

松瀬 丈浩

信州大学 繊維学部 精密素材工学科

## 1. 緒言

本研究計画の本来の目的は分子系での電子構造を研究するため、3次元の実空間メッシュ法(3Dメッシュ法)でHartree-Fock(HF)またはHartree-Fock-Kohn-Sham(HFKS)-計算を実行するのであるが、我々が提案している実空間メッシュ法は電子を閉じ込めてあるポテンシャルが原子核からのクーロン引力ばかりでなく、可なり任意の空間構造を有しているポテンシャルに閉じ込められている場合でもHF計算が可能であることが分った。近年話題になっている半導体の微細加工で作成された量子ドット(人工原子)の電子構造に関するHF計算は多くの場合理想化された2次元問題として理解され解析的基底関数を用いて行われているが、直列2量子ドット(人工分子)の場合は電子間のクーロン力の三次元性が重要な役割を担っていることは確かであるので、3Dメッシュ法が非常に有効であることは自明である[1]。

また、更に最近では中空円筒形をした微小半導体に閉じ込められた人工的電子系(リング構造)が実現されるようになって来ている。このリング構造の電子状態のHF計算を実行するには3Dメッシュ法以外には適当な方法はないと言っても過言ではないであろうと思っている。このリング構造のHF計算によってえられる理解は他のモデル化された電子構造の理解に関連すると思われるのでその基本的な結果を報告する。

## 2. 計算方法

実空間メッシュ法を用いた非制限ハートリーフォック(UHF)計算をリング構造内の電子状態に関して行う。計算方法は通常円筒量子ドットと直列2量子ドットで用いた方法[1]と同じであるが、ここでは理想的なリング構造を想定するので $(r, \theta, z)$ -円筒座標系を用いたメッシュ法になる。用いる全ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}(r_i, \theta_i) + \sum_{i=1}^N \hat{H}(z_i) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^N \langle 0 | \hat{H}(z_i) | 0 \rangle$$

であり、また $\hat{H}(r, \theta) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] + V_0(r) + V_B(r)$  と  $\hat{H}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z)$  である。ここで、円筒形リング内への閉じ込めポテンシャルは  $V_0(r) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 (r - R_0)^2$  と  $V_z(z)$  であり、外磁場によるポテンシャルは  $V_B(r) = \frac{1}{8} m^* \omega_c^2 r^2 - \frac{1}{2} \omega_c \hat{l}_z + g^* \mu_B \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}}{\hbar}$  で表されている。この計算で用いたパラメータは

$m^* = 0.067, \epsilon = 25.8, g^* = 0.44, \hbar \omega_0 = 5[\text{meV}]$  であり、本計算ではリングの内半径は  $R_0 = 50[\text{nm}]$  円筒の高さは  $H_0 = 12[\text{nm}]$  の場合である[2]。

勿論、交換項を正確に計算することが本研究の基本課題であるので以前に報告しているように状態に依存したクーロン積分

$$U_{ij}^\sigma(\mathbf{r}) = \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho_{ij}^\sigma(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

を導入して正確に計算する。そうするとUHF方程式は以下のように

$$[h(\mathbf{r}) + U_H(\mathbf{r})] \psi_i^\sigma(\mathbf{r}) - \sum_{j=1}^{N_\sigma} U_{ij}^\sigma(\mathbf{r}) \psi_j^\sigma(\mathbf{r}) = \epsilon_i^\sigma \psi_i^\sigma(\mathbf{r})$$

と状態が結合した局所形で表すことが出来る。ここで、 $\rho_{ij}^\sigma(\mathbf{r}) = \psi_j^{\sigma*}(\mathbf{r}) \psi_i^\sigma(\mathbf{r})$  であり、 $h(\mathbf{r})$  は全ハミルトニアンの一演算子に対応しているものを表している。また、 $U_H(\mathbf{r}) = \sum_\sigma \sum_j^{N_\sigma} U_{jj}^\sigma(\mathbf{r})$  と  $U_{ij}^\sigma(\mathbf{r})$  の対角和で求められるハートリー項であるので、本計算は自己エネルギーを排除していることを強調しておく。具体的にはクーロン積分は次の  $\nabla^2 U_{ij}^\sigma(\mathbf{r}) = -4\pi \rho_{ij}^\sigma(\mathbf{r})$  なるポアソン方程式を解くことによって得られる。また、UHF方程式は、Schmidtの直交化で状態間の直交性を保証しながら、Car-Parrinello的な緩和法を用いて解くことになる。

## 3. 結果

この円筒形内に閉じ込められている一電子のエネルギー準位は図1に示されており、磁場  $B$  依存性は Beenakker ら[3]が示している近似計算と同様の振る舞いをしている。このような円筒形の電子状態の特徴は磁場が大きくなるにつれて高い角運動量の状態が順々に基底状態になっていることである。本研究では円筒座標を用いた3Dメッシュ法で計算出来たので、定性的近似的計算と比較することは非常に面白いことである。

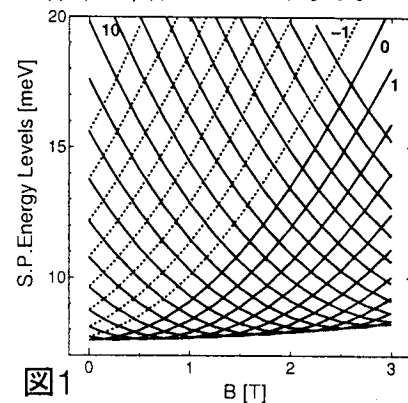


図1

このような一電子状態から出発してUHF計算

を行う。勿論、3Dメッシュ法を用いない限りUHF計算は不可能であろうと思える。まず、UHF全エネルギーの粒子数依存性とスピン状態占有依存性を調べてみる。図2には磁場の強さが1[T]の場合のUHF全エネルギーが示されている。こ

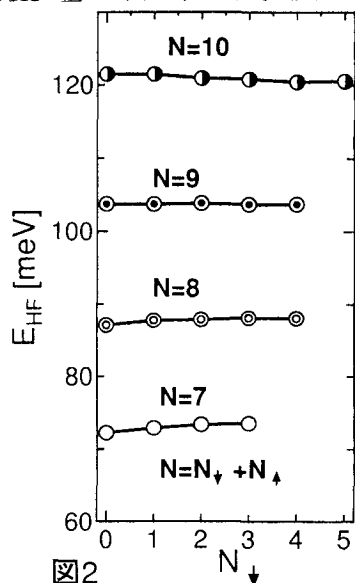


図2

の系は図1から容易に想像できるように可なり強く縮退しているの、電子数が7より小さい場合はすべての電子が上向きスピンの状態を占有する場合が全エネルギーは低くなるが、電子数が9程度以上になると上向きスピンと下向きスピンを同程度占有する場合が低いエネルギーになる。これは良く知っている Hunt 則がリング構造の電子構造に出現したものであると理解出来る。こ

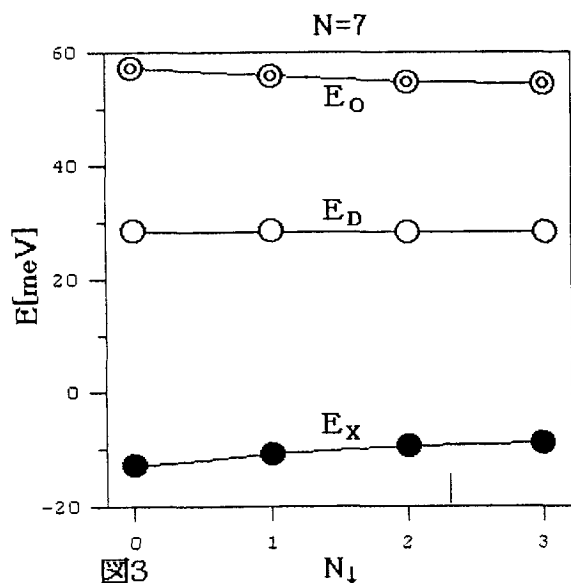


図3

の Hunt 則の構造を調べるために粒子数が  $N=7$  と  $N=10$  の場合で HF エネルギーの内訳を二体クーロンの直接項  $E_D$  と交換項  $E_X$  と一体部分  $E_O$  とに分けて図3と図4にそれぞれ示す。まず、強調しなければならないことは直接項  $E_D$  は上向きスピンと下向きスピンのどのように電子を占有させても殆んど一定であることである。図からも分かるように一電子当たりの直接項エネルギーは殆んどどの電子数に関して約  $0.57[\text{meV}]$  のである。ま

た、交換項エネルギーは平均的には約  $-0.4[\text{meV}]$  程度であるが、直接項を違って可なり状態に依存している。このことは今後詳しく調べてみる必要がある。

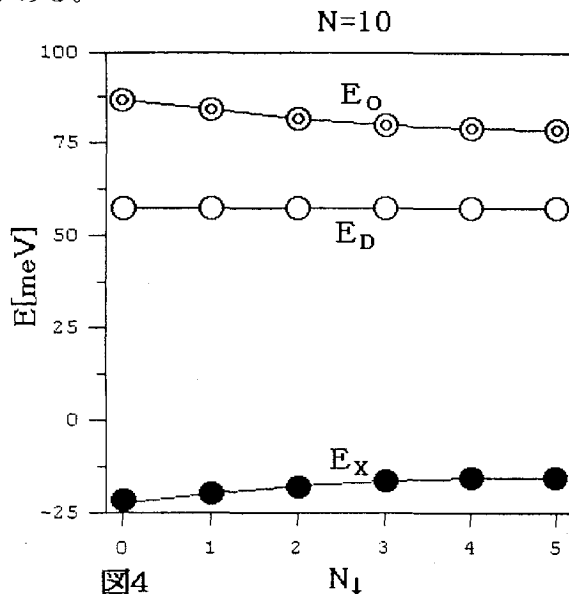


図4

以上のことから、電子構造が Hunt 則に従うようになるかどうかは一体演算子から来る一電子エネルギーの電子占有依存性  $E_O$  と交換項スピン状態占有依存性  $E_X$  との競争で決定されていることが分った。一般的に HF-エネルギーの表現から交換エネルギーはスピン状態のどちらかに偏った方が低いエネルギーになることが知られているが多くの多電子系で常にそのような電子構造が出現するとは限らないのはこのように一体演算子から来る一電子エネルギーに強く依存しているからである。

#### 4. 結論

ここでは微小半導体のリング構造に閉じ込められている電子状態を3Dメッシュ法でUHF計算をしたのであるが、この系の大きさはいわゆるナノから数十ナノのスケールの電子構造には共通に出現するものと期待している。基本的には電子間のクーロン相互作用の大きさと一体演算子から来る一電子エネルギーがどの程度強く縮退しているかが重要な物理量になっている。今後他の電子系にも理想的なモデル化をして応用し分析してみる予定である。また、遷移金属の領域の電子構造は Hunt 則に従っていることが良く知られているが、同様の分析をする必要があると思う。今回の報告は本研究計画とは関係ないように見えるが3Dメッシュ法の計算の精度を確立し、その有効性を示すためには非常に重要であったことを付記しておく。

- [1] 濱, 開発, 滝沢, 松瀬, 日本物理学会講演概要集 第54巻第2号第4分冊, 615(1999).
- [2] 山口, D.G.Austing, 都倉, 大野, 樽茶, 同上, 第54巻第2号第4分冊 (1999)614.
- [3] C.W.J.Beenakker et. al., Phys. Rev. B44, 1657 (1991).