

量子ドット内の電子状態の数値計算 ～ ハイブリッドポテンシャルによる解析と差分法 ～

目次

1. 本演習の目的

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。**

対象は、**InSb 材料により形成された円形の 2 次元量子ドット。** 電子はこの中に閉じ込められ、ポテンシャル井戸の中でエネルギー準位が離散化される。

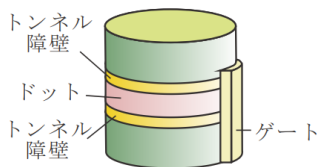


図 2.1 : InSb 量子ドット構造

2. 量子ドット

量子ドットとは、電子の量子力学的な性質を顕著に引き出す人工的な原子様構造。

- ▶ 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 (10~100 nm)

応用例：

- ▶ 単一電子トランジスタ、量子ビット
- ▶ 発光素子、レーザー

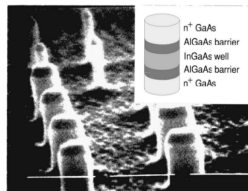


図 1：量子ドット

3. 仮定と近似

本演習では、以下の仮定・近似を導入：

- ▶ ハイブリッドポテンシャルの導入
- ▶ 有効質量近似と有効原子単位系

3.2 有効質量近似と定式化

有効質量近似により、電子の運動は以下のように記述される：

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

有効原子単位系で無次元化：

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

変換式：

$$a_0^* = \frac{\varepsilon_r}{m_r} \cdot a_0, \quad E_h^* = \frac{m_r}{\varepsilon_r^2} \cdot E_h$$

3.3 ハイブリッドポテンシャル

調和型：

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

円筒型：

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

ハイブリッド：

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

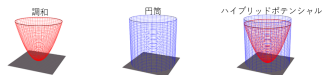


図 2.2：量子ドットのポテンシャル

4. 実空間差分法

1 次元中心差分：

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

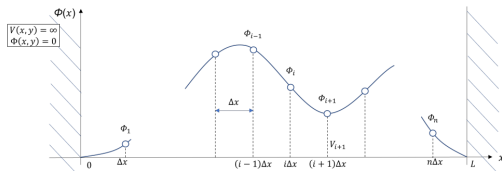


図 4.1：実空間差分法

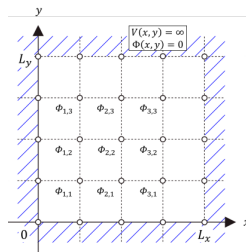
4.2 2次元差分方程式

2次元差分ラプラシアン：

$$\nabla^2 \phi_{i,j} \approx \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{i,j}}{(\Delta x)^2}$$

差分シュレディンガー方程式：

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



4.3 固有値問題への帰着

3x3 格子例の行列形式：

$$-\frac{1}{2\Delta x^2} \begin{bmatrix} -4 + V_{1,1} & 1 & 0 & \cdots \\ 1 & -4 + V_{1,2} & 1 & \cdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots \\ \vdots & & & \ddots \end{bmatrix} \phi = E\phi$$

✅ まとめ：ランチョス → 固有値・固有ベクトルまでの流れ

ステップ	内容
①	ランチョス法で大行列 A を三重対角行列 T に変換（部分空間の基底 V も得る）
②	T に対してシフト付きQR法などで固有値・固有ベクトル y を求める
③	元の空間の固有ベクトルの近似を $x = Vy$ により得る

図 4.1：対角化アルゴリズム

5.1 課題 1

解析解と比較：

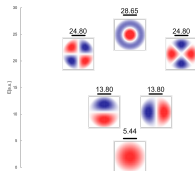


図 1

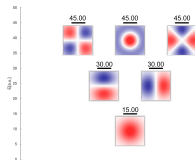


図 2

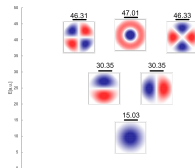


図 3

5.2 課題 2

閉じ込め強度 ω を変化させたときのエネルギー準位の比較：

エネルギーの閉じ込め強度依存性