

p-29

量子井戸中での荷電励起子分子の束縛エネルギー

新潟大学自然科学研究科 薄倉 淳子

ATOMKI

K. Varga

新潟大学理学部

鈴木 宜之

最近、荷電励起子 (eeh , ehh) や励起子分子 ($eehh$) が GaAs での量子井戸で見つかり、これを再現させるための計算もなされている。この様な電子と正孔の束縛は、それぞれの有効質量の比 $\sigma = m_e^*/m_h^*$ や量子井戸の幅に依存し、これらに関する多くの研究がされてきている。そして、これ以上の電子-正孔による多体系が束縛するのかというのも興味深い話題である。

5 体系である荷電励起子分子として、 $eehhh$ と $eeehh$ が考えられるが、負の荷電励起子分子 ($eeehh$) は S 状態では束縛しない。また、正の荷電励起子分子 ($eehhh$) は 3 次元系について言うと、 $\sigma \sim 0$ では H_3^+ のことであり、これは安定に存在するという事は知られている一方、 $\sigma = 1$ では理論計算により束縛しないとされている。このことから σ を 0 から大きくしていくと、束縛エネルギーは減少していき、ある σ の値で束縛は消えるということが推測できる。これは、2 次元系においても同じ傾向である。

今回、我々は正の荷電励起子分子の束縛エネルギーを計算した。これには、相関ガウス基底を用いた確率論的変分法 (SVM) [1] を用いた。これは、試行錯誤的にランダムに、エネルギーをより低くするような変分パラメータを選んでいく方法であり、これによって、効率良く波動関数を最適化でき、高い精度の結果が得られる。

量子井戸内ではある一方向についての運動が制限されるため、近似的に 2 次元系として扱った。図 1 は $\sigma = m_e^*/m_h^*$ に対する 2D での荷電励起子分子の束縛エネルギーの依存性を示したものである。 $\sigma = 0.26$ を超えたところで束縛エネルギーは 0 となり、そこで束縛を失っていることが分かる。 $\sigma \sim 0$ では、荷電励起子分子の三つの正孔は正三角形を形成していて、二つの電子はその周りに分布している。一方、束縛が緩くなると、五つの構成粒子のうち、二つの電子と二つの正孔が近付き、一つの正孔だけが離れて分布する。つまり、励起子分子と正孔に分かれる。図 2 は二粒子間の相関を表すグラフである。 $m_e(1+\sigma)a_0/\epsilon m_e^*$ を長さの単位としている。粒子 i と j に対する相関は $C(r) = \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) | \Psi \rangle r$ と定義した。 $h-h$ に関する曲線は $r \sim 0.7$ にピーク、 $r > 2$ で遠方まで続く尾を持つが、これは荷電励起子分子から一つの正孔が離れていく様子を表している。

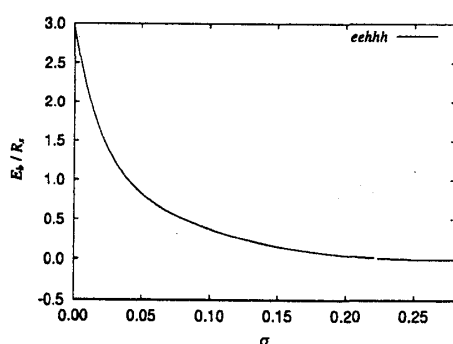


図 1: $\sigma = m_e^*/m_h^*$ に対する 2D の $eehhh$ 系の束縛エネルギーの依存性。

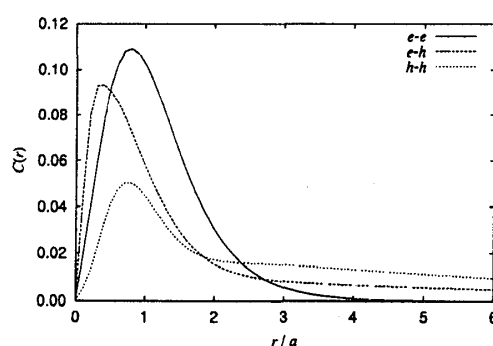


図 2: 2D での二粒子間の相関 $C(r) = \langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) | \Psi \rangle r$ 。 $\sigma = 0.25$ 。

参考文献

- [1] Y. Suzuki, J. Usukura, and K. Varga, J. Phys. B 31, 31 (1998)