

氏 名 三宅 隆

授与した学位 博士

専攻分野の名称 工学

学位授与番号 博乙第4296号

学位授与の日付 平成21年 3月25日

学位授与の要件 博士の学位論文提出者

(学位規則第5条第2項該当)

学位論文の題目 Study of Two-Dimensional Electron Systems by Classical-Map Numerical Simulation
(古典写像数値シミュレーションによる2次元電子系の研究)

論文審査委員 教授 東辻 浩夫 教授 奈良 重俊 教授 上浦 洋一
准教授 鶴田 健二

学位論文内容の要旨

電子系の性質は、固体物性の基礎の一つとして長年にわたり研究されてきた。理論的解析における困難の原因は相互作用が長距離型であることと結合度が大であることである。近年、半導体界面に移動度の大きな2次元電子系が形成され、電子デバイスの要素として用いられるようになり、2次元電子系の理論的研究が重要となっている。特に、量子ドットなど様々な幾何学的自由度に対応した理論的方法の開発が必要である。また、電荷に加えて、電子のスピンを利用するデバイスの研究（スピントロニクス）が盛んになりつつあり、スピン分極等についての知見も求められている。

原理的には多電子系を量子力学的に厳密に解析する理論的方法がある。例えば、多電子分子としての扱いを拡張する、多体系の波動関数をモンテカルロ法で求める（量子モンテカルロ法：QMC）などである。しかし、いずれも数値的な扱いが必要であり、最近の電子計算機を用いても多大な計算資源を要し、有限系では20電子程度の系までの解析が可能になったにすぎない。

一方、古典系に関しては、座標空間における分布関数に対する積分方程式の理論が発達しており、結合度の高い液体状態についても精度の良い解析が可能になっている。ここでも数値的取り扱いが必要であるが、座標空間と運動量空間が分離しているため、量子的解析に比べて取り扱いが格段に容易である。

このような状況において、Dharma-wardana と Perrot は Classical-Map Hypernetted-Chain (CHNC)法を2000年に提案し、3次元一様電子系や2次元一様電子系に適用した。この方法では、次に基づいて量子系を古典系に写像する。

- ① 電子の縮退の効果を量子温度として取り入れる。
- ② 同種スピンの電子に働くフェルミ統計の効果を、同種スピンの電子間に働くパウリポテンシャルとして考慮する。
- ③ 電子の波動的性質を考慮しクーロンポテンシャルに回折効果を取り入れる。

この方法が有用であることは、その後、提案者を含め、多くの応用例で示された。

この論文では、CHNC法の写像に基づいて分子動力学法や古典的モンテカルロ法などの数値シミュレーションを行い、2次元電子系に関して次のような新たな知見を得た。

- 1) 一様系に対して、数値シミュレーションの結果を、QMCの結果と対照することにより、写像の妥当性を検討した。相関エネルギー、分布関数等について基底状態のQMCの結果を再現し、有限温度に対してもCHNC法と矛盾のない結果を得て、有効性を確認した。
- 2) この数値的手法を2次元有限系に適用して、電子分布を検討し、結合度の増加に伴い周辺から密度の振動が現れることを示した。
- 3) 2次元有限系のスピン分極状態を検討するために、基底状態のエネルギーの比較検討を行い、閉じ込め強度をパラメータとした場合 $r_s \sim 0.4$ で分極化、密度をパラメータとした場合 $r_s \sim 10$ で分極化することを見出した。後者は、一様系で可能性のある値よりやや高密度である。
- 4) 有限系でのWigner結晶化の検討を行った。QMCによる $r_s \sim 40$ 程度での結晶化に比べて低密度まで結晶化しない結果が得られた。これは、適切な指標を用いなかったため、あるいは、量子温度の設定が、波動関数の重なるの小さい状態に対しては適切でないためと推測される。

論文審査結果の要旨

この論文は、2次元電子系に対して、古典系に写像してから数値シミュレーションを行うことにより、幾何学的自由度を反映し、かつ、量子シミュレーションに比べて少ない計算資源で特性解析を行える方法を提案し、量子ドット中の2次元電子系などに適用して興味ある結果を得たものである。

半導体界面・表面に形成される2次元電子系は電子デバイスの重要な構成要素であり、最近では、量子ドットなど面内の微細構造に対応した有限系の様々な応用が研究されている。また、電子の電荷に加えて、スピンの利用も考えられている。一方、これらの電子系では量子力学・量子統計の効果が大きく、第一原理的解析（量子シミュレーション）には多くの計算資源が必要であり、少数系あるいは一様無限大の系を除けば、十分な解析が行われていない。このため、幾何学的自由度を取り入れて、スピンに関する性質も含めて解析できる理論的方法が求められている。

この論文では、積分方程式による解析を想定して提案されていた古典系への写像法に基づき、写像後の系にモンテカルロ法および分子動力学法の数値シミュレーションを適用して、幾何学的自由度に対応した解析が通常の計算資源の範囲で可能であることを示した。具体的には、まず、一様系に対する数値シミュレーションの結果をこれまでの量子シミュレーションの結果と比較して、後者を精度よく再現していることを確かめ、積分方程式による解析における近似が解消されること、および写像法が改良できることを示した。次に、量子ドットに対応する系を解析し、100程度の電子を含む系において、電子の平均密度が一定値より減少するとスピン分極した状態に転移する現象があることを示した。更に、有限系のウイグナー結晶化を解析したが、分析した指標の範囲では明確な結晶化は観測されなかった。

論文で述べられた結果のうち、一様系および量子ドットのスピン分極に関する結果は学術論文として既に公刊または公刊予定であり、本論文の方法が有用であることが示されている。また、結晶化に関する結果はこの方法の適用限界を示唆している可能性がある。

以上のように、本論文で提案する方法は、電子デバイスへの応用において重要な2次元電子系に対して、形状の自由度を取り入れた解析を通常の計算資源の範囲で可能にするものであり、学術的な意味があるとともに広い応用が期待される。よって、本論文は博士（工学）の学位に値する。