

博士論文審査報告書

論文題目

量子場に閉じ込められた少数電子系の
動力学と電子相関に関する理論的研究
Theoretical Study on Electron Correlation
and Dynamics for Multi-Electron
Confined in Quantum System

申請者

奥西	拓馬
Takuma	OKUNISHI

電気・情報生命専攻 量子材料学研究

2012 年 2 月

ナノサイズの半導体微細領域に閉じ込められた電子は、バルクでの連続準位とは異なり、閉じ込め方向に対して量子化された離散準位を持つ。こうした量子化を引き起こす量子閉じ込め場においては、閉じ込めの次元や幾何学的形状、サイズによって、電子状態が劇的に変化する。これらの現象は一般に量子サイズ効果と呼ばれ、量子閉じ込め場では、興味深い量子力学的現象として出現する。微細加工技術の発展に伴い、単電子トランジスタ、量子ドットレーザー、量子ビット等に代表されるこれら量子効果の工学的応用に基づく次世代デバイス開発は、昨今の注目される研究分野の一つである。

量子閉じ込め場中の電子状態に関する理論的及び計算物理的研究としては、多くの先駆的報告がある。しかしながらその殆どは、静的定常状態に対する考察である。電子波の伝播や、時間変遷する外場との相互作用を考えた場合、電子系の動力学に対する考察は必須であり、これを直接的かつ直観的に具現化する数値解への要求は強い。こうした背景のもと、申請者は本研究において時間依存シュレディンガー方程式の数値解法を通し、電子系の時間発展に伴い出現する新奇量子力学的現象の理論予測とその解明を行った。本論文は序論の第 1 章、種々の前提を述べた第 2 章を含め、全 6 章から成る。以下、第 3 章以降について各章の概要を述べ、評価を加える。

時間依存シュレディンガー方程式の直接数値解法を行うことで、波動関数を実時間内で時間発展させることが可能となる。このため得られた解には直観的解釈を与えられる。一方で計算実行には大きな資源とコストを要するため、その歴史的背景は比較的新しく、未だに開発・試行が続く分野である。申請者は第 3 章において、種々の時間発展数値解法の長短を整理し、量子閉じ込め場での数値計算に最適なアルゴリズムを探索した。各方法の違いは、波動関数に対する時間推進演算アルゴリズムに起因する。申請者が取り上げた方法は、波動関数の時間変化の逐次解析に適している (1) 2 次精度差分法 (2) 指数積分法 (3) 短反復ランチョス法の 3 種である。これらアルゴリズムに基づいた計算により、申請者は各方法の差別化を図った。結果、実時間・実空間差分近似にて時間発展計算を行う場合は、(2) の方法が計算時間と精度のバランスにおいて優れていることを評価し、本研究における主要な数値計算法として採用している。一方で (3) の方法は多大な計算時間を必要とするものの、非常に優れた計算精度を有している。このため、より精度が求められる電子相関を扱うために、第 6 章ではこの方法を採用している。

さらに申請者は、単電子の時間発展を検討する系として量子リングに着目し、その解析結果を第 4 章に纏めている。量子リングはその特徴的幾何対称性から従来注目されている系である。例えばベクトルポテンシャルが波動関数に与える位相変調 (AB 効果) や軌道角運動量と電子スピンとの相互作用等、これまで多くの研究が為されている。これら量子効果はいずれも、量子リングの周回方向への全対称性に起因するものである。一方、観測行為そのものが系の対称性を低下させ、幾何学的対称性に基づく量子効果の抽出に影響

響を及ぼすことに注意すべきである。本研究にて申請者は、電子波束の共鳴トンネリングに伴う量子準位間干渉効果に着目している。量子リングに電子波束の出入口として導波路を接続した場合、系全体の幾何対称性が全対称から2回軸対称へと低下する。孤立した量子リングは全対称性の要請から二重縮退を有するが、この対称性低下により系内全ての縮退が解ける。これら分裂幅は小さいため擬縮退を保持するが、各軌道はそれぞれ異なった軌道対称性（偶奇性）を有する。従って通常の電子波束注入では、この擬縮退軌道の内の偶奇性が一致する軌道とのみ共鳴を生じ、量子リングを通過する。しかしながら人為的に制御した導波路の使用により、申請者は敢えて対称性を低下させた電子波束を導入することで、偶奇両方の擬縮退軌道と共鳴が可能であることを、本研究で初めて見出した。さらにこの共鳴過程において状態間干渉が起こることを理論的に明らかにした。加えて申請者は、静磁場による共鳴トンネリングの変調についても検討を行った。結果、印加磁場強度の可変により、電子密度の回転方向の制御が可能となることを見出した。これらは理論計算に基づく全く新しい物理現象の発見であり、極めて高く評価できる。

一方、量子場に閉じ込められた複数電子に関しては、その電子相関の影響は甚大である。申請者は第5章にて従来の数値計算法を用いた際の電子相関の扱いの難しさに言及し、新たな方法開発に取り組んだ結果を述べている。量子ドットは人工原子と比喻され、原子に類似した電子状態のため、計算科学の立場からは非制限ハートリーフォック（UHF）法やスピン密度汎関数理論等の平均場近似に基づいて研究が多く行われてきた。しかしこれら平均場での取り扱いは、電子間相互作用が強く表れる系の記述は苦手である。とりわけ、電子相関が相対的に強い影響力を持つ量子閉じ込め場系では、平均場近似を超えた電子間相互作用の取り扱いが求められている。電子相関を直接取り込む厳密対角化法を用いた研究も報告されるが、多変数波動関数を直接扱う性質上、電子数が増えるにつれて莫大な計算コストを必要とする困難さを併せ持つ。申請者はこの問題に対して、UHF法により求められた複数の自己無撞着（scf）解に着目し、これらの共鳴として電子相関効果を取り入れる新たな方法を提案した。彼は具体的な計算対象系として4回回転軸対称を有する正方量子ドットを想定し、シングレットスピン相関を有した二電子に着目した。この共鳴UHF法では、電子相関をUHF scf解の間での共鳴として捉えるため、非常に少数の基底群でも、十分な精度で系の電子相関の記述が可能となる。加えて申請者は、本方法と従来の励起配座との配置間相互作用を組み合わせた新たな方法論を展開し、厳密対角化法に匹敵する精度を有する解法に成功した点は、高く評価される。

さて、全ての実験においては、系に対して外部から電子を注入しなければならず、その初期時点ではいかなる場合も電子は系の非固有状態にある。一電子非固有状態の時間発展は、多くの教科書でその詳細な記述が為されてい

るが、多電子系に対する検討は皆無である。その理由は、多電子系では固有状態それ自身を算出する一般則がなく、決定が極めて困難な為である。第 6 章では、第 5 章にて開発した共鳴 UHF 法を時間発展方程式へ組み込んだ全く新たな方法論を展開して、非固有状態を初期配座とした複数電子系の動力学を第一原理的に解明した。具体的には、時間依存波動関数を UHF scf 解で線形展開し、時間依存シュレディンガー方程式を UHF scf 解に対する展開係数の時間発展方程式へと変換した。その結果、一電子非固有状態で明らかとなっている電子状態の時空的変遷が、複数電子系でも同様に生じていることを本方法で数値的に実証することに成功した。とりわけ申請者は、固有関数展開では解析不能な密度の揺らぎに対して、その空間的ゆらぎが UHF scf 解間の遷移として捉えられることを初めて明らかにした。共鳴 UHF 法に基づくことにより、高い精度で電子相関を時間発展に取り込んだ議論を可能にした本理論は、極めて価値の高いものである。

以上要約する。申請者はまず、種々の時間依存シュレディンガー方程式の数値解法の比較検討を行い、量子閉じ込め場に対して最適な演算法を選択した。続いて、選択した数値演算法を量子リングにおける電子波束の共鳴トンネリングに適用した結果、状態間相互作用が新奇な量子現象を生み出すことを初めて理論的に見出した。また電子相関を扱う方法として新たに共鳴 UHF 法を提案・開発した。その上で配置間相互作用の方法との組み合わせにより、量子閉じ込め場における電子相関を見通し良く、かつ非常に高精度に取り扱うことに成功した。さらに共鳴 UHF 法を時間依存問題へ拡張し、量子閉じ込め場において非定常状態から開始される少数電子系の動力学を初めて理論的に明らかにした。特に本研究を通じて開発された共鳴 UHF 法並びにその時間発展方程式は、特徴的な幾何形状を有する量子閉じ込め場において、非常に優れた精度で電子相関を扱う、全く新しい方法である。これらは、今後の電子状態理論とそれに基づく計算物質探索分野において、極めて有力な手法となるばかりでなく、これまで未開拓であった電子相関の時間発展理論に対して、第一原理動力学考察の指導指針として重要な貢献を与えるものである。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。

2012年2月

審査員

主査	早稲田大学教授	工学博士（慶応義塾大学）	武田 京三郎
副査	早稲田大学教授	工学博士（東北大学）	堀越 佳治
副査	早稲田大学教授	工学博士（早稲田大学）	宗田 孝之
副査	早稲田大学教授	工学博士（東京工業大学）	小林 正和