計算数理工学コンファレンス論文集 Vol. 3 (2003 年 6 月), 論文 No. 02_062002 JASCOME

確率力学を用いた量子ドットの共鳴状態の解析

ANALYSIS OF RESONANT STATES IN A QUANTUM DOTS WITH NELSON'S STOCHASTIC MECHANICS

宮川　悠 [1)]、植田　毅 [2)]

Yuu MIYAGAWA and Tsuyoshi UETA

1) 千葉大学自然科学研究科 (〒 263-8522 千葉県千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail: myuu@graduate.chiba-u.jp)
2) 千葉大学総合メディア基盤センター (〒 263-8522 千葉県千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail: ueta@faculty.chiba-u.jp)

Nelson's quantum mechanics, using the real-time stochastic process, enables us to describe individual experimental runs of a quantum system in terminology of the "analog" of classical mechanics. Therefore, a lot of studies of the tunneling time have been done by use of Nelson's approach of quantum mechanics. In the present paper, we turn our attention to the resonant tunneling phenomena in one dimension. We evaluate the tunneling times on resonance by averaging the traverse times for sample trajectories. The tunneling time is compared with the life time of quasi-bound states in a quantum dot. We also mention a method to apply Nelson's stochastic mechanics to two dimensional systems with complicated shape.

Key Words : stochastic mechanics, resonant tunneling, quantum dot, tunneling time, boundary element method

1. はじめに

量子力学の定式化として、波動力学、行列力学、経路積分法が広く用いられているが、第４の量子化法として Nelson の確率力学がある [1, 2, 3]。これは運動方程式、軌道という古典力学そのままの概念を用いているため、古典論との対応を見やすい。特に、トンネル効果などの量子現象の古典的解釈に用いられてきた [4]。近年、この確率力学により粒子が障壁を越える場合の解析をすることにより、トンネル時間の研究が行われている [5]。本論文では、１次元２重障壁系（量子ドット）のトンネル現象おける共鳴状態での電子の振る舞いを調べた結果を示す。また、カオス的振る舞いが注目される２次元の量子ドットへの適用方法についても言及する。

2. 定式化

2.1. Nelson の確率力学

Nelson の確率力学は Newton の運動法則に量子揺らぎを導入し、量子の運動を記述しようとするものである [1, 2, 3]。運動方程式は

$$d\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}(t), t)dt + d\boldsymbol{w}(t) \tag{1}$$

の型の確率微分方程式が仮定される。ここで、$d\boldsymbol{w}(t)$ は Wiener 過程を表す、平均値 0、分散 $(\hbar/m)dt$ の正規乱数を成分に持つベクトルである。

量子の座標 $\boldsymbol{x}(t)$ の平均前方微分を D、平均後方微分を D_* として [1, 2, 3]

$$D\boldsymbol{x}(t) \equiv \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}(t), t) \tag{2}$$

$$D_*\boldsymbol{x}(t) \equiv \boldsymbol{b}_*(\boldsymbol{x}(t), t) \tag{3}$$

と定義する。また、加速度は時間反転対称性を考慮して

$$\boldsymbol{a}(t) \equiv \frac{1}{2}DD_*\boldsymbol{x}(t) + \frac{1}{2}D_*D\boldsymbol{x}(t) \tag{4}$$

と定義される。ここで、

$$\boldsymbol{v} \equiv \frac{1}{2}(\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}_*) \tag{5}$$

$$\boldsymbol{u} \equiv \frac{1}{2}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}_*) \tag{6}$$

により流速度 $\boldsymbol{v}$ と拡散速度 $\boldsymbol{u}$ を導入すると、

$$\boldsymbol{a} = \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} - (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} - \nu\triangle\boldsymbol{u} \tag{7}$$

と書け、Newton 方程式

$$m\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{\nabla}V \tag{8}$$

を用いると

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -\frac{\boldsymbol{\nabla}V}{m} - (\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} + \nu\triangle\boldsymbol{u} \tag{9}$$