

# 電子間有効相互作用と、その量子ドットへの応用

諏訪剛史、高柳和雄  
上智大理工 物理学科

Enrico Lipparini, Francesco Pederiva  
Department of Physics, University of Trento

## Abstract

本研究では、2次元電子系における近距離相関に着目し、まず、媒質中での電子の多重散乱を記述する Bethe-Goldstone 方程式を解き、その結果を非常に扱いやすい電子間有効相互作用の形に表す一般論を展開し、具体的に得られた電子間有効相互作用から理解できる近距離相関の性質を議論する。次に、得られた電子間有効相互作用で、相関エネルギーと量子ドットの Brueckner-Hartree-Fock 理論に基づいた計算を行ない、現在までに得られた結果を簡単に示す。

## 1. Introduction

量子多体系の基本的なモデルである 2 次元電子系は、その基底状態の性質についてさまざまな多体系の理論により研究されてきた。その中でも特に、近距離相関の重要性は各々の研究の中で強調されている。近距離相関を表現する理論の中でも特に、梯子近似によるものを簡単に紹介しておくと、3 次元電子系では、Brown[1][2]、Yasuhara[3] が各々、梯子のプロセスにより表される近距離相関を局所有効ポテンシャルに表し、相関エネルギーや対分布関数の計算を行なっている。2 次元電子系では、Nagano、Singwi、Ohnishi[4] により、梯子のプロセスの解を直接たたみこむ事により、相関エネルギーを求めることがなされている。そこで、本研究では、梯子のプロセスにより表される近距離相関を、より一般的な非局所有効相互作用に表し、さらに、非常に扱い易い Skyrme 型有効相互作用に表し、相関エネルギーの計算や量子ドットの Brueckner-Hartree-Fock 理論に基づいた計算を行なった。

## 2. 電子間有効相互作用

媒質中での 2 電子を考えると、相対距離が小さな所では、近距離相関のために相対の波動関数が平面波からずれている。この効果を有効ポテンシャルの概念として記述したのが、媒質中での 2 体の多重散乱を表す Bethe-Goldstone 方程式である。多重散乱の 2 次以上の項を  $g$  と書くと、 $g$  は次の式で記述される。

$$g = V \frac{Q}{\omega - H_0} V + V \frac{Q}{\omega - H_0} g$$

ここで、 $g$  は生のクーロン相互作用を補正する引力ポテンシャルを表していて、以後この演算子を  $g$ -matrix と呼ぶ。 $\omega$  は散乱前のエネルギーで、 $V$  はクーロン相互作用を表してい

る。 $Q$ はPauli演算子で、散乱の中間状態としてフェルミ球の内側の状態を排除する演算子として定義されており、媒質のPauli効果を表している。

具体的には、この式を重心と相対の座標で書いた上で、部分波展開を行なう事により  $g$ -matrix の行列要素を計算することができる。しかし、そうして求まる膨大な量の  $g$ -matrix の行列要素は、そのままでは2体の相互作用として非常に扱いにくいので、separable 近似により、行列要素を非局所有効相互作用に表し簡略化することを行なった。separable 近似とは、 $g$ -matrix の行列要素が nonlocal part  $c(p)$  と local part  $v(q)$  の積で表されると仮定したもので、次の様に表される。

$$\langle \mathbf{k}_1 | g | \mathbf{k}_2 \rangle \stackrel{\text{仮定}}{=} c(p)v(q), \quad \left( p = \frac{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}{2}, \quad q = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 \right)$$

ここで、 $\mathbf{k}_1$  と  $\mathbf{k}_2$  はそれぞれ、終状態の相対の運動量と始状態の相対の運動量を表している。これを Fourier 変換して実空間で表すと、次のようになる。

$$\langle \mathbf{r}_1 | g | \mathbf{r}_2 \rangle = c(s)v(r), \quad \left( s = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad r = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right)$$

ここで、 $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  はそれぞれ、終状態の相対座標と始状態の相対座標を表している。また、 $c(s)$  は  $g$ -matrix の nonlocality を表し、 $v(r)$  は普段よく扱われる local ポテンシャルを表している。特に、 $c(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \propto \delta(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  の場合に、普通の局所有効相互作用の表式に帰着する。

nonlocal part  $c(p)$  と local part  $v(q)$  はそれぞれ、前方散乱、後方散乱の kinematics から求めることができ、数値計算の結果を図1に示す（ただし、意味があるのは Fermi 球内の2粒子に対してで、 $p, q$  の大きい所は見易くなるように書いてだけである）。図1で、始状態の相対の運動量が0から増加するに従い、より小さな運動量移行で中間状態に遷移できるためにクーロン相互作用の行列要素が大きくなり、エネルギー分母も小さくなるという事が、 $c(p)$  と  $v(q)$  のピークを持つ立ち上がり方に表れている。特に、 $c(p)$  のグラフから分かるように、 $g$ -matrix は非常に強い nonlocality を持っており、 $g$ -matrix ではこれを取り込むことが非常に重要である。

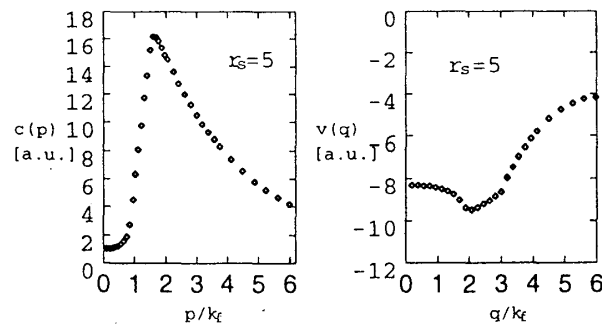


図 1:  $r_s=5$  での、nonlocal part  $c(p)$  と local part  $v(q)$  のグラフ。

次に、この separable ポテンシャル  $c(p)v(q)$  は、まだ少し扱いにくいので、Density Matrix

Expansion[5][6][7]の方法でさらに簡略化し、扱い易い Skyrme 型有効相互作用に表すと次のようになる。

$$g(\mathbf{r}, \nabla) = u\delta(\mathbf{r}) + v\{\nabla^2\delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r})\nabla^2\} + 2w\nabla\delta(\mathbf{r}) \cdot \nabla$$

$$\begin{cases} u &= v_0 \\ v &= \frac{1}{16}v_0c_2 + \frac{1}{4}v_2 \\ w &= -\frac{1}{16}v_0c_2 + \frac{1}{4}v_2 \end{cases}$$

ここで、 $v_0$  と  $v_2$  はそれぞれ、 $v(r)$  の 0 次の moment と 2 次の moment で、 $c_2$  は  $c(s)$  の 2 次の moment である。この Skyrme 型有効相互作用は、2 次元電子系での 2 体の多重散乱（近距離相関）の効果を電子間有効相互作用で表したものである。Skyrme 型有効相互作用の各係数  $u$ 、 $v$ 、 $w$  の数値計算の結果を図 2 に示す。図 2 にあるように、 $r_s$  が 10 くらいまでなら  $u$ 、 $v$ 、 $w$  はそれぞれ、 $r_s^{1.5}$ 、 $r_s^{3.5}$ 、 $r_s^{3.8}$  という簡単な  $r_s$  依存性で良く表されている。また、応用する時のために、 $\chi$ -square の方法できちんと fit した。 $v$  と  $w$  のグラフでは、nonlocality を無視して計算した  $v(c_2=0)$  と  $w(c_2=0)$  の結果を見れば明らかなように、nonlocality を取り込むか取り込まないかで全く違う結果になってしまい、nonlocality の重要性がここでも確認できる。この図で特に重要なのは、 $v$  と  $w$  の  $r_s$  依存性が  $u$  の  $r_s$  依存性に比べて非常に大きいことである。 $v$  と  $w$  は、微分演算子を含む項、つまり、相対の波動関数の大きい波数成分に対して強く効く項の係数なので、 $u$  に比べてより近距離の効果を見ていると言える。つまり、 $v$  と  $w$  の  $r_s$  依存性が  $u$  の  $r_s$  依存性に比べて非常に大きいということは、 $r_s$  が大きくなり低密度になると近距離相関が重要になってくるといふことの帰結である。

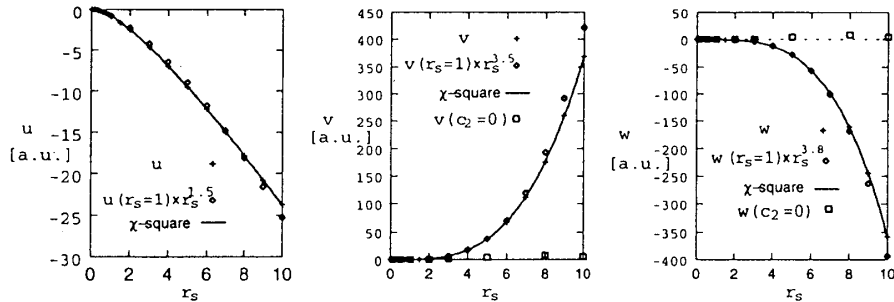


図 2: 電子間有効相互作用の係数  $u, v, w$ 。

ここで、求まった電子間有効相互作用から分かる近距離相関の性質 ( $r_s$  依存性) と相関エネルギーについて簡単にまとめておく。まず、近距離相関の性質としては、 $r_s$  が増大する（低密度になる）につれ、電子間有効相互作用の表す引力が増大するということと、 $r_s$  が増大するにつれ、s 波の寄与に比べ p 波の寄与が増大し、電子間有効相互作用の表す非局所性が増大するということが挙げられる。次に、相関エネルギーについては、求まった Skyrme 型有効相互作用で簡単に求まり、 $g$ -matrix による値は、Quantum Monte Carlo の結果に非常に近い値をとる。特に、 $r_s$  が大きい（低密度の）所でより近い値をとるが、こ

れは、 $r_s$  が大きい所では、近距離相関が非常に重要になっているということの表れである。この相関エネルギーの計算から、非常に簡単な形で求めた Skyrme 型有効相互作用が、基底状態の性質を見るうえで非常に有用であることを確認できた。

### 3. BHF による量子ドットの計算

最後に、求めた Skyrme 型有効相互作用を使い、量子ドットの Brueckner-Hartree-Fock 理論に基づいた計算を行なった。量子ドットは調和振動子型のポテンシャルに閉じ込められているとし、上で求めた Skyrme 型有効相互作用  $g(\mathbf{r}_{ij}, \nabla_{ij})$  をクーロン相互作用の補正として取り込んだ次の様なハミルトニアンから出発する。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (-\nabla_i^2 + \omega_0^2 r_i^2) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \left( \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + g(\mathbf{r}_{ij}, \nabla_{ij}) \right)$$

このハミルトニアンから、BHF の理論に従い、量子ドットを構成する 1 粒子波動関数を定義する BHF 方程式が得られ、それをもとに電子数  $N=6$  の closed-shell の量子ドットに対する 1 粒子エネルギーの数値計算を行なった (図 3)。横軸は角運動量で、縦軸は 1 粒子状態を  $\varphi_{nl}(r)e^{-il\theta}$  としたときの 1 粒子エネルギーである。図から、HF の計算結果に比べて、LDA の計算結果は Fermi 面での gap が小さくなっていて、BHF の計算結果は 1 粒子エネルギースペクトルが flat になっていることが分かる。つまり、LDA、BHF は共に近距離相関により系を柔らかくしているが、それを実現するメカニズムが異なっているということである。このことをはっきり見るために、今後の研究で励起状態を調べていきたい。

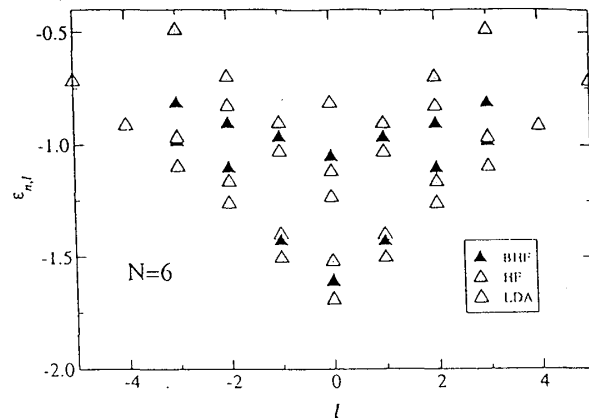


図 3: 電子数  $N=6$  の closed-shell の量子ドットに対する 1 粒子エネルギー。

## 4. まとめ

本研究では、2次元電子系において、媒質中での電子の多重散乱を記述する Bethe-Goldstone 方程式を解き、近距離相関の効果を電子間有効相互作用の形に表す一般論を展開した。まず、演算子  $g$  の行列要素を separable ポテンシャル  $c(p)v(q)$  に表したが、そこでは、 $g$ -matrix の非局所性が非常に強いことや、 $r_s$  の増加に伴い電子間有効相互作用の表す引力も非局所性も増大することが分かった。さらに、Density Matrix Expansion の方法により、近距離相関の効果を、より扱いやすい Skyrme 型相互作用に表した。そこでは、係数  $v$  と  $w$  の  $r_s$  依存性が係数  $u$  の  $r_s$  依存性に比べて非常に大きいということから、 $r_s$  が大きくなると近距離相関が重要になってくるということが確認できた。次に、得られた電子間有効相互作用で、相関エネルギーと量子ドットの Brueckner-Hartree-Fock 理論に基づいた計算を行なった。相関エネルギーの計算では、QMC に良い一致を示していて、電子間有効相互作用の有用性が確かめられた。また、量子ドットの 1 粒子エネルギースペクトルの計算では、BHF、HF、LDA で大きな違いが見られるので、今後、励起状態を詳しく見ていきたい。

## References

- [1] D.N.Lowy and G.E.Brown, Phys.Rev.B 12 ,2138(1974)
- [2] Kevin Bedell and G.E.Brown, Phys.Rev.B 17 ,4512(1977)
- [3] Y.Ousaka, H.Suehiro and H.Yasuhara, Solid State Phys. 18 ,4471(1985)
- [4] S.Nagano, K.S.Singwi and S.Ohnishi, Phys.Rev.B 29 ,1209(1983)
- [5] D.Vautherin and D.M.Brink, Phys.Rev.C, 626(1972)
- [6] T.Cheon and K.Takayanagi, Phys.Rev.Lett. 68, 1291(1992)
- [7] K.Takayanagi and E.Lipparini, Phys.Rev.B49, 16733(1994)