

量子閉じ込め場内の電子状態

～ 実空間差分法に基づく数値計算 ～

June 13, 2025

目次

1. 本演習の目的
2. 対象系
3. ハミルトニアンの構築
4. 数値解析
5. 計算結果の解析

1. 本演習の目的

量子閉じ込め場内の電子は, エネルギー準位が離散化される。この演習では、**半導体量子ドット中の電子状態**を、解析的および数値的手法を用いて解明することを目的とする。

2. 対象系

今回の演習では, InSb 材料によって形成された 100nm サイズの二次元円形量子ドットを対象に、その中に閉じ込められた電子状態を解析する.

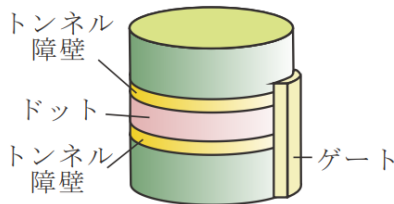


図 2.1 : InSb 量子ドット構造

量子ドットとは、電子の量子力学的な性質（粒子性と波動性）を顕著に引き出す人工的な原子様構造であり、次の二つの特長がある.

- ▶ 電子数を 1 個単位で制御できる：
- ▶ 波動性が顕著になるサイズ（ $10\sim 100\text{ nm}$ ）：
→ 閉じ込めに応じて、エネルギー準位が離散化される.

3. ハミルトニアン of 構築

電子状態の解析にはシュレディンガー方程式を解く必要がある。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V \right] \psi = E\psi \quad (1)$$

この演習では対象系のハミルトニアンを以下の二つの仮定を用いて構築する。

- ▶ **有効質量近似**

→ 結晶中の電子のふるまいを、有効質量と有効誘電率を使って“真空中の電子”になぞらえる近似

- ▶ **ハイブリッドポテンシャル**

→ 量子ドットの有効ポテンシャルを調和振動子と円筒壁という二成分を組み合わせたポテンシャル (ハイブリッドポテンシャル) とモデル化

3.1 有効質量近似

半導体中の電子は、周期的ポテンシャルの中で自由電子のように振る舞うという **有効質量近似**を導入することで、その運動をシュレディンガー方程式で記述することが可能になる。ただしこのとき、電子の質量や電荷の振る舞いは真空中とは異なるため、InSbの有効質量 $m^* = m_r m_0$ を用いて以下のように式を立てる：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V \right] \psi = E\psi \quad (2)$$

3.2 ハイブリッドポテンシャル

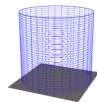
量子ドットのポテンシャルは、一様電荷分布のポアソン方程式解から調和振動子型のポテンシャルに近い形状をとると考えられる。

$$V_{\text{harmonic}}(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (3)$$



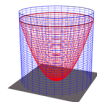
一方、量子ドットの有限性から、円筒の無限に高い障壁を仮定する。

$$V_{\text{cyc}}(r) = \begin{cases} 0 & (r < R) \\ \infty & (r \geq R) \end{cases} \quad (4)$$



本演習では、こうした構造的特徴を踏まえ、中心部で調和型、外縁で円筒壁型となるハイブリッドポテンシャルを用意した。

$$V(r) = \begin{cases} V_{\text{harmonic}}(r) & (r < R) \\ V_{\text{cyc}}(r) & (r \geq R) \end{cases} \quad (5)$$



4. 数値解析

ハイブリッドポテンシャルのシュレディンガー方程式は解析的に解くことが難しく, 計算機を使って数値解析を行う. そこで以下の二つのテクニックを使うこととする.

- ▶ **有効原子単位系:**

- 数式を簡潔にし, 数値計算の精度を向上させる単位系を導入する

- ▶ **実空間差分法:**

- 空間座標を差分化して, 偏微分方程式を連立方程式に置き換える

4.1 有効原子単位系

原子単位系は、基本定数（電子の電荷 e 、電子質量 m_e 、プランク定数 \hbar 、クーロン定数 $1/4\pi\epsilon_0$ ）を全て単位 1 とする。有効原子単位系は、有効質量近似による影響を単位系の変換に押し込めたものである。

物理量	SI 単位系	原子単位系	有効原子単位系
電荷	C	電気素量: e	e
質量	kg	電子質量: m_e	$m^* = m_r m_0$
作用	$J \cdot s$	プランク定数: \hbar	\hbar
長さ	m	ボーア半径: a_0	$a_0^* = \frac{\epsilon_r}{m_r} a_0$
エネルギー	J	E_h	$E_h^* = \frac{m_r}{\epsilon_r^2} E_h$

有効原子単位系でのシュレディンガー方程式が簡略化される。

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V \right] \phi = E \phi \quad (6)$$

導入のメリット：

- ▶ 数式が無次元化され、数値計算の精度向上
- ▶ 物質特性がスケーリングに含まれ、汎用性が向上

4.2 実空間差分法

空間座標 x を格子間隔 Δx で離散化し、関数 $\phi(x)$ を点列 $\{\phi_i\}$ とみなす。

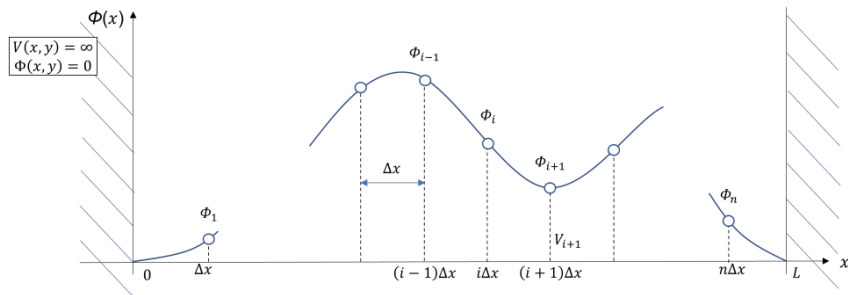


図 4.1：実空間差分法

すると、1 階微分は中心差分により以下のように近似される。

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=i\Delta x} \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x}.$$

演習 ① 2階微分の導出

先ほどの1階微分の近似式を用いて、2階微分ではどのような近似式になるかを導出せよ。

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=i\Delta x} \approx ?$$

演習 ① 2階微分の導出 解答

解答：中心差分により以下のように近似される：

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=i\Delta x} \approx \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{(\Delta x)^2}$$

2次元シュレディンガー方程式への応用

シュレディンガー方程式は見ての通り,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r) \right] \phi = E\phi$$

偏微分方程式であるが, 実空間差分法を使うと行列の固有値問題に落とし込める。

まず、二次元空間を格子状メッシュで分割し、各点で波動関数 $\phi(x, y)$ を定義する。差分法を使うと、ラプラシアンは以下のように近似される:

$$\nabla^2 \phi(x, y) \Big|_{(x=i\Delta, y=j\Delta)} \approx \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j}}{(\Delta)^2}$$

差分化した2次元シュレディンガー方程式:

$$-\frac{1}{2(\Delta)^2}(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j}) + V_{i,j}\phi_{i,j} = E\phi_{i,j}$$

演習 ② ハミルトニアン行列の構築

差分化された2次元シュレディンガー方程式は、連立斉次方程式であるため行列へと落とし込むことが出来る。以下の行列のハミルトニアン行列部分の空欄を埋めよ。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - \end{pmatrix}}_{\text{ハミルトニアン行列}} \begin{pmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{1,2} \\ \phi_{1,3} \\ \phi_{2,1} \\ \phi_{2,2} \\ \phi_{2,3} \\ \phi_{3,1} \\ \phi_{3,2} \\ \phi_{3,3} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{1,2} \\ \phi_{1,3} \\ \phi_{2,1} \\ \phi_{2,2} \\ \phi_{2,3} \\ \phi_{3,1} \\ \phi_{3,2} \\ \phi_{3,3} \end{pmatrix}$$

演習 ② 解答

連立斉次方程式に落とし込むことで以下ようになる。

$$\begin{bmatrix} \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{1,1} & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\Delta^2} & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{1,2} & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{1,3} & 0 & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{2,1} & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{2,2} & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{2,3} & 0 & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{3,1} & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{3,2} & \frac{1}{2\Delta^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & 0 & \frac{1}{2\Delta^2} & \frac{-4}{2\Delta^2} + V_{3,3} \end{bmatrix}$$

この行列を対角化することで、固有エネルギー (固有値) と波動関数 (固有ベクトル) を求めることが出来る。

5. 計算結果の解析

ハイブリッドポテンシャルの数値解を計算するファイルを実行して、調和ポテンシャル、円筒ポテンシャルの解析解と比較します。

- ▶ **数値解：**

- ▶ **解析解：**

 - 調和ポテンシャル

 - 円筒ポテンシャル

- ▶ **準位図比較：**

 - 調和ポテンシャル，円筒ポテンシャルの解析解とハイブリッドポテンシャルの数値解の準位図を比較する．

- ▶ **閉じ込め強度依存性：**

 - 閉じ込め強度 ω を変化させて，調和ポテンシャル解析解とハイブリッドポテンシャル数値解を比較する

5.2 数値解

ノートブックを実行して下さい

5.2 解析解

① 調和ポテンシャル

円筒ポテンシャル下におけるシュレディンガー方程式の波動関数は次のようになる ($n = 0, 1, 2, \dots$)、($l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) :

$$\phi_n^l(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi} r_0 |J_{|l|+1}(Z_{|l|,n+1})|} J_{|l|}\left(Z_{|l|,n+1} \frac{r}{r_0}\right) \exp(i l \theta).$$

また、そのエネルギー固有値は

$$E_n^l = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{Z_{|l|,n+1}}{r_0} \right)^2.$$

ここで $J_{|l|}$ は第一種ベッセル関数、 $Z_{|l|,n+1}$ はそのゼロ点 ($n+1$ 番目) を表す。

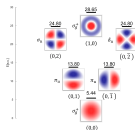


図 5.1 : 円筒解析解準位図



図 5.2 : ベッセル関数の振る

② 円筒ポテンシャル

調和ポテンシャル下におけるシュレディンガー方程式の波動関数は次のようになる ($n = 0, 1, 2, \dots$)、($l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)

$$\phi_n^l(z, \theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{n!}{(n + |l|)!}} z^{|l|} e^{-z^2/2} L_n^{(|l|)}(z^2) \exp(i l \theta), z = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} r$$

また、そのエネルギー固有値は

$$E_n^l = \hbar \omega (2n + |l| + 1).$$

ここで $L_n^{(|l|)}$ はラゲールの陪多項式を表す。

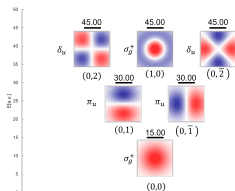


図 5.3：調和解析解準位図

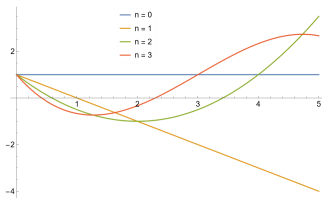


図 5.4：ラゲール陪多項式の振る舞い

5.2 準位図比較比較

演習 ③ 計算結果の解析

- ▶ 円筒ポテンシャル解析解と準位図、調和ポテンシャルの解析解と準位図を比較し考察せよ。
- ▶ ハイブリッドポテンシャルの数値解を比較し、考察せよ。

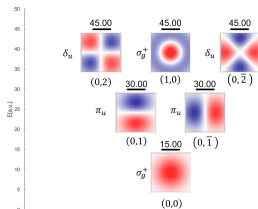


図 5.3：調和解析解準位図

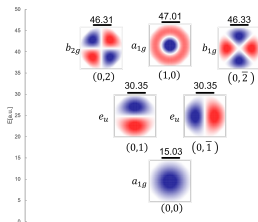


図 5.2：ハイブリッド数値解準位図

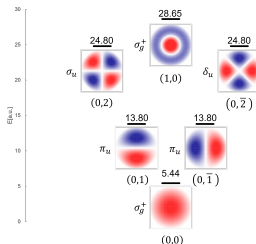


図 5.1：円筒解析解準位図

演習④ 閉じ込め強度依存性

閉じ込め強度 ω を変化させて以下を比較せよ：

- ▶ 調和ポテンシャルの解析解
- ▶ ハイブリッドポテンシャルの数値解

課題

1. 演習 ①の結果をまとめる。
2. 演習 ②の結果をまとめる。
3. 以上の演習結果をもとに、以下を含む PDF を作成して提出：
 - ▶ 演習 ③ の結果と考察
 - ▶ 演習 ④ の結果と考察
 - ▶ 感想

提出先：

`https://waseda.app.box.com/f/
accd8d004f054cfc96d3fa131416db19`

質問等はこちらまで：

`m2@qms.cache.waseda.ac.jp`