底関数展開の収束性が非常に悪い。また、電子と正孔は異種粒子として扱う必要があるため、同数の多電子系と比べるとハミルトニアン行列成分の計算量が多くなる。更に、励起子を閉じ込めているナノ構造物質の境界条件を満たす関数系を使う必要があるため、電子・正孔間のクーロン相互作用項の多重積分を解析的に計算できない。以上のような原因により、この方法ではハミルトニアン行列成分の計算に時間がかかり、特にナノリングなど形状の複雑なナノ構造物質の計算ではCI法による数値計算は有用な方法とは言えない。

【計算方法・結果】

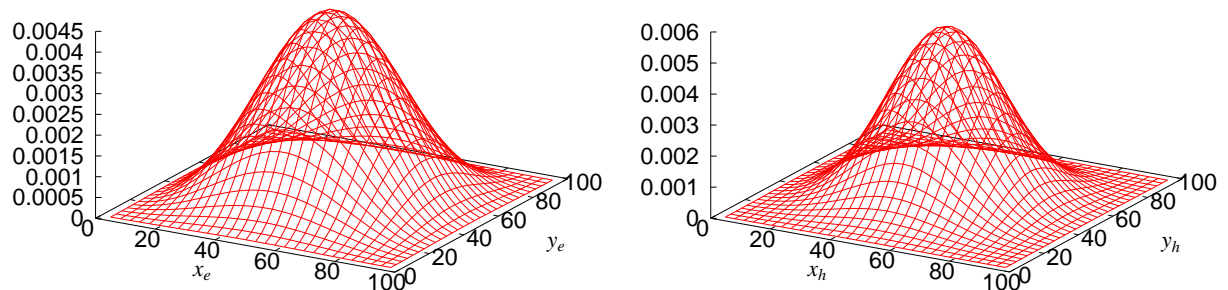
上述の問題点を解決するために我々は励起子状態を効率的に計算する方法を開発した。CI法では1電子、1正孔ハミルトニアンの各固有関数を用いて励起子波動関数を展開するが、我々の計算方法では展開の基底関数として空間格子点に局在した関数を用いるため、クーロンポテンシャルの項の計算量を減らす事ができる。その結果、



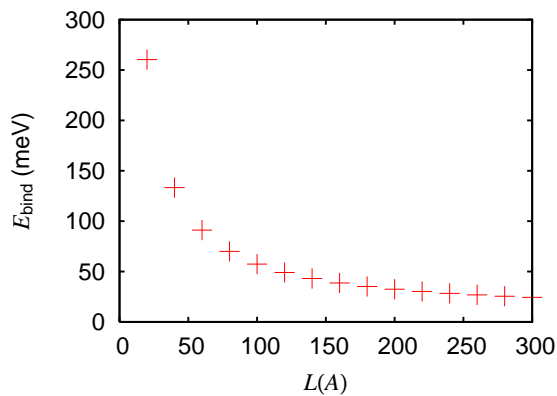
GaAs 量子箱中の励起子。励起子は、励起状態の電子と正孔との双極子対。

計算時間を大幅に短縮でき、また展開に用いる基底関数の数を増やす事も容易になるため、計算精度の向上が期待できる。

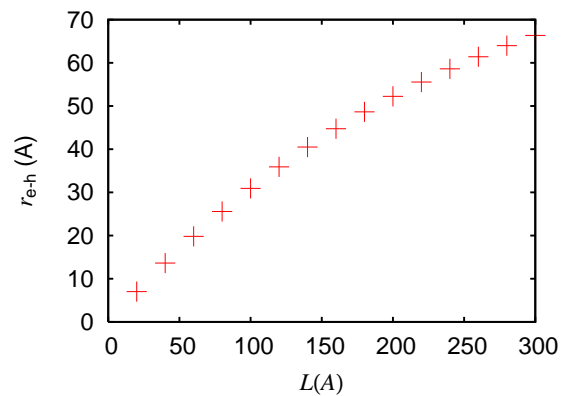
この方法を用いて2次元量子箱に閉じ込められた励起子のエネルギー、波動関数などを計算した。量子箱は構造が単純であるため、従来のCI法を用いて励起子状態を計算しても比較的収束性は良いが、展開に用いる関数の数 N の2乗に比例してクーロン項の4重積分の計算量が増加するため、すぐに計算時間が膨大となってしまう。一方、我々が用いた空間に局在化した基底関数で計算した場合は、クーロン項の計算量が N のオーダーであるため、計算時間の増大を著しく抑えられる。特に、箱のサイズが比較的大きな場合や高励起状態の励起子の計算において従来のCI法との計算量の差異は顕著となり、我々の用いた関数系の有用性が高まる。



2次元量子箱中の励起子状態の波動関数。左図は電子の存在確率、右図は正孔の存在確率。



励起子の束縛エネルギーの箱の幅依存性。



電子-正孔間距離の箱の幅依存性。