

---

**修士論文** (1994年度)

---

数値的厳密対角化による量子ドット系の  
分数量子ホール状態の研究

東北大学大学院理学研究科  
物理学専攻

関 拓

**Abstract**

量子ドット系と呼ばれる人工的なメソスコピック系において出現が予想される分数量子ホール状態について、数値的厳密対角化計算により系の性質を調べるとともに、これまでに提起された分数量子ホール効果に対する理論、とりわけ Laughlin の準電子励起描像の検証を行う。量子ドット系においてはこれまでの数値的な研究により、特定の全軌道角運動量を持つ状態が特別に安定な状態となること、さらにこれらの状態のうちいくつかの状態は分数量子ホール状態に対応していることが知られている。本研究ではこれらの状態の安定性の起源を統一的に説明する。

## 目次

1	序論	134
2	分数量子ホール効果	138
2.1	強磁場下2次元電子の1体問題	138
2.2	ラフリンの波動関数	141
2.3	Jainの波動関数	144
2.4	粒子空孔対称性	147
3	定式化	148
3.1	モデルハミルトニアン	148
3.2	基底の表現とハミルトニアン行列の生成	150
3.3	対角化の手法	151
3.4	物理量の計算	152
4	計算結果およびその解釈	154
4.1	エネルギー固有値	154
4.2	一体角運動量分布関数	155
4.3	電荷密度分布関数	156
4.4	二体分布関数	157
4.5	回転対称性と全軌道角運動量	158
4.6	ラフリンの準電子励起描像の検証	160
5	まとめと今後の課題	161
6	謝辞	162
7	補遺*)	
7.1	クーロン相互作用に対する行列要素の導出	
7.2	HaldaneのPseudo Potential	

---

\*) 誌面の都合上、割愛させていただきます。(編集部)

## 1 序論

分数量子ホール効果 (FQHE) は GaAs/AlGaAs のヘテロ構造の 2 次元系で、Tsui, Stormer と Gossard[1, 2] らにより 1982 年に発見された。分数量子ホール効果は低温強磁場下の 2 次元系において観測され、抵抗率テンソルの対角成分の消失および非対角成分の  $e^2/(hc)$  を単位とした分数倍の量子化にその顕著な特徴が見られる。実験においてはこのような 2 次元系を実現するために GaAs/AlGaAs の界面や MOSFET における Si/SiO<sub>2</sub> の界面の垂直方向に電場を印加し、この方向に対する電子の運動の自由度を凍結する方法がとられる。このようにして実現された 2 次元系においては、分数量子ホール効果より前に整数量子ホール効果 (IQHE) と呼ばれる現象も発見されている。この両者に共通する点として、抵抗率テンソルの対角成分の消失および  $e^2/(hc)$  を単位としたホール抵抗率の量子化が挙げられる。一方、重要な相違点としては、IQHE は強磁場下でのランダウ準位の分裂によるエネルギーギャップに起因し、直接に電子間の相互作用とは関係しないが、FQHE は電子間のクーロン相互作用が直接の原因となっていることが挙げられる。FQHE は IQHE よりもさらに強磁場下で観測されるためにランダウ準位の分裂が強い。従って、高位のランダウ準位の混成が弱いことが IQHE の事情と異なっている点である。

分数量子ホール効果に対する本格的な理論的研究としては 1983 年に R. B. Laughlin が提起した非圧縮性量子液体描像に基づく変分理論 [3] がまず挙げられる。Laughlin はこれにより充填率  $\nu = 1/m$  および  $\nu = 1 - 1/m$  の系列の説明に成功した。Laughlin に続き B. I. Halperin[4] および F. D. M. Haldane[5] が分数電荷を持つ準粒子の励起を仮定し、FQHE の出現する充填率の分析を行い、いわゆる Halperin-Haldane の階層構造を得た。しかしながら、Halperin および Haldane の階層構造に現れる充填率に対し必ずしも FQHE が観測されないこと、ホール抵抗率の量子化の強さが説明できていないことなどを考慮すると、Halperin-Haldane の階層構造には未だ明らかではない点が多い。

J. K. Jain は Composite-Fermion Theory に基づき、Haldane, Halperin らと異なる階層構造を得た [6]。Haldane, Halperin らと異なり、Jain は電子に対する変分波動関数を与え、完全ではないにしろ  $\nu = 1/m$  以外の系列の説明に成功した。Jain の独創的な点は、次のような点にまとめられる。Composite-Fermion と呼ばれる相互作用をしない、Fermi 統計に従う仮想的な準粒子を考え、縮退した仮想的なランダウ準位間に、Composite-Fermion が励起されるというモデルを考えた。Jain はこの Composite-Fermion の波動関数を最低ランダウ準位に写像す

ることにより、励起状態における電子の波動関数をあからさまに得た。さらにホール抵抗率の量子化の強さを説明した [6, 7, 8]。

以上に挙げた幾つかの理論的研究に対し、その検証のための代表的な手段として、少数電子系における数値的厳密対角化計算および変分モンテカルロ法による計算が存在する。

Morf, Halperin らは変分モンテカルロ法を用いて比較的電子数の大きな系において、励起エネルギーおよび2体分布関数を計算することにより、バルクにおけるラフリンの理論の正当性を確かめた。この研究により、ラフリンの提起した $\nu = 1/m$ に対応する基底状態から分数電荷を持つ準空孔が励起されるという描像 (準空孔励起描像) が正しいことが示された [9]。しかしながら、準電子励起描像についてはラフリンの理論から得られる励起エネルギーおよび2体分布関数と変分モンテカルロ法による計算結果が良い一致を見ないことから準電子励起描像自身の正当性が疑われている。

一方、数値的対角化を用いた研究 [10, 11, 12] により、上述の変分理論に対する検証が為されてきた。具体的には基底状態からの励起エネルギーや、変分関数との重なり積分が計算されている。その結果、少数電子系においては Laughlin の準空孔励起理論や Jain の理論が定量的に正しいことが分かった。対角化計算をこの系に用いる利点は、角運動量分布関数等の量子数に直接関連した物理量が厳密に求まるため、いかなる素励起が生じているかの把握および考察が正確に、かつ直接的に行える点にある。

対角化計算におけるモデルとしてしばしば採用されている系の geometry には代表的なものとして disk geometry や spherical geometry 等が挙げられる。spherical geometry は対称性が高いため、対角化すべきハミルトニアン行列がサイズの小さな行列にブロック分解でき、多数の電子からなる系を取り扱えることから分数量子ホール効果の研究の初期の段階でしばしば用いられた。しかしながら spherical geometry は disk geometry と異なり、現実の試料の geometry には必ずしも対応していないことから本研究ではこれを採用しない。そこで本研究においては量子ドット系と呼ばれる disk geometry を持つ系において対角化計算を行い、これにより分数量子ホール状態のこの系における性質を明らかにし、併せて従来の理論の検証を行うことをその目的とする。

量子ドット系とは、近年の半導体作成技術の進歩により実現可能となった系であり、半導体界面上に作成された人工的な量子井戸構造に閉じ込められた0次元の電子系を指す [13]。作成された量子井戸構造には1電子からおよそ200電子までを閉じ込めることが可能である。現在ではGaAsやMOSの系においてそのサイズを適切に調節してドットを作成し、印加するゲート電圧および modulation doping のための  $\text{Si}^{+\delta}$  層の濃度を適切に選択することにより、ドット内部に閉じ込める電子の個数を上記の範囲で意のままに調節することができる。

量子ドット系を形成する量子井戸の代表的な構造には2種類あり、1つは深部メーザーエッチング法によるドット構造、もう1つは電解効果法によるドット構造と呼ばれる。両者の基本的な違いは平面上のある領域に電子を閉じ込めるためのポテンシャルをどのような機構により生じさせているかという点にある。前者は閉じ込めポテンシャルをドットの表面ポテンシャルにより形成するものである。後者は分子線エピタキシャル法 (MBE 法) により形成された半導体表面上に、リソグラフィにより長方形の高精度なパターンを作成し、この面に Ni や Cr 等の金属電極を蒸着により取り付けゲート電圧を加えることにより、空間的に一様でない電位を印加して電子を平面のある領域に閉じ込める構造である。(図1 参照) いずれの構造においても電子溜として  $\text{Si}^{+}$  のデルタ層を含む GaAs 層が存在する。この量子井戸を表す近似的な閉じ込めポテンシャルとして放物線型のポテンシャルを用いる近似が適切であることが知られている [14]。量子ドット内部の電子は電子間のクーロン相互作用と閉じ込めポテンシャルの競合により分数量子ホール状態を始めとした興味深い性質をもつことが近年の実験 [15] および理論的研究 [16, 17, 18] により判明し、注目を集めている。

この系において測定された量としては、量子ドットのキャパシタンスのゲート電圧による変化およびキャパシタンスのゲート電圧による微分等が挙げられる。ゲート電圧を変化させることにより、フェルミ面が離散的なエネルギー準位を横切る時に、 $\text{Si}^{+}$  のデルタ層の電子溜から電子が補給され、キャパシタンスのゲート電圧による変化が大きくなる特徴がある。これより系のエネルギー準位が分かる [15]。また直線偏光した遠赤外線吸収スペクトルの測定により、電子が回転対称な放物線型のポテンシャルによって閉じ込められているという描像が正しいこと、さらに量子ドットに閉じ込められた電子数が計測できることが判明している [19, 20]。

本研究では、量子ドットを形成する閉じ込めポテンシャルとして放物線型のモデルポテンシャルを用いる。ハミルトニアンを系の保存量である全軌道角運動量によりブロック分解し、ランチョス法により数値的に厳密に対角化してエネルギー固有値を求めた。その結果、電子が5個以下の系で報告されていたように [17, 18]、特定の角運動量を持つ状態は特別に安定

化することが分かった。これら 5 電子以下の系ではこのような魔法角運動量の系列として、 $\Delta M = N$  ( $M$  は全軌道角運動量) の系列の存在が報告されていた。本研究においては、さらに 6 電子系および 7 電子系に対する厳密計算も行い、電子数が 4 から 7 の系において、新たな魔法角運動量の系列として、 $\Delta M = N - 1$  の系列を発見した。4-6 電子系では、系列  $\Delta M = N$  及び新系列  $\Delta M = N - 1$  が見受けられた。一方、7 電子系においては系列  $\Delta M = N$  が消失し、系列  $\Delta M = N - 1$  が安定な基底状態となることが判明した。これらの魔法角運動量を持つ状態に対し、1 体軌道角運動量分布関数、電荷密度分布関数および 2 体分布関数を厳密に計算した。その結果、 $\Delta M = N$  の系列に属する魔法角運動量を持つ状態では、電子の空間的配置が  $N$  回対称になり得ることが分かった。さらに本研究で発見した、 $\Delta M = N - 1$  の系列に属する魔法角運動量を持つ状態では電子の空間的配置が  $N - 1$  回対称になり得ることが判明した。これら魔法角運動量の起因は、6 電子以下の系においてこのような系の回転対称性とクーロン相互作用にあることが、2 体分布関数の厳密計算の結果に基づく考察により分かった。また、これらの魔法軌道角運動量を持つ状態のうちのいくつかは分数量子ホール状態 ( $\nu = 1/3, 2/3, 2/5$  状態など) に対応していることが知られている [21]。そこで、最も安定性が強い  $\nu = 1/3$  状態を考えると、 $\Delta M = N$  の系列および  $\Delta M = N - 1$  の系列の両方に属することが判明した。 $\nu = 1/3$  状態の安定性は、この状態が  $N$  回対称性および  $N - 1$  回対称性を併せ持てるため、その共鳴エネルギーに起因しているのではないかと推論される。

また、Laughlin の準電子励起描像の検証を行った。準電子励起状態における 1 体軌道角運動量分布関数の厳密計算により、電子数が 7 個以下からなる量子ドット系においては、ラフリンの準電子励起描像に基づく結果と定性的に矛盾することが判明した。この結果から準電子励起描像はこの系における素励起の描像としては適切ではないことが明らかになった。

本論文の第 2 章においては、これまでに提起された代表的な理論についてその基本的な考え方を確認し、さらにこれらの理論により少数系で予想される現象について考察を行う。第 3 章においては問題の定式化を行い、数値計算により計算される諸々の物理量の定義および計算手法について述べる。第 4 章においては、ハミルトニアンの数値的厳密対角化計算により得られた、エネルギー固有値、1 体角運動量分布関数、および 2 体分布関数についての計算結果を示し、これらに基づいて、先に挙げたこれまでに提起された理論の正当性の確認および量子ドット系における分数量子ホール状態について本研究により新たに得られた知見について述べる。

## 2 分数量子ホール効果

### 2.1 強磁場下 2 次元電子の 1 体問題

強磁場下の 2 次元電子系においてはスピンの自由度は凍結されていると考えてよい。したがって、スピンは以後考えぬこととする。 $z$  軸正方向に強さ  $B(> 0)$  の磁場が印加された 2 次元系において、電荷  $-e$  ( $e > 0$ ) を持つ電子は古典的には次の運動方程式、

$$m_e \ddot{x} = -\frac{eB}{c} \dot{y} \quad (1)$$

$$m_e \ddot{y} = \frac{eB}{c} \dot{x} \quad (2)$$

に従い、次の複素座標  $z = x - iy$  および複素速度  $\dot{z} = \dot{x} - i\dot{y}$  を導入すると、複素表示された運動方程式は

$$\ddot{z} = -i\omega_c \dot{z} \quad (3)$$

と表せる。 $t = 0$  での初期複素速度を  $v_0 = v_{0x} - iv_{0y}$  とし、複素中心座標を  $C = C_x - iC_y$  とすると、

$$z = C + i\frac{v_0}{\omega_c} \exp(-i\omega_c t) \quad (4)$$

であるから、

$$\begin{aligned} z = & [C_x + \frac{v_{0y}}{\omega_c} \cos(\omega_c t) + \frac{v_{0x}}{\omega_c} \sin(\omega_c t)] \\ & -i [C_y - \frac{v_{0x}}{\omega_c} \cos(\omega_c t) + \frac{v_{0y}}{\omega_c} \sin(\omega_c t)] \end{aligned} \quad (5)$$

となる。従って相対座標は古典的には  $-\hat{e}_z \times \frac{\vec{v}}{\omega_c}$  となることが分かる。ただし、

$$\hat{e}_z = (0, 0, 1) \quad (6)$$

である。次に量子論的に考える。ベクトルポテンシャルとして対称ゲージの  $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$  を採用し、ハミルトニアン  $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A})^2$  を考える。まず、次式で表される dynamical momentum 演算子  $\hat{\pi}$  を導入する。 $-\hat{e}_z \times \frac{\hat{\pi}}{m^*\omega_c}$  は相対座標演算子である (ただし、 $\hat{e}_z = (0, 0, 1)$ ) [22, 23]。

$$\hat{\pi} = \hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y \quad (7)$$

$$\hat{\pi}_x = -i\hbar\nabla_x + \frac{eA_x}{c} \quad (8)$$

$$\hat{\pi}_y = -i\hbar\nabla_y + \frac{eA_y}{c} \quad (9)$$

この演算子  $\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y$  は次の交換関係を満たす。

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = -\frac{i\hbar^2}{\ell^2} \quad (10)$$

ただし、 $\ell$  は磁氣的長さと呼ばれる特徴的長さであり、

$$\ell = \left(\frac{\hbar c}{eB}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

dynamical momentum  $\hat{\pi}$  を用い、次のボゾン演算子を定義する。

$$a^\dagger \equiv \frac{\ell}{\sqrt{2}\hbar}(\pi_x + i\pi_y) \quad (12)$$

このボゾン演算子は次の交換関係を満たす。

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (13)$$

このボゾン演算子により、ハミルトニアンは次のように対角化される。

$$\hat{H} = \hbar\omega_c\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \quad (14)$$

従って、1 体のエネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (15)$$

である。次にサイクロトロン運動の中心座標演算子、

$$\hat{C} = \hat{C}_x - i\hat{C}_y \quad (16)$$

$$\hat{C} = \hat{z} - \frac{i\hat{\pi}}{m^*\omega_c} \quad (17)$$

を定義する。交換関係は

$$[\hat{C}_x, \hat{C}_y] = i\ell^2 \quad (18)$$

を満たす。このサイクロトロン運動の中心座標演算子を用い、次の複素中心座標演算子 (ボゾン演算子) を定義する。

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}\ell}(\hat{C}_x + i\hat{C}_y) \quad (19)$$

これらは交換関係、

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1 \quad (20)$$



を満たし、 $z = x - iy$  とすると、

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{z^*}{2\ell} + 2\ell \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (21)$$

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{z}{2\ell} - 2\ell \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \quad (22)$$

$$\hat{a} = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left( \frac{z}{2\ell} + 2\ell \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \quad (23)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{i}{\sqrt{2}} \left( \frac{z^*}{2\ell} - 2\ell \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (24)$$

と表せる。また、ボゾン演算子  $\hat{a}$  および  $\hat{b}$  は

$$[\hat{a}, \hat{b}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{b}] = 0 \quad (25)$$

を満たす。これは古典的なサイクロトロン運動のエネルギーがサイクロトロン運動の中心の位置に依らないことに対応している。

$$\left( \frac{z^*}{2\ell} + 2\ell \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi_{0,0} = 0 \quad (26)$$

$$\left( \frac{z}{2\ell} + 2\ell \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \psi_{0,0} = 0 \quad (27)$$

により定義される、規格化された基底状態は

$$\psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^2}} \exp\left(-\frac{zz^*}{4\ell^2}\right) \quad (28)$$

であり、規格化された励起状態は

$$|nm\rangle = \frac{(a^\dagger)^n (b^\dagger)^m}{\sqrt{n!m!}} |0,0\rangle \quad (29)$$

と定義できる。これらの状態は直交性

$$\langle nm | n' m' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{mm'} \quad (30)$$

を満たす。1体の波動関数は

$$\begin{aligned} \phi_{nm}(z) &= \frac{(a^\dagger)^n (b^\dagger)^m}{\sqrt{n!m!}} |0,0\rangle \\ &= (-i)^n (2\pi\ell^2 2^{m+n} m!n!)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{|z|^2}{4\ell^2}\right) (2\ell \frac{\partial}{\partial z})^n z^m \exp\left(-\frac{|z|^2}{2\ell^2}\right) \end{aligned} \quad (31)$$

である。系の面積は

$$\pi \langle n, m | z^* z | n, m \rangle = 2\pi\ell^2(n+m+1) \quad (32)$$

である(これより  $m = -n, -n+1, \dots, \infty$ )。エネルギー固有値は、 $E_n = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$  である。従って、 $m$  に関し無限に縮退していることが分かる。 $B \rightarrow \infty$  の極限では、ランダウ準位(LL)間の分裂が激しく、 $n$  で指定されるランダウ準位のうち、 $n=0$  の最低ランダウ準位(LLL)のみを考えることが許される。LLLに属する状態は

$$\begin{aligned} |0m\rangle &= \frac{(b^\dagger)^m}{\sqrt{m!}} |0,0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^2 2^m m!}} z^m \exp\left(-\frac{z^* z}{4\ell^2}\right) \end{aligned} \quad (33)$$

と表される。従ってLLLにおいては指数部分を除き、 $z$  の解析関数であり  $z^*$  を含まないことが分かる。この時1電子状態が1つの量子数  $m$  のみによって指定される準1次元系が形成される。 $\hat{a}$  の定義を変えて、式(22)(23)の  $i$  及び  $-i$  をとると上述のボゾン演算子  $\hat{a}$  および  $\hat{b}$  を用いて、位置演算子は、

$$\hat{z} = \sqrt{2}\ell(b + a^\dagger) \quad (34)$$

$$\hat{z}^* = \sqrt{2}\ell(b^\dagger + a) \quad (35)$$

と表せ、

$$[z, z^*] = 0 \quad (36)$$

を満たす。原点のまわりの角運動量演算子は

$$\hat{L} = \hbar(b^\dagger b - a^\dagger a) \quad (37)$$

と表せ、式(25)より、ハミルトニアンと交換するため、原点のまわりの角運動量は運動の恒量である。

## 2.2 ラフリンの波動関数

GaAs/AlGaAs のヘテロ構造の2次元系で、Tsui, Stormer と Gossard[1, 2] らによって1982年に発見された分数量子ホール効果(FQHE)は、1983年にR. B. Laughlinにより古典的プラズマの類推を用いた非圧縮性量子液体描像により説明された。Laughlinは  $N$  体の電子が互い

にクーロン相互作用により反発し合う系の基底状態に対する変分関数として、次式で表されるいわゆる Laughlin の波動関数を導入した。

$$\Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{i<j}^N (z_i - z_j)^m \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2\right) \quad (38)$$

ただし、反対称性から  $m$  は奇数である。上式の表す状態はすべての電子対が相対角運動量  $m$  を持つ状態であり、全軌道角運動量  $M$  は

$$M = \frac{mN(N-1)}{2} \quad (39)$$

を持つ。さらに 2 体分布関数はある位置に固定された電子の近傍で相対距離の  $2m$  乗に従うことが分かる。

Laughlin はこの変分関数の導入により  $\nu = 1/m$  の系列の説明に成功を収めた [3]。上式で表される系の基底状態は励起状態とギャップを持ち、Laughlin はこの励起が分数電荷  $\pm e/m$  を持つ準粒子の励起であるという描像を考え、準空孔、及び、準電子の生成演算子として次のものを導入した。

$$\hat{S}_{z_0} = \prod_{i=1}^N (z_i - z_0) \quad (40)$$

$$\hat{S}_{z_0}^\dagger = \prod_{i=1}^N \left(2\frac{\partial}{\partial z_i} - z_0^*\right) \quad (41)$$

ただし点  $z = z_0$  に準粒子が生成されるものとする。従って、 $\nu = 1/m$  から準空孔または準電子が生成された励起状態は、

$$\hat{S}_{z_0} \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{i=1}^N (z_i - z_0) \prod_{i<j}^N (z_i - z_j)^m \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2\right) \quad (42)$$

$$\hat{S}_{z_0}^\dagger \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2\right) \prod_{i=1}^N \left(2\frac{\partial}{\partial z_i} - z_0^*\right) \prod_{i<j}^N (z_i - z_j)^m \quad (43)$$

で表される [3]。上式より直ちに、原点以外に準粒子が生成される時 ( $z_0 \neq 0$  の時)、

$$\langle m | \hat{S}_{z_0} | m \rangle \neq 0 \quad (44)$$

$$\langle m | \hat{S}_{z_0}^\dagger | m \rangle \neq 0 \quad (45)$$

であることが分かる。すなわち原点に準粒子が生成される時 ( $z_0 = 0$  の時) を除き、有限系では励起状態は基底状態と直交しない [24]。点  $z_0 (\neq 0)$  に準粒子が生成された状態を準粒子のも

つ角運動量  $k$  で次の様に、

$$\hat{S}_{z_0} \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \sum_{k=0}^N z_0^k S_k(z_1, z_2, \dots, z_N) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) \quad (46)$$

$$\hat{S}_{z_0}^\dagger \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \sum_{k=0}^N z_0^{*k} S_k^\dagger(z_1, z_2, \dots, z_N) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) \quad (47)$$

と展開する。ここで、 $z_0$  の展開係数

$$S_k(z_1, z_2, \dots, z_N) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) \quad (48)$$

$$S_k^\dagger(z_1, z_2, \dots, z_N) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) \quad (49)$$

は、励起した準粒子が角運動量  $k$  を持つ状態における電子の波動関数であり、各々の全軌道角運動量  $M'$  は、準空孔生成に対し、 $M' = M + N - k$  であり、準電子生成に対し、 $M' = M + k - N$  (ただし、 $k = 0, \dots, N$ ) である。上式を逆に解いて、電子の波動関数は

$$S_k \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \frac{1}{(2m)^{k+1} \pi k!} \int_0^\infty d^2 z_0 z_0^{*k} \exp\left(-\frac{|z_0|^2}{2m}\right) \prod_{i=1}^N (z_i - z_0) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N)$$

$$S_k^\dagger \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \frac{1}{(2m)^{k+1} \pi k!} \int_0^\infty d^2 z_0 z_0^k \exp\left(-\frac{|z_0|^2}{2m}\right) \prod_{i=1}^N \left(2 \frac{\partial}{\partial z_i} - z_0^*\right) \Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N)$$

とも表せる。例として、6 電子系の  $\nu = 1/3$  状態 (すなわち  $N = 6$  かつ  $m = 3$ ) からの 1 準粒子励起が起こった時の電子の波動関数のうち  $M' = 46$  および  $M' = 44$  の波動関数を次式に挙げる。

$$S_5 \Psi_3(z_1, z_2, \dots, z_6) = -(z_1 + z_2 + \dots + z_6) \times \Psi_3(z_1, z_2, \dots, z_6) \quad (50)$$

$$S_5^\dagger \Psi_3(z_1, z_2, \dots, z_6) = -\left(\frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{\partial}{\partial z_2} + \dots + \frac{\partial}{\partial z_6}\right) \Psi_3(z_1, z_2, \dots, z_6) \quad (51)$$

準空孔励起の描像については少数電子系における数値的厳密対角化計算による重なり積分の結果 [10] およびモンテカルロ計算による多粒子系での励起エネルギー [9] との比較により正しい描像であることが確認されている。Laughlin に続き、Haldane [5] はこれら  $\nu = 1/m$  から励起された準粒子が Bose 統計に従い、互いに短距離斥力で相互作用を行うものと仮定して  $\nu = 1/m$  および  $\nu \neq 1/m$  である実験で観測されるほとんど全ての分数充填率を得ることに成功した。

B. I. Halperin [4] も 1984 年に準粒子が分数統計に従い、互いに短距離斥力で相互作用するものと仮定することによって、Haldane と同様の分数列の計算に成功した。

しかしながら、分数電荷を持つ準電子励起の描像の正当性が、数値計算ないしは実験により確認されていない。さらに実験結果に現れる分数の順序や安定性を説明できないこと、高次

の娘世代においてあまりに多数の準粒子が励起されること、理論的に得られた分数充填率のときに必ずしもプラトーが見られないことなど明らかでない所が多いため、Laughlin の議論を再考する必要性が高まっている。

### 2.3 Jain の波動関数

J.K.Jain は縮退した仮想的なランダウ準位を考え、これら仮想的な準位間に Composite-Fermion と呼ばれる Fermi 統計にしたがう準粒子が励起されると考えて、これを LLL に写像することにより、実験で観測される充填率に関する分数列の順序およびホール抵抗率の分数量子化の安定性の議論 [6, 7, 8] にかんがりの成功を収めた。

Jain の Composite-Fermion Theory の基本的な解釈について以下に述べる。Composite-Fermion とは、クーロン相互作用により 1 電子に flux を 2 ずつ付与されることにより生成される Fermi 統計に従う準粒子であり、クーロン相互作用はこの Composite-Fermion を生成するために使われ、従ってこれら Composite-Fermion は互いに相互作用をしない仮想的な自由粒子として定義される (図 2 参照)。これら Composite-Fermion は先に述べた縮退した仮想的なランダウ準位間で励起される。仮想的なランダウ準位のうち最低ランダウ準位にすべての Composite-Fermion が属する状態は Laughlin の  $1/m$  状態に他ならず、これが基底状態を表す。実際の電子の励起状態は相互作用をしない Composite-Fermion が仮想的なランダウ準位間で励起された状態を LLL へ射影することにより得られる。Jain の Composite-Fermion Theory によれば、 $\Phi_1$  を filled LLL の波動関数とすると、実験により観測される分数列は、 $\Phi_1$  に、以下に述べる 3 種の演算子  $\hat{D}, \hat{C}, \hat{L}$  を作用させた後に LLL に写像することにより得られる [8, 25]。その結果、Halperin-Haldane の階層構造に現れる充填率がすべて得られる。従って、Jain の理論に基づく階層構造にも実験に現れない分数充填率が存在する。それでもなお、 $\nu = 1/m$  状態においては Laughlin の波動関数と一致すること、ホール抵抗の量子化の強さをも説明しうることは極めて重要であり、Jain の Composite-Fermion Theory が Halperin-Haldane の階層構造よりも的確に分数量子ホール効果を説明することを示している。さて、次の演算子  $\hat{D}$  を導入する。

$$\hat{D} = \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^2 \quad (52)$$

$\hat{D}$  は 1 電子に flux を 2 ずつ付与し、Composite-Fermion を生成する演算子である。また、

$$\Phi_{1-\nu} = \hat{C}\Phi_\nu \quad (53)$$

で表される演算子  $\hat{C}$  は粒子空孔共役を表す演算子である。したがって、 $\nu = 1/m$  状態にこの演算子を演算させると  $\nu = 1 - 1/m$  なる  $\nu = 1/m$  状態の粒子空孔共役状態が得られる。更に

$$\Phi_{1+\nu} = \hat{L}\Phi_\nu \quad (54)$$

の関係で定義される演算子  $\hat{L}$  は Composite-Fermion に対し仮想的なランダウ準位を付加する演算子であり、 $\Phi_1$  で表される最低ランダウ準位 (LLL) にこれを演算させると縮退した2つの仮想的なランダウ準位に分布する Composite-Fermion と呼ばれる準粒子の励起を考えるモデルとなる。各々の演算により、充填率は次のように変化する。

$$D^n(\nu) \rightarrow \frac{\nu}{2n\nu + 1} \quad (55)$$

$$C(\nu) \rightarrow 1 - \nu \quad (56)$$

$$L(\nu) \rightarrow 1 + \nu \quad (57)$$

例として2つのランダウ準位が縮退したモデルを考える。すなわち、 $\Phi_1$  に  $\hat{L}$  を作用させたモデルである。このモデルにより得られる分数充填率には  $\nu = 2/5 (\hat{D}\hat{L}\Phi_1)$ ,  $\nu = 2/9 (\hat{D}^2\hat{L}\Phi_1)$ ,  $\nu = 3/5 (\hat{C}\hat{D}\hat{L}\Phi_1)$  等がある。

強磁場下でランダウ準位間の混成がなく、LLL に全ての電子が属する状態において1体の波動関数はその指数部分を除き、 $z$  の解析関数で表され、 $z^*$  を含まない。一方、 $n$  番目のランダウ準位においては電子の1体の波動関数はその指数部分以外にも一般に、 $z^{*n}$  の項を含んでいる。そこで、波動関数を LLL に写像するためには  $z^*$  を含む項を  $z$  の解析関数に適切に写像することが必要となる。 $n = 1$  の 1st-LL では1電子の波動関数は  $z^*$  の高々1次式であるが、一般に次の項  $z^{*l}z^{l+s}$  を LLL に写像することを考える。高次のランダウ準位まで含めた1体の波動関数  $\phi_{l,s}$  は正規直交完全系を成すのでこれにより、

$$z^{*l}z^{l+s} \exp\left(-\frac{z^*z}{4}\right) = \sum_{l'=0}^l a_{l'} \phi_{l',s}(z, z^*) \quad (58)$$

と展開する。ここで、高次のランダウ準位まで含めた1体の波動関数は、

$$\begin{aligned} \phi_{l,s}(z, z^*) &= [2\pi 2^s l! (l' + s)!]^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{zz^*}{4}\right) \times \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^{l'} z^{l'+s} \exp\left(-\frac{zz^*}{2}\right) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \exp(is\theta) \sqrt{\frac{l!}{(l' + s)!}} \exp\left(-\frac{z^*z}{4}\right) \left(\frac{z^*z}{2}\right)^{\frac{s}{2}} L_{l'}^s\left(\frac{zz^*}{2}\right) \end{aligned} \quad (59)$$

であり、ラゲール陪多項式の直交性により、展開係数  $a_{l'}$  は

$$a_{l'} = (-1)^{l'} \sqrt{\frac{2\pi 2^{s+2l}}{(l'+s)!l!}} \times \frac{(s+l)!l!}{(l-l')!} \quad (60)$$

と求められる。従って、十分大きな  $s$  に対し、

$$\frac{a_{l'+1}}{a_{l'}} = O\left(\frac{1}{\sqrt{s}}\right) \quad (61)$$

であるから、 $l'=0$  の項を、すなわち仮想的な LLL の項のみを考えれば十分である。この時、

$$z^{*l} z^{l+s} \exp\left(-\frac{z^* z}{4}\right) \simeq a_0 \phi_{0s} = \exp\left(-\frac{z^* z}{4}\right) \left[2 \frac{\partial}{\partial z}\right]^l z^{l+s} \quad (62)$$

となり、LLL への射影は  $z^*$  を形式的に  $2 \frac{\partial}{\partial z}$  で置き換え、微分演算子は指数部分には演算させないと約束すれば良いことが分かる。

$t$  個の準粒子が 1st LL にあり、 $s$  個の準粒子が LLL にあるとする時の電子の波動関数は、

$$\Phi_2[s, t] = \hat{P} \begin{bmatrix} z_1^* & z_2^* & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & z_N^* \\ z_1^* z_1 & z_2^* z_2 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & z_N^* z_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ z_1^* z_1^{t-1} & z_2^* z_2^{t-1} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & z_N^* z_N^{t-1} \\ 1 & 1 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 \\ z_1 & z_2 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & z_N \\ \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ z_1^{s-1} & z_2^{s-1} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & z_N^{s-1} \end{bmatrix} \times \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^2 \exp\left(-\frac{1}{4l^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2\right) \quad (63)$$

である。ただし  $N = s+t$  であり、準粒子は原点に生成されるものとする。 $\hat{P}$  は LLL への射影演算子であり粒子数  $N$  が十分大きく、さらに仮想的な LLL に十分多数の準粒子が属している時には、上述の理由により、 $z^*$  を  $2 \frac{\partial}{\partial z}$  で置き換えれば良い。このときの全軌道角運動量  $M$  は、

$$M = \frac{s(s-1) + t(t-3)}{2} + N(N-1) \quad (64)$$

である。少数電子系 ( $N = 4, 5, 6$ ) で 1 準電子励起 ( $t = 1$ ) が起こった状態と disk geometry または spherical geometry を持つ、電子が互いに Coulomb 相互作用をし合う系において、対角化計算により求められた真の基底状態との重なり積分は 0.99 を越える。

Jain の提唱した準電子が励起された状態の波動関数は、充填率  $\nu$  が  $1/m$  または  $1 - 1/m$  の時を除き、Laughlin やその他の提唱した波動関数とは異なっている [26]。

共通する点は、対応する分数量子ホール状態における全軌道角運動量が一致すること、 $\nu =$

1/m 状態で両者が一致すること、さらに占有された1体の軌道角運動量の最大値が減少することが挙げられる。

## 2.4 粒子空孔対称性

前節の粒子空孔共役演算子  $\hat{C}$  は次式により定義される。

$$\begin{aligned} & \Phi_{1-\nu}(z_1, \dots, z_N) \\ &= \hat{C}\Phi_\nu = \int_0^\infty d^2z_{N+1} \cdots d^2z_{N+Q} \Phi_\nu^*(z_{N+1}, \dots, z_{N+Q}) \Phi_1(z_1, \dots, z_{N+Q}) \end{aligned} \quad (65)$$

上式で表される演算子  $\hat{C}$  を  $\nu = 1/m$  の波動関数に作用させてみる。

$$\begin{aligned} & \Phi_{1-\frac{1}{m}}(z_1, \dots, z_N) \\ &= \int_0^\infty d^2z_{N+1} \cdots d^2z_{N+Q} \prod_{i<j}^Q (z_{N+i}^* - z_{N+j}^*)^m \exp\left(-\frac{1}{4l^2} \sum_{i=1}^Q |z_{N+i}|^2\right) \\ & \times \Phi_1(z_1, z_2, \dots, z_{N+Q}) \end{aligned} \quad (66)$$

この粒子空孔共役状態での  $N$  体系における全軌道角運動量  $M$  は、

$$M = \frac{(N+Q)(N+Q-1)}{2} - \frac{mQ(Q-1)}{2} \quad (67)$$

である。例として、 $\frac{2}{3}(\hat{C}\hat{D}\Phi_1)$  状態の全軌道角運動量を求めてみる [27]。電子が  $\nu = 1/3(\hat{D}\Phi_1)$  の時に占めていた面積と同じ面積を空孔が  $\nu = 2/3$  の時に占めるとすると、

$$N + Q = mQ \quad (68)$$

よって、 $Q = \frac{N}{m-1}$  個の空孔が  $\nu = 2/3$  の時に生成される。充填率は熱力学極限において次式により定義される。

$$\nu = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(N-1)/2}{M} \quad (69)$$

したがって、1/m 状態の粒子空孔共役状態における充填率は熱力学極限において、

$$\nu = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(N-1)/2}{M} = 1 - \frac{1}{m} \quad (70)$$



となる。本研究においては有限系を扱うので、有限粒子系においては $\nu$ を

$$\nu = \frac{N(N-1)/2}{M} \quad (71)$$

と定義することとする。本研究において報告する結果は主に6電子系に関するものであり、この電子系における $\nu = 1/3$ 状態( $N = 6$ かつ $m = 3$ の時)では $Q = 3$ であるから、 $\nu = 2/3$ の全軌道角運動量 $M$ は27であることが分かる。

本研究の数値的厳密対角化の結果と比較すると、やはり占有された1体の最大角運動量は $\nu = 1/3$ の時と等しい値15を持っていることが分かった。

### 3 定式化

#### 3.1 モデルハミルトニアン

第一量子化表示でのモデルハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \quad (72)$$

ただし、各項は各々、

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^N (\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}_i)^2 \quad (73)$$

$$\hat{V}_1 = +\frac{1}{2} m_e \omega^2 \sum_{i=1}^N |z_i|^2 \quad (74)$$

$$\hat{V}_2 = +\frac{e^2}{\epsilon_0} \sum_{i < j}^N \frac{1}{|z_i - z_j|} \quad (75)$$

ただし $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ である。また、 $z = x - iy$ とおいた。上記のモデルは放物線型のポテンシャルによって閉じ込められた $N$ 個の電子がクーロン相互作用により互いに反発しあうモデルである。このようなdisk geometryをもつ系は以前から対角化によりいくつかの研究がなされている[16, 17, 18]。放物線型の閉じ込めポテンシャルが十分強い極限で0次元を表すこのモデルは半導体上に作成された量子井戸に閉じ込められた電子系を表す良いモデルとして考えられており、量子ドット系と呼ばれる。

式(31)のLLLにおける1体の波動関数 $\phi_m(z)$ を用い、次の場の演算子を導入し、このモデルハミルトニアンの第2量子化を行う。ただし、強磁場極限を考えているためLLLに属する1体波動関数の線形結合をとる。

$$\hat{\psi}(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \phi_m(z) a_m \quad (76)$$

第2量子化されたハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{m=0}^{\infty} \langle m | \hat{H}_0 | m \rangle a_m^\dagger a_m + \sum_{m=0}^{\infty} \langle m | \hat{V}_1 | m \rangle a_m^\dagger a_m \\ & + \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2 m_3 m_4} \langle m_1 m_2 | \hat{V}_2 | m_3 m_4 \rangle \hat{a}_{m_1}^\dagger \hat{a}_{m_2}^\dagger \hat{a}_{m_3} \hat{a}_{m_4} \end{aligned} \quad (77)$$

である。ただし、全角運動量の保存則より、第3項目の和は、 $m_1 + m_2 = m_3 + m_4$  を満たすものに限られる。なお、ハミルトニアンの各項の行列要素は

$$\langle m | \hat{H}_0 | m \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_c \quad (78)$$

$$\langle m | \hat{V}_1 | m \rangle = \frac{1}{2} m_e \omega^2 \ell^2 (m+1) \quad (79)$$

$$\begin{aligned} & \langle m_1 m_2 | \hat{V}_2 | m_3 m_4 \rangle \\ = & \left( \frac{e^2}{\epsilon_0 \ell} \right) 2^{-d} \frac{1}{\sqrt{(M-k)! k! (k+d)! (M-k-d)!}} \frac{\Gamma(M-k+1) \Gamma(k+d+1)}{\Gamma^2(d+1)} \\ & \times \int_0^\infty dx x^{2d} {}_1F_1(M-k+1; d+1; -\frac{x^2}{2}) {}_1F_1(k+d+1; d+1; -\frac{x^2}{2}) \end{aligned} \quad (80)$$

である(補遺を参照)。ただし、

$$\begin{aligned} m_1 &= M - k \\ m_2 &= k \\ m_3 &= k + d \\ m_4 &= M - k - d \end{aligned} \quad (81)$$

とおいた。ここに  ${}_1F_1$  は Kummer の合流型超幾何関数を表す。 $\langle m | \hat{H}_0 | m \rangle$  の項は定数項であるため、今後はこの項を割愛して考える。このモデルハミルトニアンにおいて現実の系に存在する正の背景中和電荷が無視されていることは注意を要する。クーロン相互作用と閉じ込めポテンシャルの競合により閉じ込めポテンシャルの強さがある領域にあるとき、量子ホール状態が出現することが期待される。また、クーロン相互作用  $\hat{V}_2$  の行列要素は Haldane の Pseudo potential( $V_m$ )[23, 28, 29] を用いると

$$\begin{aligned} & \langle m_1 m_2 | \hat{V}_2 | m_3 m_4 \rangle \\ = & \delta_{m_1+m_2, m_3+m_4} \prod_{i=1}^4 (2^{m_i} m_i!)^{-\frac{1}{2}} \\ & \times \sum_{m=0}^{m_1+m_2} (m_1+m_2)! m! V_m \sum_{\lambda} \binom{m_1}{\lambda} \binom{m_2}{m-\lambda} (-1)^{(m-\lambda)} \end{aligned}$$

$$\times \sum_{\lambda'} \binom{m_3}{\lambda'} \binom{m_4}{m-\lambda'} (-1)^{\lambda'} \quad (82)$$

とも表せる。詳細は補遺を参照のこと。ただし、2体の電子の波動関数の反対称性により  $m$  は奇数であり、

$$V_m^{\text{Coulomb}} = \frac{\sqrt{\pi}(2m)!}{2^{2m+1}(m!)^2} \quad (83)$$

$$(m = 1, 3, 5, \dots) \quad (84)$$

である。分数量子ホール効果における  $\nu = 1/3$  状態を研究する際に、 $1/3$  ラフリン状態がゼロエネルギーを持つ厳密な基底状態となるハミルトニアンを考えることがある。これは相対角運動量が1である電子対にのみ斥力が働く相互作用を仮定した擬ポテンシャルである。クーロン相互作用を相対角運動量  $m$  で展開し、 $m$  の和 (すなわち相対角運動量の和) を  $m = 1$  で打ち切り  $V_1$  のみを残し  $V_m$  ( $3 \leq m$ ) をゼロとする短距離化されたモデルポテンシャルを考えることに対応する。このモデルポテンシャルは Hardcore Model [12, 23, 28] または Short Range Model (SRM) と呼ばれる。SRM を数値的に厳密に対角化するとその基底状態として有限電子系の第2量子化表示によるラフリン状態が得られ、モデルとして採用された系の基底状態との重なり積分が計算可能となる。このために対角化による分数量子ホール効果の研究において、しばしばこのモデルポテンシャルが用いられてきた。

$$V_1^{\text{Hardcore}} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}, \quad V_m^{\text{Hardcore}} = 0 \quad (m > 1) \quad (85)$$

である。

### 3.2 基底の表現とハミルトニアン行列の生成

$\lambda_i$  を一体の角運動量としたとき、角運動量の列、

$$[\lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N] \quad (86)$$

が  $N$  体の基底ベクトルを指定する量子数である。ただし  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$  とする。これらを用いて、

$$|[\lambda]\rangle = \hat{a}_{\lambda_1}^\dagger \hat{a}_{\lambda_2}^\dagger \dots \hat{a}_{\lambda_N}^\dagger |0\rangle \quad (87)$$

を  $N$  体の基底ベクトルとする。このとき、全角運動量が等しい2つの状態に対し直交性

$$\langle [\nu] | [\mu] \rangle = \delta_{[\nu], [\mu]} \quad (88)$$

が成り立つ。これらの基底ベクトルに対しハミルトニアン行列を生成する。ただし、全角運動量の保存則から、系の全軌道角運動量により、ブロック対角化が可能である。そこで、全軌道角運動量を固定した部分空間で各々対角化を行う。すると、

$$|\Phi_0\rangle = \sum_{[\lambda]} C_{[\lambda]} |[\lambda]\rangle \quad (89)$$

なる形で基底状態の固有ベクトルが得られることになる。

これまでに為された数値的対角化計算においては、対角化すべきハミルトニアン行列の次元を下げるため、1体の角運動量に上限を入れるという近似が用いられることが多い。この近似を用いた計算は closed boundary condition を採用した計算と呼ばれ、これを用いると分布関数を正確に計算することが困難であった。そこで本研究においてはこの近似を用いず、電子系の素励起に関連した角運動量分布関数などを厳密に扱える open boundary condition を採用して対角化計算を行う。

### 3.3 対角化の手法

前節までに述べた手法により、行列要素  $\langle [\lambda] | \hat{H} | [\lambda'] \rangle$  を求め、これを対角化する。上記の基底を用いた表現では、ハミルトニアン行列のもつ対称性は全角運動量に対するもののみであり、ブロック化された部分空間の次元は、 $\nu = 1/3$  状態が基底状態となっていることを確認するためには、6体で最大  $2432 \times 2432$  次元、7体で  $16475 \times 16475$  次元と非常に大きいものとなる。このような大規模行列の対角化の手法としてはランチョス法 [30] が知られている。

ランチョス法は行列を3重対角化する手法であり、大規模行列の積を伴うために全固有値を求めるためには速度および演算回数の点で難点があるが、基底状態やいくつかの励起状態を求めるためにはごく少数回の行列の積演算しか必要とせず計算が高速に行える。このため、本研究には適している。ランチョス法により3重対角化された行列の固有値はスツルムの定理を用いたバイセクション法 [30] あるいは QR 法 [30] により容易に求められる。

また、固有ベクトルを求めるにあたっては、逆反復法 [30] を主として用いたが収束をさらに高めるために原点移動付き逆反復法をも併用した。逆反復法で必要となる大規模行列 (ハミルトニアン行列) の逆行列は共役傾斜法 (CG法) [30] を用いると、行列の次元に比べごく少数回の行列の積だけで求められ (数万  $\times$  数万の行列に対し数十回程度)、計算の高速化の一端を担っている。また相互作用の項を考えると Coulomb 相互作用が長距離力であるため、行列要素のうち非ゼロ要素が極めて多く存在する。従って最も計算時間を要しているのはハミルトニアン行列の非ゼロ要素の生成である。

### 3.4 物理量の計算

前節まででエネルギー固有値および基底状態が求まったので、本節では電荷密度および2体分布関数および1体の角運動量分布を計算する。以下、 $|\Phi_0\rangle$  は基底状態を表すものとする。まず、1体の角運動量分布関数を求める。その定義は、

$$n_m = \langle \Phi_0 | a_m^\dagger a_m | \Phi_0 \rangle = \sum_{[\lambda]} |C_{[\lambda]}|^2 \langle [\lambda] | a_m^\dagger a_m | [\lambda] \rangle \quad (90)$$

であり、 $\langle [\lambda] | a_m^\dagger a_m | [\lambda] \rangle$  のうち、非ゼロ要素は、 $m \in [\lambda]$  なる  $[\lambda]$  のみである。ただし、

$$M = \sum_{m=0}^{\infty} \langle \Phi_0 | m a_m^\dagger a_m | \Phi_0 \rangle \quad (91)$$

となるように、 $C_{[\lambda]}$  は規格化されているものとする。次に電荷密度分布  $n(z)$  を求める。

$$n(z) = \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^\dagger(z) \hat{\psi}(z) | \Phi_0 \rangle \quad (92)$$

ここで、場の演算子  $\psi(z)$  の定義は、本来、高位のランダウ準位の和も含み、

$$\hat{\psi}(z) = \sum_{nm} \phi_{nm}(z) a_{nm} \quad (93)$$

であるが、強磁場下であるため  $n=0$  の LLL のみについて線形結合をとる。即ち、

$$\hat{\psi}(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \phi_m(z) a_m \quad (94)$$

$\phi_m(z)$  はもはや完全系を成さず LLL の部分空間を張るのみであることに注意を要する。電荷密度分布関数  $n(z)$  は、式 (90) の  $n_m$  を用いて次のように表される。

$$n(z) = \frac{1}{\Omega} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{[\lambda]} |C_{[\lambda]}|^2 \phi_m(z) \phi_m^*(z) \langle [\lambda] | a_m^\dagger a_m | [\lambda] \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{m=0}^{\infty} \phi_m(z) \phi_m^*(z) \langle n_m \rangle \quad (95)$$

さらにこれを

$$N = \int d^2z \langle \Phi_0 | \hat{n}(z) | \Phi_0 \rangle \quad (96)$$

なる規格化条件により再規格化すると規格化定数  $\Omega$  は

$$\Omega = \sum_{[\lambda]} |C_{[\lambda]}|^2 \quad (97)$$

である。さらに、2体分布関数  $n(z, z')$  を、

$$n(z, z') = \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^\dagger(z) \hat{\psi}^\dagger(z') \hat{\psi}(z') \hat{\psi}(z) | \Phi_0 \rangle \quad (98)$$

と定義する。  $n(z, z')$  と同様に場の演算子  $\psi(z)$  を LLL のみの線形結合で張ると、

$$n(z, z') = \sum_{m_1 m'_1 m_2 m'_2} \phi_{m_1}(z) \phi_{m_2}(z') \phi_{m'_1}^*(z) \phi_{m'_2}^*(z') \langle \Phi_0 | a_{m'_1}^\dagger a_{m'_2}^\dagger a_{m_2} a_{m_1} | \Phi_0 \rangle \quad (99)$$

である。ここで、2体相互作用の項  $\langle \Phi_0 | a_{m'_1}^\dagger a_{m'_2}^\dagger a_{m_2} a_{m_1} | \Phi_0 \rangle$  のうち、非ゼロ要素を与えるものは対角項、

$$\langle [\alpha] | a_{m'_1}^\dagger a_{m'_2}^\dagger a_{m_2} a_{m_1} | [\alpha] \rangle \quad (100)$$

および、非対角項

$$\langle [\alpha] | a_{m'_1}^\dagger a_{m'_2}^\dagger a_{m_2} a_{m_1} | [\beta] \rangle \quad (101)$$

である。ただし、非対角要素については全角運動量保存則とクーロン相互作用が2体相互作用であることより、 $[\alpha]$  と  $[\beta]$  の要素のうち2つのみが異なるものが非ゼロ要素を与える。これらをそれぞれ、 $\alpha_k, \alpha_l (k < l)$  および  $\beta_i, \beta_j (i < j)$  とする。このとき、2体分布関数  $n(z, z')$  は

$$\begin{aligned} n(z, z') &= \sum_{[\alpha]} \sum_{i < j} |C_{[\alpha]}|^2 \phi_{m_1}(z) \phi_{m_2}(z') \phi_{m'_1}^*(z) \phi_{m'_2}^*(z') (\delta_{m_1 \alpha_j} \delta_{m_2 \alpha_i} - \delta_{m_1 \alpha_i} \delta_{m_2 \alpha_j}) \\ &\times (\delta_{m'_2 \alpha_i} \delta_{m'_1 \alpha_j} - \delta_{m'_2 \alpha_j} \delta_{m'_1 \alpha_i}) \\ &+ \sum_{[\alpha]} \sum_{[\beta]} \sum_{i < j} \sum_{k < l} C_{[\alpha]}^* C_{[\beta]} \phi_{m_1}(z) \phi_{m_2}(z') \phi_{m'_1}^*(z) \phi_{m'_2}^*(z') \\ &\times (-1)^{j-i+l-k} (\delta_{m_2 \beta_i} \delta_{m_1 \beta_j} - \delta_{m_2 \beta_j} \delta_{m_1 \beta_i}) (\delta_{m'_1 \alpha_l} \delta_{m'_2 \alpha_k} - \delta_{m'_1 \alpha_k} \delta_{m'_2 \alpha_l}) \end{aligned} \quad (102)$$

と表せる。ただし  $[\beta]$  の和の  $'$  は  $[\beta] \neq [\alpha]$  なる  $[\beta]$  に対する和を示すものとする。上記の方法により、物理量として1体の角運動量分布関数、電荷密度分布関数、および2体分布関数を計算した。実際の数値計算においては、長さは磁氣的長さ  $\ell$  でスケールし、エネルギーは  $e^2/(\epsilon_0 \ell)$  でスケールした。電子数  $N$  の他にパラメータとして閉じ込めの強さを表す無次元パラメータ  $\gamma$  が

$$\gamma = \frac{1/2 m^* \omega^2 \ell^2}{e^2/(\epsilon_0 \ell)} \quad (103)$$

で定義される。この無次元パラメータは閉じ込めポテンシャルの強さとクーロン相互作用の強さの比を表す。

## 4 計算結果およびその解釈

### 4.1 エネルギー固有値

まず、4-7 電子系に対し、閉じ込めの強さのパラメータ  $\gamma$  を変化させ、系の保存量である全軌道角運動量  $M$  によってブロック化された部分空間に対し、ランチョス法により各々最低エネルギー固有値を計算した。6 電子系の数値的厳密対角化により求められた全軌道角運動量  $M$  に対する最低固有値のグラフを図3に示す。図3において特定の  $M$  の値に対しエネルギー固有値に下向きのカスポが見出される。さらに、これらのカスポはすべて以下に述べる2つの系列からなることが判明した。第一の魔法角運動量の系列の存在は Maksym および Chakraborty らによって5 電子以下の系での出現が既に報告されている [18]。これは全軌道角運動量  $M$  が、

$$M = \frac{N(N-1)}{2} + N \times k \quad (k = 0, 1, \dots) \quad (104)$$

すなわち  $\Delta M = N$  を満たす系列である。Jain らは近年6 電子系においてもその存在を発見し、カスポのうちの幾つかは Jain の Composite-Fermion Theory により分数量子ホール状態に対応するものとして解釈が可能であることを確認した [21]。

本研究では、この下向きのカスポの現れる魔法角運動量には、6 電子系において  $M = 15$  (filled LLL) から始まる周期6の第一の系列以外にも、周期5の第二の系列が存在し、カスポはすべてこれらの2つの系列に属することをハミルトニアンの数値的厳密対角化により発見した。それぞれを  $M_6$ ,  $M_5$  とすると、その魔法角運動量は各々、

$$M_6 = 15 + 6k \quad (k = 0, 1, \dots) \quad (105)$$

$$M_5 = 15 + 5l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (106)$$

と表せる。すなわち、 $M_5$  に対応する新たなカスポの系列として、

$$M = \frac{N(N-1)}{2} + (N-1) \times l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (107)$$

が ( $\Delta M = N - 1$  の系列が) 見出された。

Jain の Composite-Fermion Theory によると、系の全軌道角運動量  $M$  と分数量子ホール状態の充填率  $\nu$  の対応は6 電子系において次の通りである (式 (63), (64), (69) 参照)。

$$M = 45 \quad (\nu = \frac{1}{3}, \Phi_2[6, 0])$$

$$M = 33 \quad (\nu = \frac{2}{5}, \Phi_2[3, 3])$$

$$M = 27 \quad (\nu = \frac{2}{3})$$

$$M = 15 \quad (\nu = 1)$$

$$M = 57 \quad (\nu = \frac{2}{7})$$

分数量子ホール状態の他にも分数量子ホール状態から準粒子が励起した状態として

$$M = 39 \quad (\Phi_2[5, 1])$$

$$M = 35 \quad (\Phi_2[4, 2])$$

等は (63) 式の Jain の波動関数  $\Phi_2[s, t]$  により説明が可能である。これらの角運動量はすべて魔法角運動量である。しかしながら図 3 においては Jain の理論では説明ができない魔法角運動量も依然として存在しており ( $M = 21, 25, 30, 40, 50$  等)、これらの魔法角運動量状態においてカスプの出現する理由は明らかでない。これら  $M_6$  および  $M_5$  が一致する全軌道角運動量の値を持つ状態の充填率は、 $\nu = 1$  ( $M = 15$ : filled LLL) および  $\nu = 1/m$  ( $M = 45, 75, \dots$ ) であることは重要であると考えられる。4,5 電子系についても全く同じ事情が成り立つ。結果を図 4,5 に示す。

次に 7 電子系について結果を図 6 に示す。7 電子系においては、エネルギーカスプの現れる魔法軌道角運動量のうち、 $\Delta M = N - 1$  の系列が強く現れ、 $\Delta M = N$  の系列が消失している。これは 6 電子以下の系においては見られなかった事情である。

重要な点をまとめると、本研究により 7 電子以下の少数電子系において、新たな魔法軌道角運動量の系列  $\Delta M = N - 1$  を発見した。6 電子以下の系では魔法角運動量の系列が、 $\Delta M = N$  と  $\Delta M = N - 1$  である。粒子数  $N$  が小さい 4 電子系や 5 電子系等では系列  $\Delta M = N$  が支配的であるのに対し、粒子数の比較的大きい 7 電子系では  $\Delta M = N - 1$  の系列が系列となり、 $\Delta M = N$  なる系列は消失していることが分かった。

## 4.2 一体角運動量分布関数

次に、前節で述べた下向きのカスプに対応した  $M$  の基底状態における 1 体の角運動量分布関数  $n_m$  を求める。これまで、角運動量分布関数は変分モンテカルロ法を用い計算されてきたが [31]、多粒子系の素励起を論ずるのに足る十分な精度が得られていない。そこで扱える電子の粒子数は少ないが対角化計算ではこれが厳密に求まることに注目し、これを計算する。本論文では主に 6 電子系における結果を報告する。角運動量分布関数は閉じ込めの強さ  $\gamma$  が増大す



るにつれて6電子系では、 $M = 51$  から  $M = 30$  に向かってカスプの状態を調べると、原点付近とドットの外縁部に2つのピークをもつタイプの分布とドットの外縁部のみにピークをもつタイプの分布が交互に入れ替わることが分かった(図7,8,9参照)。これらの図は、2つのピークを持つ分布と単一のピークをもつ分布が交互に入れ替わる事を示している。1体においての系の面積の期待値に対し、

$$\langle m|r^2|m \rangle = 2\ell^2(m+1)$$

が成り立つことを考えると定性的に、1体の角運動量分布関数に2つのピークを持つ状態は原点付近とドット外縁に大きな存在確率を持つこと、1体の角運動量分布関数に1つのピークをもつ状態はドット外縁に大きな存在確率を持ち原点付近ではその存在確率が小さいことが分かる。さらに1体の角運動量分布関数に1つのピークをもつ状態はすべてその全軌道角運動量  $M$  が  $M_6$  に属すること、1体の角運動量分布関数に2つのピークをもつ状態はすべてその全軌道角運動量  $M$  が  $M_5$  に属することが分かる。以上の性質は6電子以下の系(4,5電子系)においても全く同様である。

また、1体の角運動量分布関数を厳密に計算することにより、占有された最大の1体の角運動量 ( $m_{\max}$ ) が計算可能となる。この  $m_{\max}$  は上式より系の面積を指定する量子数であるがこれを計算することにより、これまで提起された様々な試行関数の正当性を定性的に確かめることが可能となる。簡単な例として6電子系のラフリンの1/3状態を考える。各軌道角運動量に対する占有数の期待値は、本研究の数値計算により、 $0.1417663520$  ( $m = 14$ ),  $4.957023255 \times 10^{-2}$  ( $m = 15$ ),  $2.692716354 \times 10^{-3}$  ( $m = 16$ ),  $1.274333350 \times 10^{-3}$  ( $m = 17$ ) である。これと図7より  $m_{\max}$  は15と定義できる。一方、ラフリンの波動関数では

$$\Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^m \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \sum_{i=1}^N |z_i|^2\right)$$

より、占有された最大の1体の角運動量  $m_{\max}$  が6体では15となる。1/3状態は6電子系においても基底状態の良い変分関数となっていることが重なり積分の結果により知られている。本研究の計算結果により得られた  $m_{\max}$  とラフリンの理論に基づく  $m_{\max}$  が一致した事実はこのことを裏付けている。

### 4.3 電荷密度分布関数

前節で述べた6電子系の1体の角運動量分布関数に2つのピークを持つ状態および単一のピークをもつ状態に対し、電荷密度を計算した。その結果、前節で予想したように魔法角

運動量状態において、電荷密度分布には2つのピークを持つ分布および単一のピークをもつ分布が見出された(図10,11参照)。まず、1体の角運動量分布関数に2つのピークを持つ状態( $\Delta M = N - 1$ の系列に属する状態)における電荷密度分布は原点付近およびドットの外縁部にピークを持つ分布となることが分かった。次に、1体の角運動量分布関数に単一のピークをもつ状態( $\Delta M = N$ の系列に属する状態)における電荷密度分布は原点付近には存在確率が小さく、ドットの外縁部付近にピークを持つ分布となることが判明した。この事情は4-7電子系に共通している。

少数電子系の $\nu = 1/3$ 状態においてはDunneらのラフリン波動関数のスレーター行列式による分解[32]によりラフリン波動関数で表される基底状態の電荷密度分布が計算され報告されている。その結果、ラフリン状態の電荷密度分布は原点付近とドット外縁部に2つのピークを持つことが報告されており、これは本研究における対角化計算で得られた結果(図12参照)と定性的に良い一致を見せている。前節で注釈したように $\nu = 1/m$ 状態は $\Delta M = N$ および $\Delta M = N - 1$ の系列の両方に属している。

1体の角運動量分布関数および本節で計算した電荷密度分布の計算結果から $N$ 電子系において、下向きのカスプに対応する状態ではドットの内部での電子の配置がクーロン相互作用および閉じ込めポテンシャルの競合により $N - 1$ 回対称または $N$ 回対称となる確率が大きいと推論できる。6電子系を例として、5回対称および6回対称性を持つドット内の電子の配置を図13に示す。

#### 4.4 二体分布関数

ドット内部における電子の配置に関する前節の推論が正しいか否かを確かめるため、主に6,7電子系において2体分布関数を数値的に厳密に計算した。この系における2体分布関数 $n(z, z')$ は、MacDonaldらによって[33]変分モンテカルロ法により、disk geometryでの動径分布が為されていたが、本研究においては $z'$ を電荷密度分布関数のドット外端部のピークの位置に固定して、2体分布関数 $n(z, z')$ の角度分布をも併せて計算した。

その結果、6電子系では全軌道角運動量対エネルギー固有値のグラフに見出された下向きのカスプに対応する魔法角運動量状態において電子の配置が、5回対称性または6回対称性を持つことが分かった。この対称性のために $\Delta M = 5$ および $\Delta M = 6$ の系列で全軌道角運動量対エネルギー固有値のグラフに下向きのカスプが交互に現れること、さらにラフリンの $1/m$ 状態は5回および6回対称性を共に持つことが判明した(図14,15,16,17,18,19参照)。

$1/m$ ラフリン状態はこれらの対称性を併せ持つため、その共鳴エネルギーから安定な状態になると推論した。2体分布関数の計算結果からこの推論は正しいことが示され、量子ドット系において見出された下向きのカスポに対する統一的な説明が為されたことになる。比較のため、非カスポ状態である  $M = 34$  の2体分布関数を図20に示す。魔法角運動量を持たない状態においては5回対称性も6回対称性も存在しない事が分かる。以上の議論は本研究の計算結果により少なくとも6電子系までに対しては正しい。7電子系についての結果は、図21,22,23,24に示す。また、エネルギー固有値の節で述べたように、7電子系については  $\Delta M = 7$  の列が消失し、さらに  $\Delta M = 6$  の列が強く残るため、6回対称な配置は見出せたが、系列  $M_7$  に属する全軌道角運動量を持つ状態においても7回対称な配置は見られなかった。

#### 4.5 回転対称性と全軌道角運動量

前節で、6電子系では魔法角運動量状態においてドット内の電子の空間的な配置が5回対称または6回対称となることを述べ、さらにこれらの状態で生じるエネルギーカスポが各々  $\Delta M = 5$  または  $\Delta M = 6$  の系列に属するカスポであることを報告した。本節では、P. A. Maksym や R. Wenying[34] らの議論をふまえて、これら回転対称性と全軌道角運動量との関係について考察し、 $N$ 回対称性をもつ安定な状態がなぜ系列  $\Delta M = N$  で起こり、 $N - 1$ 回対称性をもつ安定な状態がなぜ系列  $\Delta M = N - 1$  で生じるのかを解明することを目的とする。全軌道角運動量演算子を  $\hat{M}$  とし、回転角を  $\phi$  とすると、

$$\exp(i\hat{M}\phi)\Phi(z_1, z_2, \dots, z_N, \theta_1, \dots, \theta_N) = \Phi(r_1, r_2, \dots, r_N, \theta_1 + \phi, \dots, \theta_N + \phi) \quad (108)$$

が成り立つことを考え、 $\phi = 2\pi/N$  の時、 $N$ 回対称な配置に対し、

$$\begin{aligned} \exp\left(i\frac{2\pi\hat{M}}{N}\right)\Phi(z_1, z_2, \dots, z_N) &= \Phi(z_N, z_1, \dots, z_{N-1}) \\ &= (-1)^{N-1}\Phi(z_1, z_2, \dots, z_N) \end{aligned} \quad (109)$$

が成り立つことに注目する。次式のように書き変えると、 $\Phi$ が  $\hat{M}$  の固有状態であるから、

$$\left(\exp\left(i\frac{2\pi M}{N}\right) + (-1)^N\right)\Phi(z_1, z_2, \dots, z_N) = 0 \quad (110)$$

が成り立つ。 $N$ 回対称な配置を電子が実現するためには、この配置での存在確率が非ゼロであることが必要である。(109)式より、 $N$ が偶数のとき、

$$M\frac{2\pi}{N} = (2l + 1) \times \pi \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (111)$$

すなわち、全軌道角運動量は

$$M = \frac{N}{2} \times (2l + 1) \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (112)$$

を、 $N$ が奇数のとき、

$$M \frac{2\pi}{N} = 2\pi \times l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (113)$$

すなわち、

$$M = N \times l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (114)$$

を満たす必要があることが分かる。従って、 $N$ 回対称な配置が達成されるのは、 $\Delta M = N$ の系列で起こるという計算結果が理解できる。同様に、 $N - 1$ 回対称な配置に対しても、 $\phi = 2\pi/(N - 1)$ として

$$\left(\exp\left(i\frac{2\pi M}{N-1}\right) + (-1)^{N-1}\right)\Phi(z_1, z_2, \dots, z_N) = 0 \quad (115)$$

が成り立つ。これより、 $N$ が偶数のとき、

$$\frac{2\pi M}{N-1} = 2\pi \times l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (116)$$

すなわち、全軌道角運動量は

$$M = (N - 1) \times l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (117)$$

を、 $N$ が奇数のときには、

$$\frac{2\pi M}{N-1} = (2l + 1) \times \pi \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (118)$$

すなわち、

$$M = \frac{N-1}{2} \times (2l + 1) \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (119)$$

を満たす必要があることが分かる。従って、 $\Delta M = N - 1$ なる系列に対し  $N - 1$ 回対称な配置が実現することが判明した。以上の議論を要約すると、実空間における系の回転対称性により系の全軌道角運動量に上のような強い制限がつく、ということになる。全軌道角運動量  $M$ はパウリの排他律より最小値が  $N(N - 1)/2$ であり、これより偶数粒子数を持つ系では、 $\Delta M = N$ または  $\Delta M = N - 1$ なる系列の全軌道角運動量は

$$M_N = \frac{N(N-1)}{2} + N \times k \quad (k = 0, 1, \dots) \quad (120)$$

または、

$$M_{N-1} = \frac{N(N-1)}{2} + (N-1) \times l \quad (l = 0, 1, \dots) \quad (121)$$

であり、6 電子系においてカスプの現れる魔法角運動量は、上述の対称性の議論によれば、式 (112),(117) より

$$\begin{aligned} M_5 &= 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, \dots \\ M_6 &= 15, 21, 27, 33, 39, 45, 51, \dots \end{aligned} \quad (122)$$

である。この議論に基づく結果と本研究の数値的厳密対角化による結果は6 電子以下の系で完全に一致する。

しかしながら、7 電子系においては $\Delta M = N$ の系列が消失しており、 $M_7$ に属する角運動量をもつ状態において7 回対称性をもつ配置は見出せなかった。変分モンテカルロ法による多粒子系においての電荷密度分布の計算によるとドット内部のバルクの領域において $1/m$  状態は一般的な分布をもつことが知られている。従って、多粒子系においては、電子がドット外端に局在する  $N$  回対称な配置はクーロン相互作用によるエネルギー増加を避けられず、ドット内部に電子が配置された状態が安定となることが変分モンテカルロ法に基づく計算結果により、判明している。その結果、 $N - 1$  回対称な配置が安定になり、7 電子系においては系列 $\Delta M = N - 1$  に属する魔法角運動量状態が安定な基底状態となることが考えられる。本研究の6 電子系以下の系の結果には少数系の性質が強く現れていると考えられる一方、7 電子系においては多粒子系につながるこの事情が見受けられた。

本節では、魔法角運動量の起源を明かにするために、魔法角運動量状態における2 体分布関数の厳密計算を行い、魔法角運動量状態の出現がクーロン相互作用と系の回転対称性に密接に関連していることを示した。

#### 4.6 ラフリンの準電子励起描像の検証

例として6 電子系を考える。1 体の角運動量の最大値 $m_{\max}$  について特に $M = 43, 44$  等の Laughlin の1 準電子励起描像で説明されてきた状態を考える。前で述べた様に、本研究の数値的厳密対角化計算によると $\nu = 1/3$  のとき $m_{\max} = 15$  である。 $M = 43, 44$  では、各軌道角運動量に対する占有数は次の通りである。

まず、 $M = 43$  に対し、

$$5.168001543 \times 10^{-2} \quad (m = 16)$$

$$1.911025105 \times 10^{-2} (m = 17)$$

$$5.336803347 \times 10^{-3} (m = 18)$$

$$5.596004986 \times 10^{-5} (m = 19)$$

である。次に、 $M = 44$  に対しては、

$$8.576042810 \times 10^{-2} (m = 15)$$

$$3.756516686 \times 10^{-2} (m = 16)$$

$$1.394194834 \times 10^{-2} (m = 17)$$

$$4.720030585 \times 10^{-3} (m = 18)$$

である。これらと図 25,26 を併せると、 $M = 43$  に対しては、 $m_{\max} = 18$ 、そして、 $M = 44$  に対しては  $m_{\max} = 17$  と定義できる。これらの値は  $\nu = 1/3$  状態における  $m_{\max}$  の値よりも増加している。式 (40) および (42) より準電子の生成演算子が微分演算子で表されることから、1 体の角運動量の最大値は一般に減少するはずであるが、上記の数値的厳密対角化の結果はこれと定性的に矛盾している。従って、少数電子系においては Laughlin の提案した 1 準電子励起の描像が正しくないことを端的に示している。即ち、少なくとも少数電子系 ( $N < 7$ ) においては 1 準電子励起のみならず、2 準電子励起 + 1 準空孔励起 + ... を考えねばならないことが判明した。しかしながらこれは有限系においてのみ起こる事情かもしれない。より多くの粒子からなる系においては、ハミルトニアン の厳密対角化による分布関数の厳密計算は困難であるため、その対角化による検証は難しい。

## 5 まとめと今後の課題

本研究においては、第 4 章以下、量子ドット系と呼ばれる少数電子系における分数量子ホール状態に対し、ハミルトニアン の数値的厳密対角化計算によりこの電子系の性質を明らかにし、併せてラフリンの準電子励起描像に対し検証を行った。その結果、量子ドット系と呼ばれる少数電子系においては、1 体軌道角運動量分布関数の厳密計算により、ラフリンの提起した準電子励起描像は適当でないことが分かった。また、この系において、電子数が 7 以下の系では、Maksym や Chakraborty らが電子数が 5 以下の系において指摘したように、特定の魔法全軌道角運動量を持つ状態が安定になることが判明し、さらにこれらの魔法角運動量に対して、新たな系列を見出した。これら魔法角運動量を持つ状態においては、エネルギー対全軌道角運動量のグラフに下向きのエネルギーカuspが存在し、これらの安定な状態においてはドット内の

電子の空間的配置が  $N (\leq 7)$  電子系において  $N$  回対称性または  $N - 1$  回対称性を持つことが分かった。魔法角運動量を持つ状態に対し、2 体分布関数の計算を行った結果により、 $1/m$  ラフリン状態は 6 電子以下の少数系でこれらの対称性を併せ持つことが分かった。この結果から、 $1/m$  状態は共鳴エネルギーにより、極めて安定な基底状態となることが推論される。比較的粒子数の大きい 7 電子系においては、本研究で発見した新たな系列が安定な基底状態となり、Maksym らが発見した魔法角運動量の系列は消失していることが判明した。この新たな系列に属する状態の電子の配置は、電子がドット外端に局在した  $N$  回対称な配置ではなく、ドット中心部にも電子が分布した  $N - 1$  回対称な配置である。このような配置をもつ状態が安定な基底状態となる事情は、多粒子系において  $1/m$  ラフリン状態がバルク領域で一様な分布をしていることと対応するものと思われる。

今後の課題として、より多くの粒子からなる系の研究、さらには熱力学極限における理論的研究が望まれる。このためにはハミルトニアン行列の対角化計算では限界があるので、変分モンテカルロ法による計算が適していると考えられる。本研究で提起した  $1/m$  状態の安定性に対する、共鳴エネルギーによる解釈は少数系に特有の解釈と考えられるため、より多くの粒子からなる系に対して成立する解釈を探求することが今後の課題として重要であろうと思われる。

## 6 謝辞

本研究は東北大学物性理論研究室の倉本義夫教授の指導のもとに行われた。倉本教授の的確かつ熱意ある指導にまず感謝致します。数値計算に多大な助言を頂いた同研究室の西野友年助手、有益な議論をしてくださった横山寿敏助手および加藤雄介助手にもあわせて感謝の意を表明致します。計算機のノウハウとデータ処理法を指導して頂いた高山立博士にも厚くお礼申し上げます。そして最後に本研究を温かく見守って頂いた物性理論研究室の皆様への感謝の気持ちを表明して謝辞とさせていただきます。

## 参考文献

- [1] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982).
- [2] R. Willet, J. P. Eisenstein, H. L. Stormer, D. C. Tsui, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1776 (1987).
- [3] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1395 (1983).
- [4] B. I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1583 (1984).
- [5] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 605 (1983).
- [6] J. K. Jain, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 199 (1989).
- [7] J. K. Jain, *Phys. Rev.* **B41**, 7653 (1990).
- [8] J. K. Jain, *Adv. Phys.* **41**, 105 (1992).
- [9] R. Morf, B. I. Halperin, *Phys. Rev.* **B33**, 2221 (1986).
- [10] G. Fano. *et al.*, *Phys. Rev.* **B34**, 2670 (1986).
- [11] D. Yoshioka, *Physica B***184**, 86 (1993).
- [12] M. Kasner, W. Apel, cond-mat/9405076.
- [13] T. Chakraborty, *Comments. Cond. Mat. Phys.* **16**, 35 (1992).
- [14] W. Hansen, T. P. Smith *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2168 (1989).
- [15] R. C. Ashoori, H. L. Stormer *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 613 (1993).
- [16] S. R. E. Yang, A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 4110 (1993).
- [17] P. A. Maksym, T. Chakraborty, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 108 (1990).
- [18] P. A. Maksym, *Physica B***184**, 385 (1993).
- [19] T. Demel, D. Heitmann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 788 (1990).
- [20] B. Muerer, D. Heitmann *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1371 (1992).



- [21] J. K. Jain, T. Kawamura, cond-mat/9409035.
- [22] F. D. M. Haldane, "The Fractional Quantum Hall Effect"  
(Springer-Verlag), Eds. R. E. Prange, S. M. Girvin, chap. 8.
- [23] A. H. MacDonald, cond-mat/9410047.
- [24] R. B. Laughlin, "The Fractional Quantum Hall Effect"  
(Springer-Verlag), Eds. R. E. Prange, S. M. Girvin, chap. 7.
- [25] J. K. Jain, V. J. Goldman, Phys. Rev. **B45**, 1255 (1992).
- [26] J. K. Jain, Phys. Rev. **B40**, 8079 (1989).
- [27] S. M. Girvin, Phys. Rev. **B29**, 6012 (1984).
- [28] S. A. Trugman, S. Kivelson, Phys. Rev. **B31**, 5280 (1985).
- [29] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **55**, 2095 (1985).
- [30] "マトリックスの数値計算"(オーム社) 戸川 隼人著
- [31] S. Mitra, A. H. MacDonald, Phys. Rev. **B48**, 2005 (1993).
- [32] G. V. Dunne, cond-mat/9306022.
- [33] A. H. MacDonald, S. M. Girvin, Phys. Rev. **B33**, 4414 (1986).
- [34] R. Wenying, L. Youyan, Preprint.
- [35] 岩波数学公式集 (岩波全書) 森口 繁一 他著

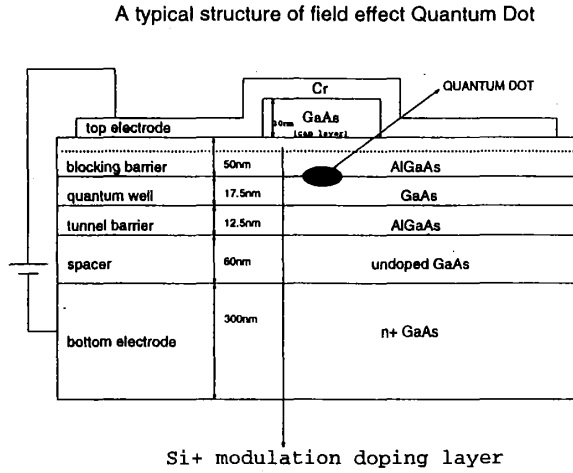
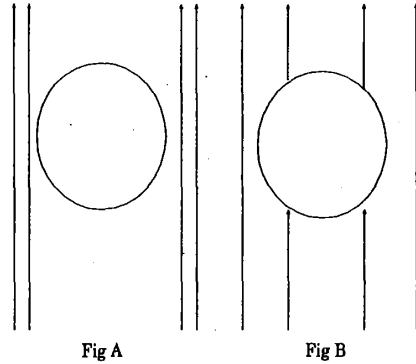


図1: 典型的な電界効果量子ドット系の構造。図の+は modulation doping された Si デルタ層を表す。

A schematic explanation of Composite Fermion



An arrow expresses a unit magnetic flux.

図2: クーロン相互作用により電子に flux が付与され、Composite-Fermion が生成される様子を示した概念的な図である。矢印は magnetic flux を示している。

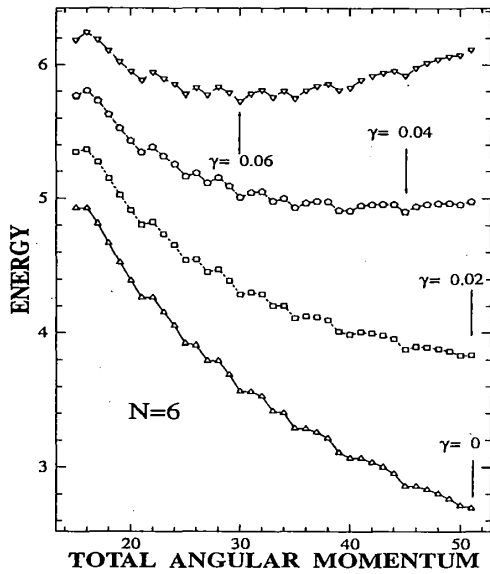


図3: 6電子系の全軌道角運動量対最低エネルギー固有値。閉じ込めポテンシャルの強さ $\gamma$ は下から順に $\gamma=0, 20/1000, 40/1000, 60/1000$ であり、特定の $M$ に対し下向きのカスプが見られる。 $M=15$ は $\nu=1$ であり、 $M=45$ は $\nu=1/3$ に対応する。矢印は各々の閉じ込めの強さのときの基底状態を示している。

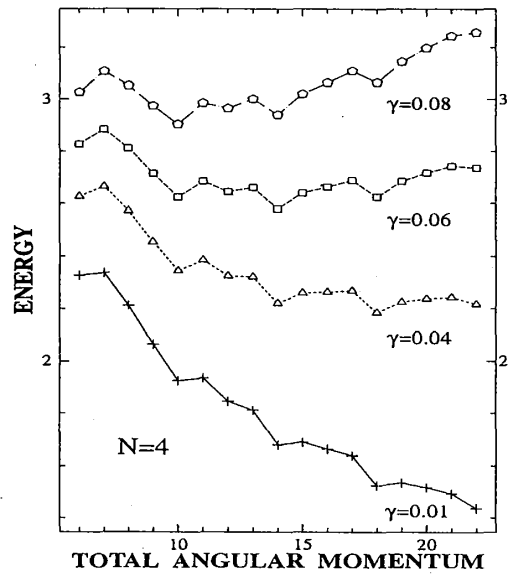


図4: 4電子系の全軌道角運動量対最低エネルギー固有値。閉じ込めの強さは下から順に $\gamma=10/1000, 40/1000, 60/1000, 80/1000$ であり、特定の $M$ に対し下向きのカスプが見られる。 $M=6$ は $\nu=1$ であり、 $M=18$ は $\nu=1/3$ に対応する。

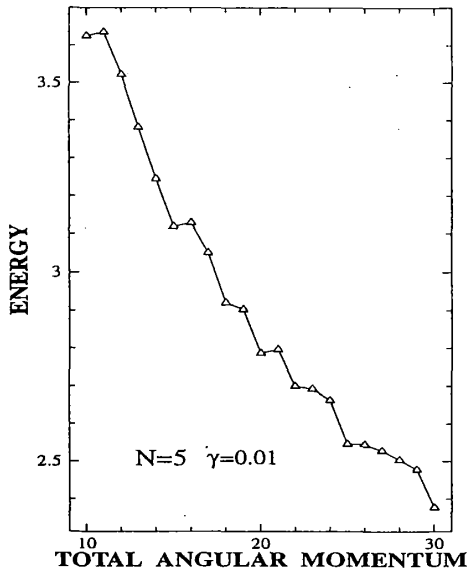


図 5: 5 電子系全軌道角運動量対最低エネルギー固有値。閉じ込めの強さは  $\gamma = 10/1000$  であり、特定の  $M$  に対し下向きのカスパが見られる。 $M = 10$  は  $\nu = 1$  であり、 $M = 30$  は  $\nu = 1/3$  に対応する。

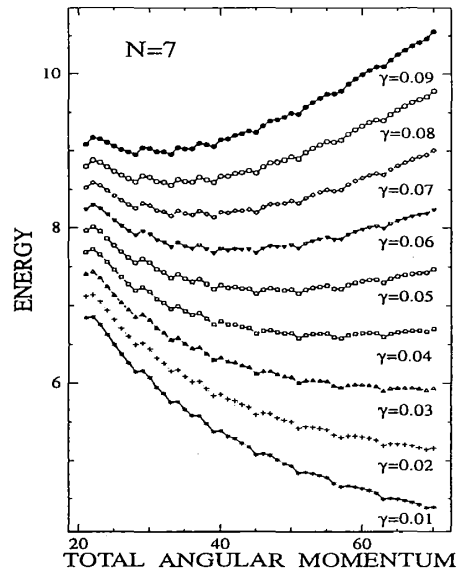


図 6: 7 電子系に対する全軌道角運動量対最低エネルギー固有値。特定の魔法角運動量に対し、下向きのエネルギーカスパが見られる。 $\Delta M = N$  の系列が消失し、一方  $\Delta M = N - 1$  の系列が強く現れていることが分かる。 $M = 21$  は  $\nu = 1$  に対応し、 $M = 63$  は  $\nu = 1/3$  に対応する。閉じ込めの強さは下から順に、 $\gamma = 10/1000$  から  $\gamma = 90/1000$  である。

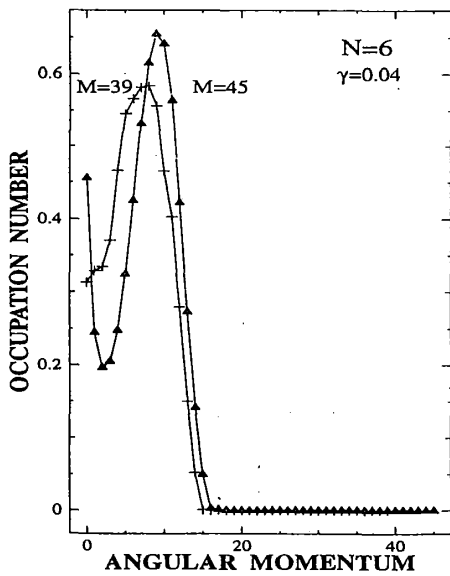


図 7: 6 電子系の 1 体の角運動量分布関数のうち  $M = 39, 45$  に対する結果。2 つのピークを持つ分布が  $M = 45$  ( $\nu = 1/3$ ) に対する分布であり、単一のピークをもつ分布が  $M = 39$  に対する分布である。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。

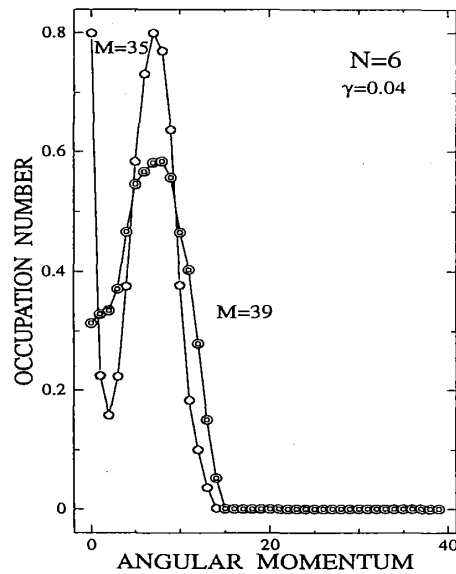


図 8: 6 電子系の 1 体の角運動量分布関数のうち  $M = 35, 39$  に対する結果。2 つのピークを持つ分布が  $M = 35$  に対する分布であり、単一のピークをもつ分布が  $M = 39$  に対する分布である。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。

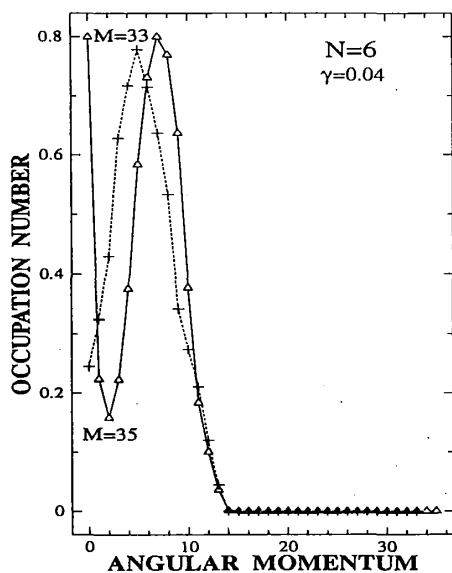


図 9: 再び 6 電子系の 1 体の角運動量分布関数のうち  $M = 33, 35$  に対する結果。2 つのピークを持つ分布が  $M = 35$  に対する分布であり、単一のピークをもつ分布が  $M = 33$  ( $\nu = 2/5$  状態) に対する分布である。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。

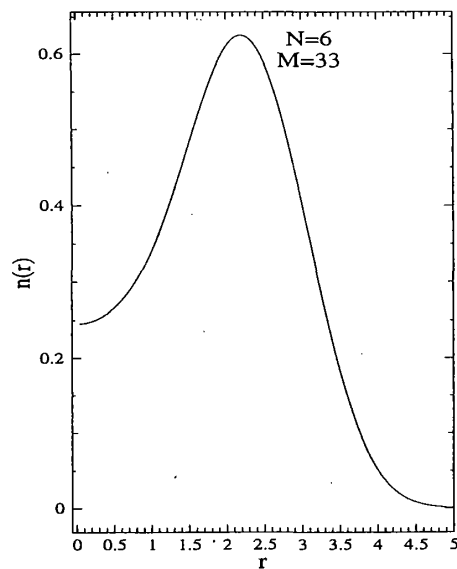


図 10: 6 電子系の  $M = 33 (\nu = 2/5) \in M_5$  に対する電荷密度分布。ドット外端部に単一のピークをもつ分布が見られる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。ここでは距離  $r$  が  $\ell$  によってスケールされている。

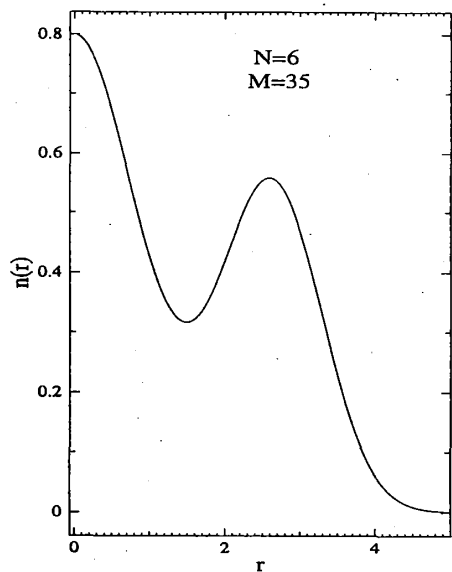


図 11: 6 電子系の  $M = 35 \in M_5$  に対する電荷密度分布。2 つのピークを持つ分布が見られる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。ここでは距離  $r$  が  $\ell$  によってスケールされている。

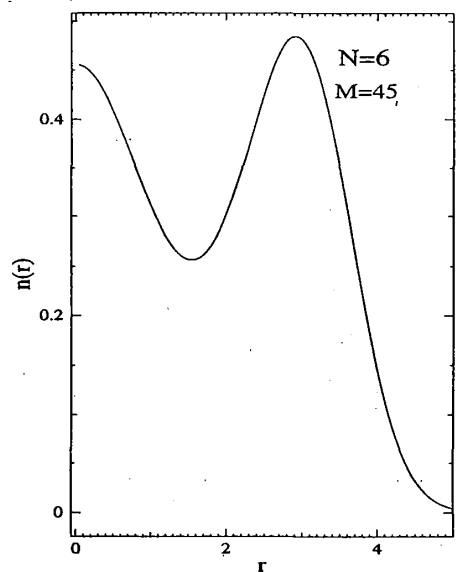
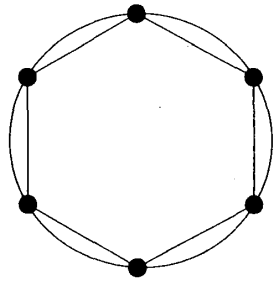
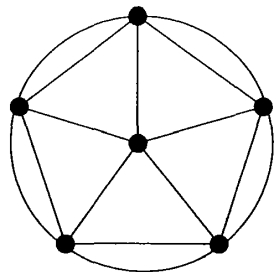


図 12: 6 電子系の  $M = 45 \in M_5, M_6$  に対する電荷密度分布。2 つのピークを持つ分布が見られる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。ここでは距離  $r$  が  $\ell$  によってスケールされている。



6-fold rotational configuration



5-fold rotational configuration

図 13:  $N$ 回対称な配置と  $N-1$ 回対称な配置の例。6電子系の場合を示している。

$N=6$   $M=33$

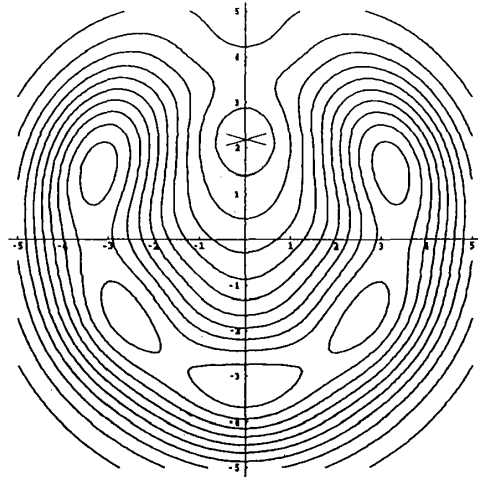


図 14: 6電子系の  $\nu = 2/5$  状態である  $M = 33 \in M_6$  に対する 2体分布関数。6回対称性を持つことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.19896)$  に固定して、 $n(z, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $8.2655399 \times 10^{-3}$  を 1 0 等分している。等高線の間隔は  $8.2655399 \times 10^{-4}$  である。

$N=6$   $M=33$

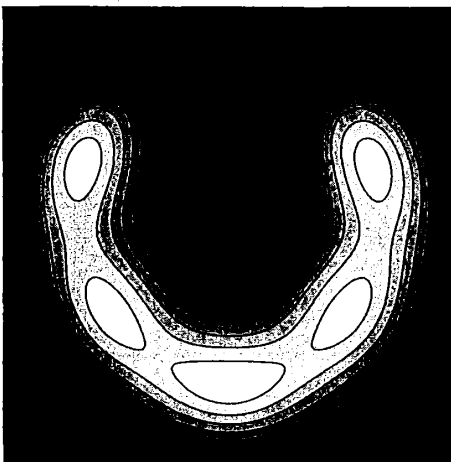


図 15: 6電子系の  $\nu = 2/5$  状態である  $M = 33 \in M_6$  に対する 2体分布関数の濃淡図。6回対称性を持つことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.19896)$  に固定して、 $n(z, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $8.2655399 \times 10^{-3}$  を 1 0 等分している。等高線の間隔は  $8.2655399 \times 10^{-4}$  である。

$N=6$   $M=35$

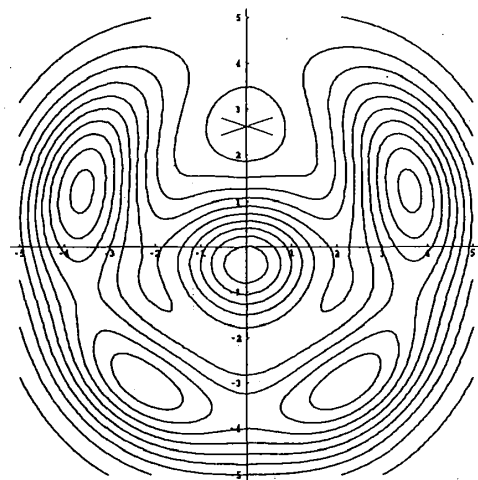


図 16: 6電子系の  $M = 35 \in M_6$  に対する 2体分布関数。5回対称性を持つことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.59225)$  に固定して、 $n(z, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $6.4719524 \times 10^{-3}$  を 1 0 等分している。等高線の間隔は  $6.4719524 \times 10^{-4}$  である。

N=6 M=35

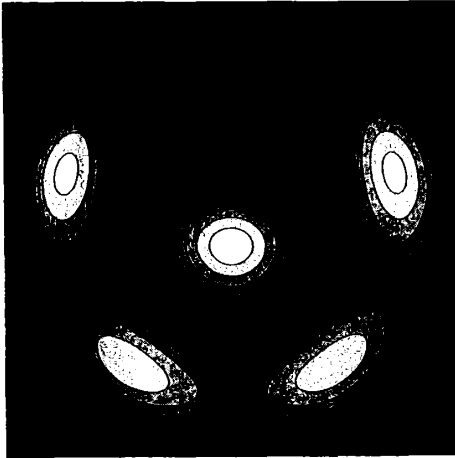


図 17: 6 電子系の  $M = 35 \in M_5$  に対する 2 体分布関数の濃淡図。5 回対称性を持つことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.59225)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $6.4719524 \times 10^{-3}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $6.4719524 \times 10^{-4}$  である。

N=6 M=45

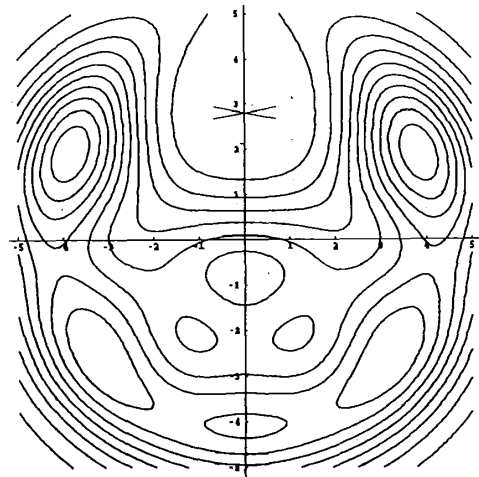


図 18: 6 電子系の  $\nu = 1/3$  である状態  $M = 45 \in M_5, M_6$  に対する 2 体分布関数。5 回対称性及び 6 回対称性を持つことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.91511)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $5.0449989 \times 10^{-3}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $5.0449989 \times 10^{-4}$  である。

N=6 M=45

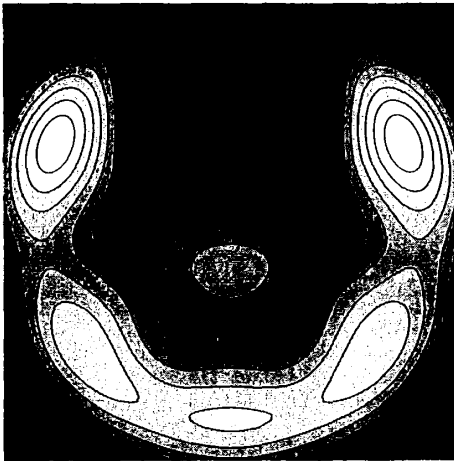


図 19: 6 電子系の  $\nu = 1/3$  状態である  $M = 45 \in M_5, M_6$  に対する 2 体分布関数の濃淡図。5 回対称性を持つことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。5 回対称性と 6 回対称性を併せ持つことが分かる。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.91511)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $5.0449989 \times 10^{-3}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $5.0449989 \times 10^{-4}$  である。

N=6 M=34

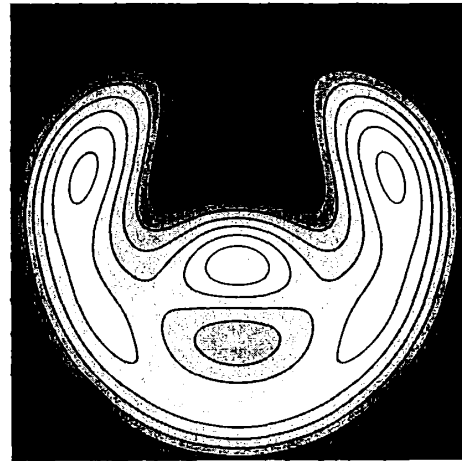


図 20: 6 電子系の非カスプ状態である  $M = 34$  に対する 2 体分布関数の濃淡図。5 回対称性も 6 回対称性も持たないことが分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.45267)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $6.4250065 \times 10^{-3}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $6.4250065 \times 10^{-4}$  である。

N=7 M=35

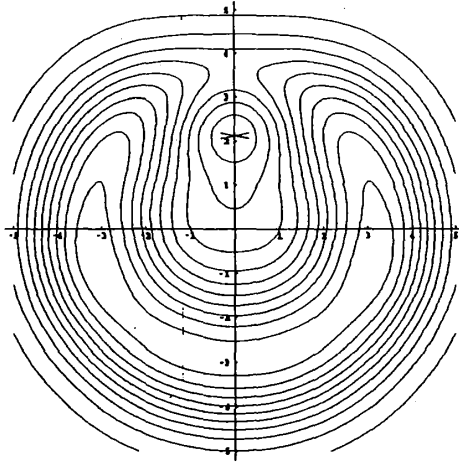


図 21: 7 電子系に対する  $M = 35 \in M_7$  に対する 2 体分布関数。カusp状態ではないため、6 回対称性も 7 回対称性も見られない。閉じ込めの強さは  $\gamma = 70/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.11944)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $8.8817400 \times 10^{-3}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $8.8817400 \times 10^{-4}$  である。

N=7 M=35

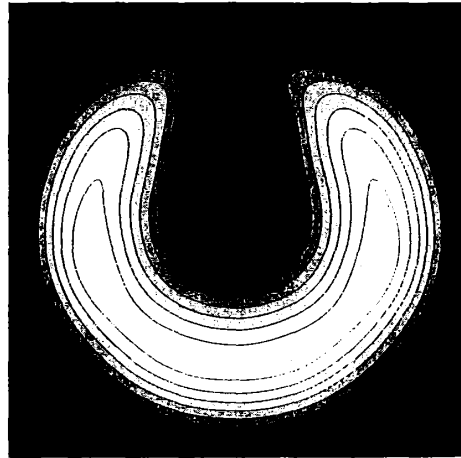


図 22: 7 電子系に対する  $M = 35 \in M_7$  に対する 2 体分布関数の濃淡図。カusp状態ではないため、6 回対称性も 7 回対称性も見られない。閉じ込めの強さは  $\gamma = 70/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.11944)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $8.8817400 \times 10^{-3}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $8.8817400 \times 10^{-4}$  である。

N=7 M=39

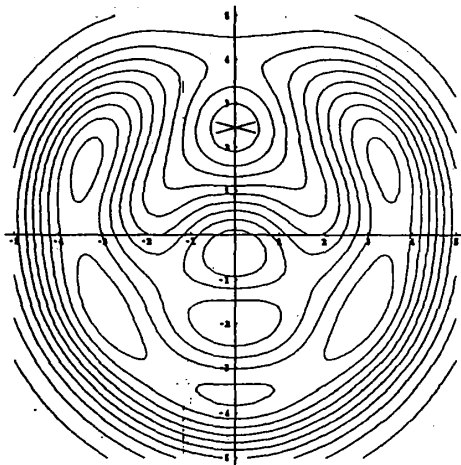


図 23: 7 電子系に対する  $M = 39 \in M_6$  に対する 2 体分布関数。6 回対称性が見られる。閉じ込めの強さは  $\gamma = 70/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.44205)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $1.3426157 \times 10^{-2}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $1.3426157 \times 10^{-3}$  である。

N=7 M=39

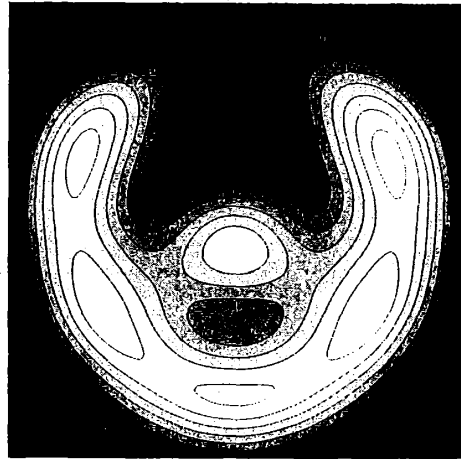


図 24: 7 電子系に対する  $M = 39 \in M_6$  に対する 2 体分布関数の濃淡図。6 回対称性が見られる。閉じ込めの強さは  $\gamma = 70/1000$  に固定している。 $z'$  を  $x$  印で表す位置、即ち  $z' = (0, 2.44205)$  に固定して、 $n(x, z')$  の等高線を示す。等高線は、最大値  $1.3426157 \times 10^{-2}$  を 10 等分している。等高線の間隔は  $1.3426157 \times 10^{-3}$  である。

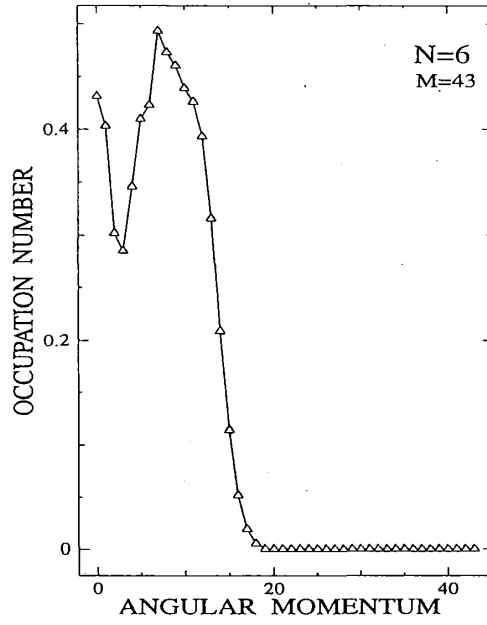


図 25: 6 電子系の  $M = 43$  に対する 1 体の角運動量分布関数。占有されている 1 体の最大軌道角運動量は  $M = 45$  ( $\nu = 1/3$ ) の時のそれよりも増加しており、このサイズではラフリンの準電子励起画像は良い素励起の画像とはなっていない事が分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。

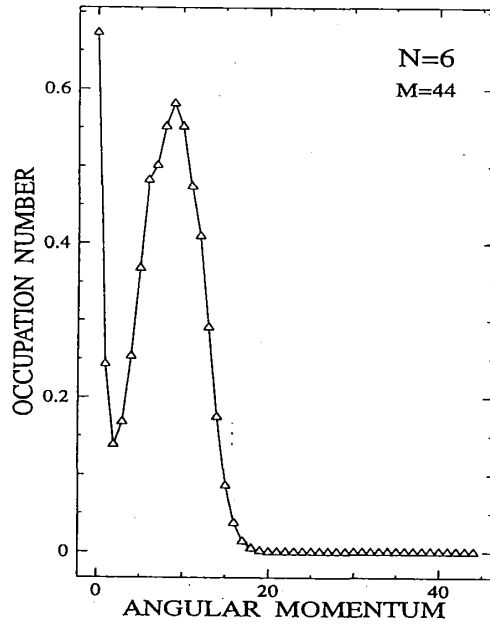


図 26: 6 電子系の  $M = 44$  に対する 1 体の角運動量分布関数。占有されている 1 体の最大軌道角運動量は  $M = 45$  ( $\nu = 1/3$ ) の時のそれよりも増加しており、このサイズではラフリンの準電子励起画像は良い素励起の画像とはなっていない事が分かる。閉じ込めの強さは  $\nu = 1/3$  が基底状態となるように  $\gamma = 40/1000$  に固定している。