

主 論 文 要 旨

報告番号	甲 乙 第	号	氏 名	波田 陽子
主 論 文 題 目： シリコン量子ドットにおける電子状態の理論研究				
(内容の要旨) シリコン(Si)が伝導バンドに複数の底(谷)を持つ多谷構造であることを考慮した、Si 単一量子ドットおよびSi 二重量子ドットにおける電子・スピン状態の理論研究を行った。 2つの谷の縮退を仮定して、有効質量近似から得られる一電子準位を用いた、単一量子ドットにおける電子状態の計算を行った。クーロンおよび交換相互作用を考慮し、基底状態を求めた。また、磁場依存性として Zeeman 効果を取り入れた。多谷構造は異なる谷の縮退した一電子準位を生むが、これらの間にはスピン結合がないために、異なるスピンを持つ配置がエネルギー縮退する。量子ドットのサイズが 10 nm よりも小さいと、電子は異なる谷の最低準位をスピン結合なしで占有し、磁場下ではそれらのうち最大スピンのものが現れる。これは、高スピンは軌道縮退がある場合のみ交換相互作用によって現れる(Hund 則)谷が一つしかない GaAs 量子ドットの場合とは極めて異なる。一方、量子ドットのサイズが 10 nm よりも大きいと、電子は同じ谷の上の準位を、交換相互作用を得るために、高スピンを作って占有する。また、不純物や閉じ込めポテンシャルの急峻な端などによる谷間散乱がある場合は、異なる谷の縮退していた準位は混ざり分裂し、低スピン状態が現れやすくなる。 次に量子ドットを2つ結合した、Si 二重量子ドットにおける電子・スピン状態を調べ、局在電子スピン間での交換結合を評価した。1つの量子ドットに2つの縮退した一電子準位を考える。すると量子ドット間のトンネル結合には、同じ谷の準位間と異なる谷の準位間のトンネル結合の、2種類がある。同じ量子ドット内および異なる量子ドットにある電子間のクーロン相互作用を厳密に取り入れて、計算を行った。交換結合は、異なる谷間のトンネル結合も量子ドット内の谷間散乱もない時にははたらかないことが分かった。一方、異なる谷間のトンネル結合がある場合には交換結合がはたらく。それらの大きさを見積り、量子ドットを量子情報処理装置へ応用する際の問題点を指摘した。 次に tight-binding モデルを用いて、原子サイズの構造を考慮した一電子準位の計算を行った。谷の縮退を調べるために、最低およびそのすぐ上の一電子準位の準位間隔の、閉じ込めポテンシャルによる変化を調べた。閉じ込めポテンシャルに関して、ゲート電極によるものと酸化によって作製される量子ドットに対するものの2つのモデルを考えたが、いずれの場合も量子ドットが非常に小さい場合を除き、分裂は小さくなく、有効質量近似による計算は妥当であると考えられる。				