

## 量子ドット内の少数電子系の準位統計と波動関数

関西学院大・理工

澤田信一

大阪市大・工

寺井章

中村勝弘

## § 1 はじめに

カオスの原因には境界条件（スタジアムなど）の他に、粒子間非線形相互作用がある。前者（1 粒子系）の量子化による準位統計やスカー（周期軌道の傷跡）の研究は盛んであるが、後者（多粒子系）に対応する量子論的研究は比較的少ない。ここでは、1 電子のみの場合はカオスを生じない円形ビリヤードに、クーロン相互作用をする2 電子の電子を閉じ込め、量子論における高励起状態の準位統計の数値的考察をおこなう。2 電子の場合、古典論においては電子間相互作用がカオスを引き起こすことが期待される。これに対応して、量子論では、最近接エネルギー準位間隔の分布が Poisson 分布からはずれることが期待されるが、今回の計算結果によりこの予想が裏付けられた。

横型量子ドット（バリスティック系）の場合、ドットの linear size は、 $R=0.1 \sim 1$  ミクロンであり、他方、GaAs/AlAs 界面では電子の有効質量は小さく、有効ボーア半径は、 $a_B^*=10$  ナノメートルのオーダーである。したがって、（クーロンエネルギー／1 電子準位間隔） $=R/a_B^*=10 \sim 100$  となり、磁場をかけない場合でもクーロン力の効果は非常に重要である。

今回の数値計算によると、最近接エネルギー間隔の分布は、全角運動量  $L=1, 2, 3$  で、 $R/a^*$ が大きくなるにつれ、準位統計はウイグナー分布に近いふるまいを示す

## § 2 ハミルトニアンと基底関数

円形ビリヤード内の多電子のハミルトニアンは以下のとおりである。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_i \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (1)$$

ただし、 $m^*$ は電子の有効質量である。ここで、ビリヤードの半径  $a$  を長さの単位に、エネルギーの単位を  $\hbar^2/2m^*a^2$  にとるとハミルトニアンは次のように規格化される。

$$H = -\sum_i \left( \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \bar{y}_i^2} \right) + \lambda \sum_{i < j} \frac{1}{|\bar{\mathbf{r}}_i - \bar{\mathbf{r}}_j|} \quad (2)$$

ただし、 $\lambda$ は有効相互作用パラメータで、 $\lambda = a/a_b^*$ で与えられる。 $(a_b^*$ は有効ボーア半径で、 $a_b^* = \hbar^2/2m^*e^2$ )

この多電子のハミルトニアン固有状態を求めるために、1電子問題の固有状態を基底に採用する。円形ビリヤード内の1電子の固有状態は

$$\varphi_{\pm k, \ell} = C_{k, \ell} J_k(\gamma_{k, \ell} r) e^{\pm i k \theta}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots; \ell = 1, 2, \dots) \quad (3)$$

で与えられる。ここで、 $J_k(x)$ は $k$ 次のベッセル関数、 $\gamma_{k, \ell}$ は $J_k(x)$ の $\ell$ 番目の零点で

ある。 $k$ は電子の角運動量 $\hbar k$ に対応する。また、エネルギー固有値は $E_{k, \ell} = \gamma_{k, \ell}^2$ で与

えられる。この固有関数を用いて、多電子のハミルトニアンの固有状態を求めるためには、次のような4次元積分を数値的に行う必要がある。

$$\int \frac{\tilde{J}_{k_1 \ell_1}(r_1) \tilde{J}_{k_1' \ell_1'}(r_1) \tilde{J}_{k_2 \ell_2}(r_2) \tilde{J}_{k_2' \ell_2'}(r_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-i k_1 \theta_1} e^{-i k_2 \theta_2} e^{i k_1' \theta_1'} e^{i k_2' \theta_2'} r_1 dr_1 r_2 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 \quad (4)$$

ただし、 $\tilde{J}_{k, \ell}(r) = J_{k, \ell}(\gamma_{k, \ell} r)$ である。この数値積分が今の問題において、最も計算の労力のかかる部分であり、テクニックを要するが、詳細は紙面の都合で省略する。

### § 3 数値計算結果

ここで注意すべき点は、系の対称性から、それぞれの電子の角運動量は個別には保存しないが、全角運動量は保存することである。電子が2個で、スピン3重項の場合のみの結果を示す。この場合、波動関数の空間部分が反対称である。2電子の基底関数として、式(3)で与えられる関数からスレーター行列を作る。基底の数としては900個ほどを用いた。このとき計算すべき相互作用積分(4)の数は80万個のオーダーになる。全角運動量 $L = 0, 1, 2$ の場合の結果を示す。

#### (i) 累積状態密度

1電子のみの場合、状態密度 $\rho(E)$ は半古典極限では一定になる。すなわち $\rho(E) \sim \text{const.}$ 。したがって、2電子の場合は、もし電子間に相互作用がなければ、

状態密度は、 $\int_0^E \rho(E - E') \rho(E') dE' \sim E$ で与えられるので、半古典極限では

エネルギー $E$ に比例し、累積状態密度は $E^2$ に比例する。実際、このことは数値計算の結果を表す図1(左)で確かめることができる。これらの図において、実線は数値計算の結果、破線は2次曲線でのフィティングの結果を表す。高エネルギー領域における、実線の破線からのずれは、対角化に用いた基底の数の不足を意味する。

すなわち、基底を多くとればとるほど、実線と破線の一致する領域の上限は、エネ

ルギーの高い方へずれることが、数値計算により確かめられた。一方、低エネルギー領域における不一致は、半古典近似からのずれを意味する。同様のことが、電子間相互作用のある場合に成り立つかどうかは自明ではないが、数値計算の結果は、少なくとも近似的に、高エネルギーの極限で累積状態密度は  $E^2$  に比例することを示す (図 1 右)。

以下のエネルギー準位統計では、これらの図において、低エネルギー領域と高エネルギー領域を除いた実線と破線の一致する部分の、約 700 個の準位のみについて統計をとる。また、unfolding を行う。すなわち、エネルギー準位  $E_i$  の代わりに、

規格化されたエネルギー準位  $e_i = A \cdot E_i^2 + B \cdot E_i + C$  を用いる ( $A$ 、 $B$ 、 $C$  は累積状態密度のフィッティングパラメータ)。

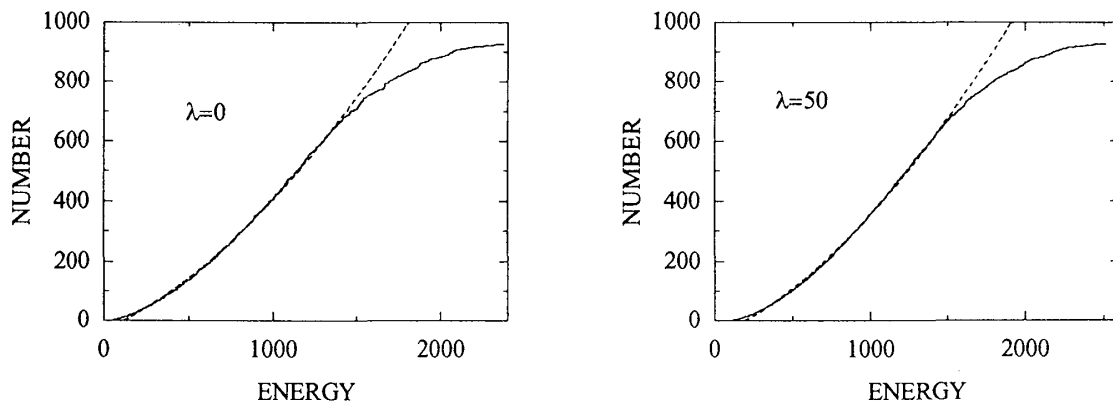


図 1 全角運動量  $L=0$  の場合の累積状態密度。

## (ii) 最近接エネルギー準位間隔分布

図 2 (a)、(b)、(c)に、それぞれ全角運動量  $L=0, 1, 2$  で、 $\lambda=0$  および 50 の場合の、最近接エネルギー準位間隔分布の計算結果を示す。 $L=1, 2$  のいずれの場合も、 $\lambda=0$  では Poisson 分布に近く、 $\lambda=50$  では Wigner 分布に近いことが分かる。一方、 $L=0$  の場合は、 $\lambda=0$  で多くの状態が縮重しているため、Poisson 分布からずれている。また、 $\lambda=50$  でも Wigner 分布からずれている。この点の解釈については未解決である。

Poisson 分布と Wigner 分布の間を内挿するものとして Brody 分布があり、 $P(s) = (1+\alpha)\beta s^\alpha \exp(-\beta s^{\alpha+1})$  で定義される。ただし、 $\beta = \{ \langle s \rangle^{-1} \Gamma[(2+\alpha)/(1+\alpha)] \}^{1+\alpha}$  であり、 $\alpha=0$  と 1 がそれぞれ Poisson 分布と Wigner 分布に対応する。これを積分すると、 $I(s) = 1 - \exp(-\beta s^{\alpha+1})$  であるので、 $\ln(\ln(1/(1-I(s))))$  を縦軸、 $\ln(s)$  を横軸にとってグラフを描くと、Brody 分布によってフィッティングできる場合にはグラフは直線になり、その傾きからパラメータ  $\alpha$  の値を求めることができる。例として、 $L=1, \lambda=30$  の場合を図 3 に示す。このように、最近接エネルギー準位間隔分布は非常によく

Brody 分布でフィッティングできることが分かる。他の場合でも同様に、Brody 分布でよくフィッティングできることが分かった。パラメータ  $\lambda$  の関数としてのパラメータ  $\alpha$  の計算結果を、 $L=1, 2$  の場合に図 4 に示す。この結果から分かるように、いずれの場合も、相互作用パラメータ  $\lambda$  が大きくなるにつれて、最近接エネルギー準位間隔分布は Poisson 分布からずれて Wigner 分布に近づく。

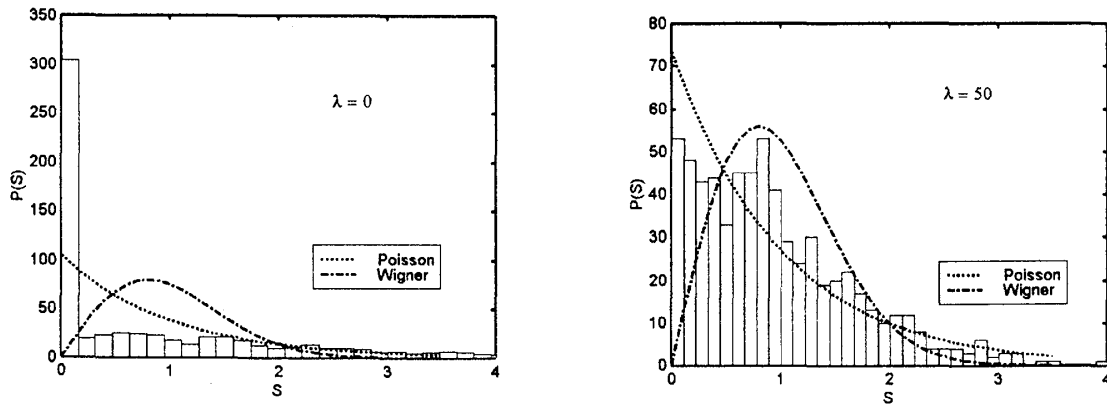


図 2(a) 最近接エネルギー準位間隔分布 ( $L=0$ )

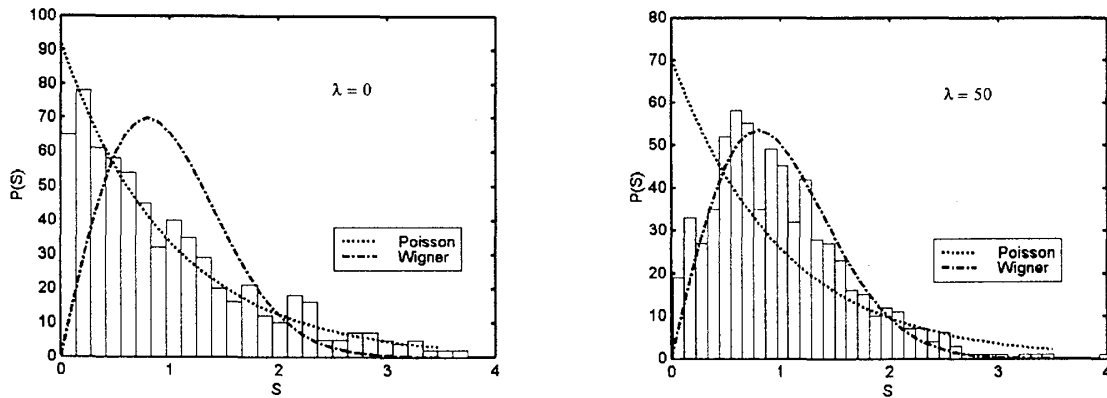


図 2(b) 最近接エネルギー準位間隔分布 ( $L=1$ )

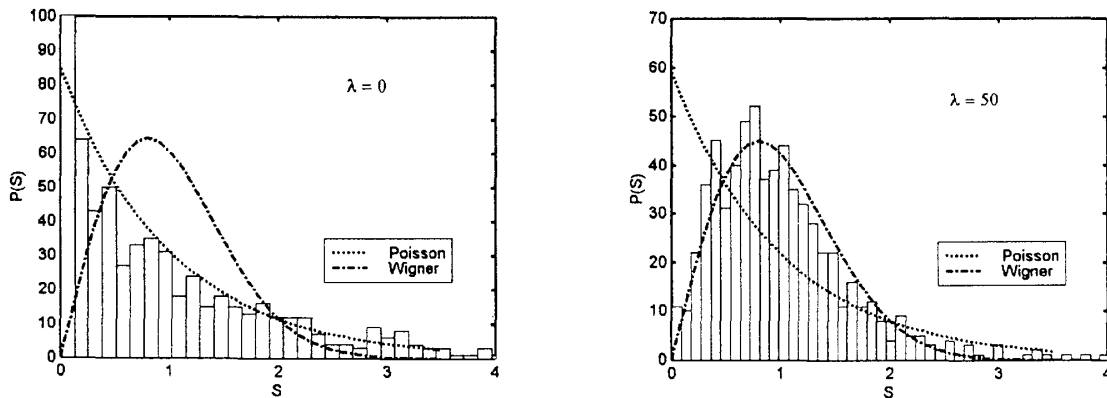


図 2(c) 最近接エネルギー準位間隔分布 ( $L=2$ )

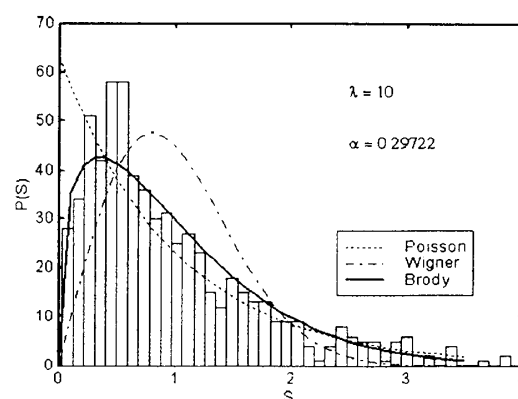
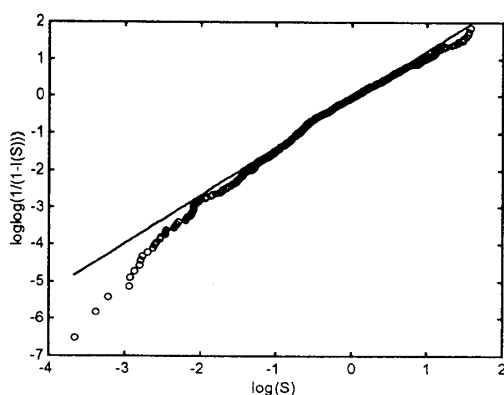


図3 Brody 分布によるフィッティング

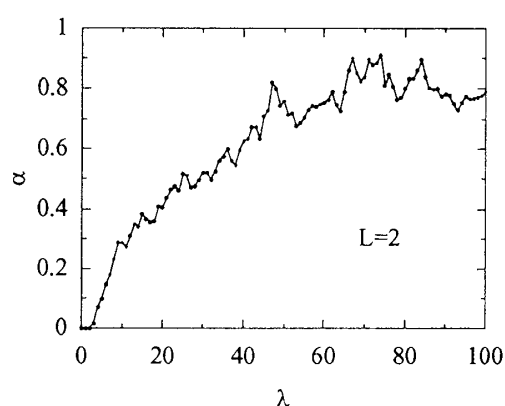
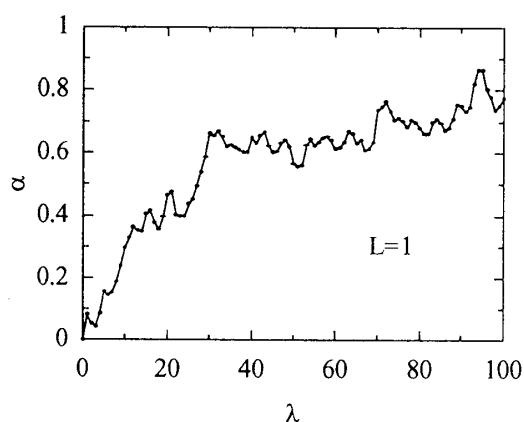


図4 Brody パラメータの $\lambda$ 依存性

### (iii) 2体相関関数

2体相関関数を次の式で定義する。

$$C(\mathbf{r}_2) = |\Phi(\mathbf{r}_1^c, \mathbf{r}_2)|^2 / \rho(\mathbf{r}_1^c) \quad (6)$$

ただし、 $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  は2電子波動関数で、

電子密度  $\rho(\mathbf{r}_1) = \int |\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_2$  であり、 $\mathbf{r}_1^c$

は  $\rho(\mathbf{r}_1)$  が最大になる点である。図5の上2つは、 $\lambda = 0$  の場合、下2つは  $\lambda = 50$  の場合の、664 番目および 665 番目の固有状態の結果を示す。 $\times$  点は  $\mathbf{r}_1^c$  の位置を示す。いずれも  $L=1$  である。これらの図から分かるように、 $\lambda$  の値が大きくなると、非常に複雑な振る舞いを示す波動関数出現する。

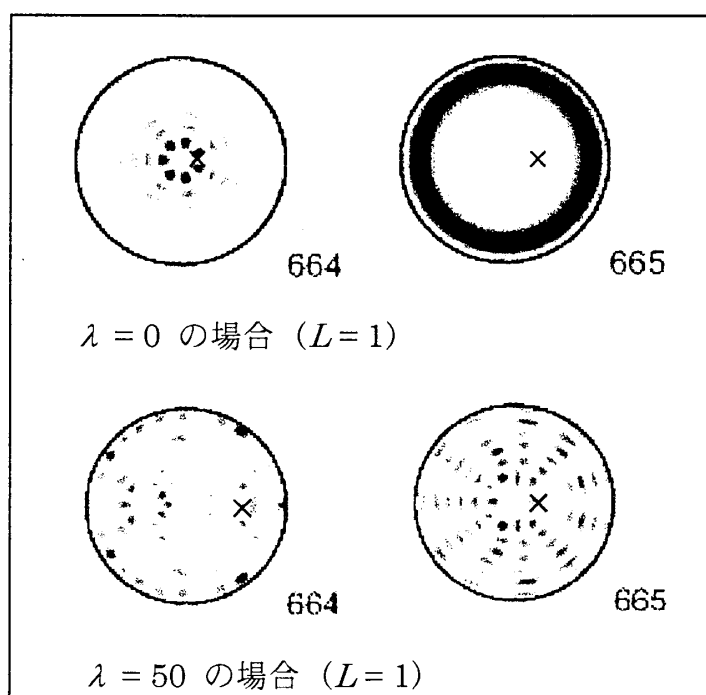


図5 2体相関関数