

# 1C3a 擬1次元ナノ空間に拘束された電子の局在電子モード

(日大理工) ○佐甲徳栄

sako@phys.ge.cst.nihon-u.ac.jp

近年半導体微細加工技術の進歩により、少数の電子をナノスケールの低次元空間に拘束することが可能となった。このようなシステムは、系のサイズの有限性により原子様の不連続なエネルギー構造を持ち、フントの規則を満たすことから「人工原子」とも呼ばれ、新奇な物性を示す少数多体系として近年大きな注目を集めている。人工原子においては、電子間相互作用の効果が系のサイズに応じて大きく変化をするために、エネルギー準位構造は、閉じ込めの強さの関数として複雑に変化をすることが知られている [1]。本研究では、この多様な人工原子のエネルギー準位構造を統一的に理解することを目的として、擬1次元ガウス型ポテンシャル中に拘束された複数電子系の量子化学計算を行い、波動関数の節構造に基づく解析を行った。

本研究で用いたハミルトニアンを以下に示す：

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right] + \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} \omega_{xy}^2 (x_i^2 + y_i^2) - D \exp\left(-\frac{\omega_z^2}{2D} z_i^2\right) \right] + \sum_{i>j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (1)$$

式(1)において  $\omega_{xy} \gg \omega_z$  の場合には、電子は  $xy$  方向に非常に強く束縛されるために、低エネルギー領域における電子の運動は  $z$  方向のみに限定される。すなわちこの場合には、式(1)は擬1次元ガウスポテンシャル中に拘束された電子のハミルトニアンを与える。このモデルを用いて、ガウスポテンシャルの非調和性が小さい場合および大きい場合について、閉じ込めの強さを表す  $\omega_z$  を変化させて、エネルギースペクトルおよび波動関数を配置間相互作用法によって計算した。

得られた各エネルギー準位について、多体波動関数の節の数によって定義されるポリヤッド量子数  $\nu_p$  [2] を調べた。その結果、 $\omega_z$  が大～中程度の場合 ( $\omega_z \geq 1.0$ ) には、エネルギー準位はポテンシャルの非調和性の大きさに係わらず、 $\nu_p$  を良い量子数とするバンド構造を持つことが示された。一方、 $\omega_z$  が小さい場合 ( $\omega_z \sim 0.1$ ) には、エネルギー準位は、(i) 非調和性が小さい場合には拡張されたポリヤッド量子数  $\nu_p^*$  によって特徴付けられるバンド構造を持つこと、そして、(ii) 非調和性が大きい場合には不規則な構造を持つことが示された [3]。この不規則な準位構造が表す電子の運動状態を明らかにするために、波動関数の節構造を調べた。その一例を図1に示す。図1の波動関数の節座標 (*nodal coordinate*) [4] を調べた結果、この波動関数は電子の運動が互いに非結合化した局在振動を表すことが明らかとなった。

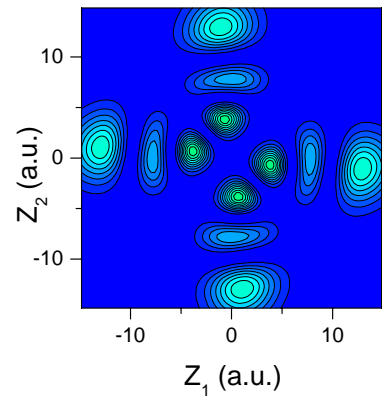


図1. 2電子系の局在波動関数. 横軸・縦軸はそれぞれ、電子1および2の  $z$  座標を表す。

[1] N. F. Johnson, *J. Phys.: Condens. Matter* **7** 965 (1995).

[2] T. Sako, P. A. Hervieux, and G.H.F. Diercksen, *Phys. Rev. B* **74** 045329 (2006).

[3] T. Sako and G. H. F. Diercksen, *Phys. Rev. B* **75** 115413 (2007).

[4] N. De Leon and E. J. Heller, *Phys. Rev. A* **30** 5 (1984).