

博士学位論文

量子囲いにおける量子化された 走査型トンネル顕微鏡電流ならびに 顕微鏡像の理論的研究

Theoretical study on quantized STM current and
STM images in a quantum corral

2017 年 9 月 博士(工学)

埼玉工業大学大学院 工学研究科

電子工学専攻

龍見 洋平

1.序論	1
1.1. 緒言	1
1.2. 走査型トンネル顕微鏡	6
1.3. 量子囲い\ (quantum corral)	9
1.4. Shockley 電子	11
2. 量子囲い内に束縛された電子状態	14
2.1. 1次元系準定常状態	16
2.2. 2次元系準定常状態	19
2.3. STM の画像解析と STS	23
3. STM 電流の量子輸送とフラクタル	28
3.1. 目的	28
3.2. STM の I - V 特性と障壁幅	28
3.3. I - V 特性の位置依存性	31
3.4. STM 電流の QC サイズ依存性とフラクタル	36
3.5. 結論	43
4. 有限矩形井戸型ポテンシャルに束縛された粒子の不確定性関係	45
4.1. 目的	45
4.2. 運動量と位置の標準偏差	48
4.3. 異なるポテンシャルに束縛された粒子の不確定性関係	63
4.4. 結論	64
総括	65
付録 A	66
付録 B	72
付録 C	75
付録 D	78
参考文献	80

謝辞	82
博士学位論文の対象となる学術論文	83

1.序論

1.1. 緒言

現在のナノテクノロジーの発展は 1980 年代初頭に開発された走査トンネル顕微鏡 (Scanning tunneling microscope : STM) により, さらに加速されたといっても過言ではない. 当初, STM は自然界に存在する安定な物質の表面観察が主なものであったが, 後に STM をもちいてナノメートルサイズの構造物を構築することが可能となった. それらは自然界には存在しない人工物である. 本論文では走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscope:STM)を用いて構築された量子囲い(Quantum Corral : 以下 QC と略記)内に束縛された電子状態の解析を主な目的とする.

表面解析法

極微の物質を見る手段として開発された光学顕微鏡が表面解析の出発点である. 光学顕微鏡は電磁波を物質に照射し, 透過あるいは反射した電磁波の状態を測定することで解析がなされてきた. それ以降, 電子顕微鏡がより極微の物質を見る手段として開発され, 発展してきた. 特に電子は電荷をもつため, 加速することが可能であり, より極微の情報を得ることができる. しかしながら, その基礎的な原理は光学顕微鏡と変わらない. これは STM や Atomic Force Microscope(AFM)が登場するまでは基本的に変わっていない. 以下に, 一般的に用いられている表面解析手法を解説する.

(1) 低速電子線回折法(LEED: Low Energy Electron Diffraction)

物質に入射する電子のエネルギーが低くなると, 物質を構成する原子による電子の散乱確率は増加する. そのために, 20 から 400eV 程度のエネルギー領域の電子を固体に入射させて得られる回折像は, その表面最上層から数原子層までの構造に関する情報を与える. 回折像自体は表面の 2 次元的な周期性に関する情報を与えるが, 各単位格子中の原子の位置を明らかにしない. これを求めるには, 固体表面内における電子の多重散乱を考慮した動力的な取扱いが必要となり, 散乱強度の入射電子のエネルギーや入射方向による変化を計算により求める. この結果を実験結果と比較して, 表面の原子配列を求めることが出来る. LEED 像は, 表面の形態や完全性に関する

情報も与える。このような、LEED の性質を積極的に利用したものが、低速電子の回折点の形状分析法(SPA-LEED)と呼ばれるものである。この他に、スピン偏極した電子を固体表面に入射させて、表面における磁氣的性質などを調べるスピン偏極低速電子線回折法(SPLEED)がある。最近では、diffuse な回折強度の解析を行うことにより、表面の微細な部分における原子配列を得る方法も開発され注目されている。

(2)透過型電子顕微鏡法－透過型電子線回折法(TEM-TED : Transmission Electron Microscopy - Transmission Electron Diffraction)

薄膜あるいは微粒子試料の表面を透過した電子を用いて観察を行う。透過電子回折も同時に得られるので TEM-TED 法と呼ばれる。薄膜の上・下表面を観察するプランビュー法と、薄膜試料の側表面、あるいは微粒子の晶癖表面の原子を表面に平行に串刺しにして観察して表面のプロファイルを観察するプロファイル法とがある。平坦な薄膜表面を得ることが必要となるが、加熱昇華薄片化、蒸着法いずれの場合も、表面エネルギーの低い低指数表面に限られる。微粒子の場合も、高指数表面のプロファイル観察は困難である。清浄な薄膜に大きな穴を開け、その縁をプロファイル法で観察するなどの工夫によって、高指数表面の観察も原理的には不可能ではないが実現は難しい。分解能についてはプロファイル法で高い分解能観察が可能となる。

(3) 反射高速電子線回折法(RHEED : Reflection High Energy Electron Diffraction)

固体表面にすれすれ(数度程度)に電子を入射させると、表面の数原子層の構造を反映する回折像が得られ、この方法により表面の構造を調べることができる。通常、電子のエネルギーが 10keV 以上のときを RHEED とよび、それ以下のエネルギー(数 100 ないし数 1000eV)の場合の中速電子線回折(MEED)と区別されているが、この区切り方は必ずしも確立したものではない。このようなエネルギー範囲の電子の波長は 0.1Å 程度以下となり、格子定数より十分に小さいため、エワルド球は逆格子の間隔よりも十分に大きくなる。電子のエネルギーが十分に高く、入射角が小さい場合の回折像から、表面の 2 次元格子の大きさや方位に関する情報が得られる。また、強度測定結果を解析することにより、表面の構造を決定することも可能である。LEED では、表面の 2 次元

逆格子をそのまま蛍光スクリーン上に投影したような回折像を与えるので、表面の構造を直感的にとらえやすいが、電子銃を表面近くに設置するため、電子銃方向に反射される電子がスクリーンに届かない。しかし RHEED の場合には、電子エネルギーが高く散乱角が小さいために、電子銃や蛍光スクリーンを試料からかなり離して置くことができる。このために、他の測定装置に対する影響や蒸着部分から RHEED の受ける影響は少なく、蒸着中の薄膜の結晶性を調べるためのモニターとして適しており、盛んに使用されている。また、RHEED の回折強度が表面の形態にきわめて敏感であることを利用して、2 次元的に成長する薄膜に関して、その成長を 1 層 1 層制御する方法が開発された。

(4) オージェ電子分光(AES : Auger Electron Spectroscopy)

試料に 3~5keV の電子を照射したとき、オージェ過程を経て試料外に飛び出す 2 次電子のエネルギーを調べることにより、試料表面から深さ 1nm 程度までの部分の化学組成を知ろうとするものである。入射電子によって内殻準位にある電子を叩き出し、そこに空孔をつくると、その準位より高いエネルギーをもつ準位にある電子がその空孔を埋め、そのとき放出するエネルギーをさらに別の電子に与え、真空準位以上に励起して試料外に飛び出させる。このような過程を経て真空中に放出されるオージェ電子は、準位間のエネルギー差で決まる各元素に固有のエネルギーをもっている。したがって、オージェ電子のエネルギーを測定すれば、表面に存在する元素の種類を同定できることになる。これがオージェ電子分光の原理である。オージェ電子分光では、H と He では内殻準位を持たないためにオージェ過程が原理的に存在しないが、H と He を除く全元素の分析が可能である。物質表面研究においては表面に存在する不純物の検出によく用いられ、表面の清浄度の評価の基準となっている。測定感度は元素にもよるが、およそ 1 原子層の 0.1% 程度である。個々の元素に対応するオージェ電子のエネルギーは数 10eV ないし 2000eV の範囲内にある。したがって、オージェ電子分光の探査深さは、この程度のエネルギーの電子の平均自由行程、すなわち 0.5-2nm 程度となる。オージェ電子分光スペクトルを測定する際、電子顕微鏡で使われているものと同じような電子レンズ系および偏向機構を用い、入射電子ビーム径を十分細く絞って走査すれば、組成の二次元像を直接画面上に表示させることが可能になる。このような機構を

もったオージェ電子分光装置を、走査型オージェ電子分光装置とよび、走査オージェ信号をデジタル化し、コンピュータ処理をして SN 比を向上させたり、組成像を色分けしてカラー表示するものも市販されている。オージェ像の分解能としては、最高 20nm 程度が実現されている。

(5) 電子エネルギー損失分光(EELS : Electron Energy Loss Spectroscopy)

入射エネルギー E_p の電子を試料に当て、試料表面付近で電子遷移などを引き起こし、それに必要なエネルギー E_1, E_2, E_3 を失ってもどってくる電子のエネルギー分布を測定することにより、試料の表面およびバルクの電子構造に関する知見を得るものである。エネルギー損失分光過程としては、電子遷移励起(バンド間遷移, バンド内遷移)の他にプラズモン励起などがある。電子遷移励起スペクトルからは、遷移の始状態である電子の充満した準位と、遷移の終状態である空いた準位に関する知見が得られる。特に始状態として内殻準位を用いる場合には、内殻準位がほとんど幅をもたないため、伝導帯など電子が空いた準位の電子構造を直接映したスペクトルを得ることができ、電子が充満した準位に関する知見を与える手法として広く用いられている光電子分光と、相補的な測定手段となる。

(6) 光電子分光法(PES : Photoelectron Spectroscopy)

光電効果を利用したもので、放出される電子のエネルギー分布や角度分布、また入射光の波長や偏向依存性を測定することによって、表面における電子状態の詳しい情報が得られる。このような電子の分光法は用いる光の波長域によって、X 線光電子分光(XPS : X-ray Photoelectron Spectroscopy)あるいは紫外光電子分光(UPS : Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy)と呼ばれる。

XPS は 1960 年前後から K.Siegbahn らによって、光源として AlK_α , MgK_α の特性 X 線を、また電子エネルギー分析器として磁場型電子分光器を用いて高分解能の光電子スペクトルの測定に成功し、化学結合の違いによって内殻電子の結合エネルギーが変化することを初めて見出した。この結合エネルギーの変化を化学シフトと呼び、注目する元素の電荷分布の変化に関連しており、シフト量から価電子状態に関する知見が得られる。さらに特性 X 線を利用する場合、発生する光

電子の運動エネルギーは 1000eV かそれ以下と小さいため、得られる情報の深さは浅く、10 ないし数 10Å である。そのため表層第 1 層近傍の分析法でもある。

UPS は光源として He, Ne などの共鳴線からの真空紫外光が利用されている。これら共鳴線の自然幅は 10meV 以下で、XPS で用いられる特定 X 線の自然幅 0.8~0.9eV に比べて小さい。現在よく利用される静電型電子分光器のエネルギー分解能は数 10meV ないし 0.1eV 程度である。そのため、XPS では特定 X 線の自然幅によって分解能が決まるのに対し、UPS では電子分光器の分解能によってほぼ決まるため、数 10meV の高分解能 UPS が可能である。XPS が主に内殻準位からの光電子放出に注目しているのに対し、UPS は化学結合に直接関与している浅い価電子準位に関する情報を与える。

(7)走査型電子顕微鏡(SEM : Scanning Electron Microscopy)

走査型電子顕微鏡は捕捉収束した電子ビーム(0.1~30keV)を試料表面で走査し、これによって表面から発生する低速の二次電子(ピークは 10eV 以下)を検出し、走査に同期させて二次電子信号を画像として表示する方法である。簡便で高い空間分解能を有する手法として、各種試料の形状観察に広く用いられている。一般には、表面を大気中にさらした試料をそのまま観察しているため、最表面構造に対する敏感性が見過ごされているが、超高真空中で清浄な表面を観察すると、反射電子顕微鏡や低速電子顕微鏡と同様にバルク試料の表面原子構造に関係した像を得ることができる。

(8)原子間力顕微鏡(AFM : Atomic Force Microscope)

測定原理は探針先端の電子と試料表面の原子との間に働く原子間力を片持ち梁(カンチレバー)のたわみとしてその大きさをレーザーをもちいた光てこ方式変位検出系で検出し、試料表面の凹凸を画像化するものである。測定の性質上、導電体や絶縁体を問わず測定することができる。生体系試料の観察も可能である。

以下に本研究で対象とする STM についてその歴史的背景を含め、詳述する。

1.2. 走査型トンネル顕微鏡

Binnig & Rohrer は 1981 年 STM を開発し、翌 1982 年に一連の論文を公表した [1-5]. STM は nm ($n : 10^{-9}$) サイズ以下の空間分解能を有するため原子配列を観察できる強力な電子顕微鏡である. STM の中枢部は先鋭化した STM 探針と探針のコントロールシステムである. Binnig らは STM 探針をピエゾ素子 (piezoelectric device) を用いて、3 次元方向に移動させ、試料表面を走査し、探針と試料表面間に流れる nA レベルの微小電流をコントロールして局所的な電流分布を画像として出力した. 強調されるべきことは 1 秒間で pm ($p : 10^{-12}$) 以下のゆるやかな探針移動が可能な技術が開発されたことである.

Binnig らは STM の有効性を示すために Si(111)表面の 7×7 再配列構造の観察を行った. 7×7 構造は 1959 年 Schreier と Farnsworth が Low Energy Electron Diffraction (LEED)による測定 [6] を行っている以来、具体的な原子配列がわかっていなかった代表的な超周期構造である. Binnig と Rohrer はその STM 画像を観察し、7×7 構造単位 (49 原子) の内部で真空側に飛び出ているアド原子 12 個および 7×7 構造単位の 4 つのコーナーホールを見出した[4]. その後、7×7 構造の原子配列モデルとして以前に高柳らが提唱していた DAS モデル (Dimer・Adatom・Stacking-fault) [7, 8] が正しいものとして認められた. 高柳らは Si(111)結晶の薄膜を作製し透過型電子線回折 (TED) を用いて実験で得られた回折強度分布を説明できるモデルとして DAS モデルを提唱していたが、決定的な裏づけがなされていなかった. 他にもいくつかのモデルが提唱されていたが、最終的に物質表面の原子配列を検出できる STMによって Si(111)の 7×7 構造の原子配列が確定されたのである. DAS モデルでは理想 Si(111)表面の 7×7 unit cell の 49 個の dangling bond が 19 個に減少しており、7×7 構造安定化の重要な要素となっている. また菱形の 7×7 構造を構成する 2 つの三角形の STM 画像のコントラストの差が Stacking-Fault の存在を示していることが明らかにされた. その後、Si の(100)2×1 表面の dangling bond による対称および非対称 dimer bond 形成など、結晶内部では見られない超周期構造である再配列構造について数多くの研究がなされ、STM のさらなる有効性が認識された. これ以後多くの物質表面の原子配列が半導体以外の金属でも、また多くの吸着系について決定され続けている [9-12].

STM の測定温度環境は当初は常温であったが、現在は液体ヘリウム温度（約 4K）以下から高温（1300K）までとなっている。極低温で実験を行う理由は高温では探針の熱拡散（thermal drift）が発生することにある。また清浄表面を観察する際にはチャンバー内の不純物の影響を十分に排除するため 10^{-9} Pa 以下の超高真空が必要である。STM は TEM や SEM などの電子顕微鏡と異なり大掛かりな電子レンズを要しない簡単な装置であり STM の主要部分はコンパクトである。しかしながら外部から侵入する振動を排除するための除振対策が不可欠である。

STM は当初、実空間の原子配列の観察が主であったが、後に STM 電流のバイアス電圧依存性から STS（Scanning Tunneling Spectrum トンネル電子スペクトル）が得られることが明らかにされ [13-15]、エネルギー空間での物理量（電子の固有エネルギー）も与える強力な顕微鏡となった。STS は物質表面の局所的な電子エネルギーの情報 LDOS (Local Density of States) を提供するため、電子状態の解析には不可欠のものである。低エネルギー電子線（100eV 程度の入射エネルギー）を用いた損失スペクトル（EELS）の測定も過去かなりなされてきたが、表面の特定の位置での電子スペクトルを得ることは電子のエネルギーが低いため不可能である。また TEM を用いて非弾性散乱電子のエネルギー分析を行い電子損失スペクトル（ELS: Energy Loss Spectrum）が得られるが、表面からの電子散乱強度が小さいため難しい。

STM は当初、物質に印加したバイアス電圧によって引き起こされる STM 電流を用いて導電性を有する物質表面の研究に限定されていたが、電気伝導性の無い絶縁体・生体物質などについても探針と試料間の原子間力を利用した AFM が開発された [16]。AFM は DNA の分子配列の測定にも用いられている。生体物質を TEM で観察するには試料を freeze dry する必要があるが AFM では生きたままの状態を試料を観察することが可能である。AFM は電気伝導性のある半導体・金属に対しても原子・分子配列ならびにそれらの振動状態の解析が接触型ならびに非接触型 AFM により行われている。また化学反応過程の解析も行われている [17-19]。また電子のスピン情報が得られる磁気間力顕微鏡も開発された [20-24]。現在 STM ならびに AFM などを総称して SPM（Scanning Probe Microscope）とよばれている。酸化物超伝導体の電子状態の解析にも使用され渦糸の分布が測定されている [25-28]。

TED による原子配列の決定は実空間でなされる STM のように直接的なものではない。多くの構造モデルを設定してそれらの原子配置から回折強度を計算し、実験で得られた回折パターンならびに回折強度の回折角度依存性 (Rocking curve) と比較して最適なものをその構造として指定するものである。したがって TED による解析は逆格子空間でなされる間接的なものである。TEM で 1 原子を観察することは可能であるが原子番号が大きい元素に限られる。これは電子ビームを nm サイズ以下に絞って単原子を観察する際に有効な散乱強度を得ることが難しいことに原因がある。電子線強度を強くすると試料表面に損傷を与えることになる。したがって STM ほどの安定した画像を得ることは難しい。また物質の表面を観察するには薄膜化しないとバルクからの寄与を無視できない。実際、高柳等は Si(111)7×7 を薄膜化した試料について高エネルギー電子線回折 (TED) パターンを測定した。原子 1 個が見られる装置として FIM (Field Ion Microscope) がある。これは He を封入した装置内で tip 先端と screen の間に強電界をかけ、He 原子を tip 近傍でイオン化して電界内を走らせ、tip 先端の拡大画像を得るものである。原子を見ることは可能であるが、多くの物質が tip に適しているわけではないし、強電場内での原子を見ることになるので通常の状態ではない。以上のように既存の装置に比べ、微弱電流や微弱原子間力を用いる SPM は測定することによる大きな影響を試料に与えない非破壊測定装置であり、現在もその有効性を発揮し続けている。下図に STM 測定系の概略図を示す。

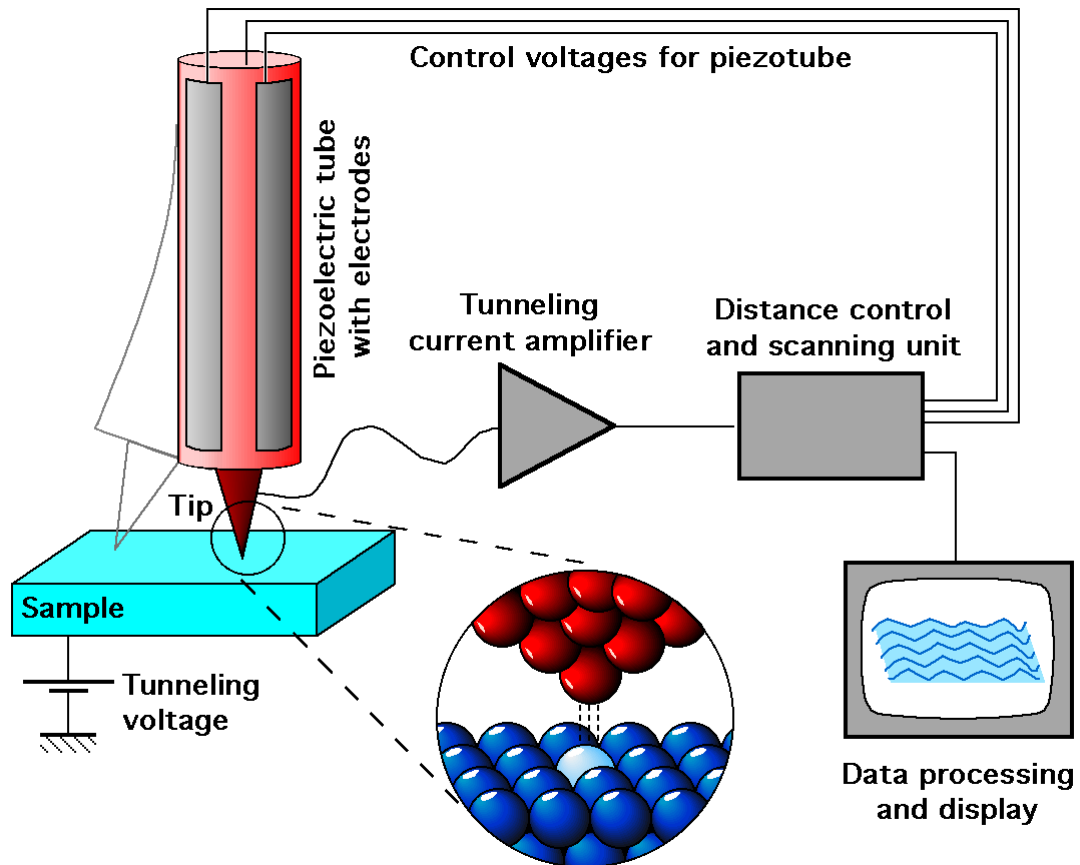


Fig.1-1 STM 装置図 (Michael Schmid, TU Wien ウィーン工科大学)

1.3. 量子囲い(quantum corral)

STM が開発された当初は表面の原子・分子配列の観察が主であり，他の電子顕微鏡と同様に受動的な装置であった．1990 年 IBM の Eigler は STM 探針を用いて銅表面上に Xe 原子を配列し人工物を構築した[29, 30]．このことを契機に STM は能動的な電子顕微鏡となった．しかもその制御できる空間領域が原子サイズなのである．これは特筆すべきことであり，人類が自然界に存在しない原子サイズの絵を描ける技術を習得したことを意味する．

その後 IBM の Eigler のグループは原子を用いた文字・図形を構築するとともに原子群を閉じた図形状に構築した．特に有名なものが Cu(111)表面上に 48 個の鉄原子を円形状に並べた系の STM 画像である．彼等はこのシステムを quantum corral(量子囲い)と名づけた[31, 32]．彼等は Cu(111)表面上に散らばった鉄原子を円形の囲い状に集める過程の STM 画像も示している．(Fig.1-2)

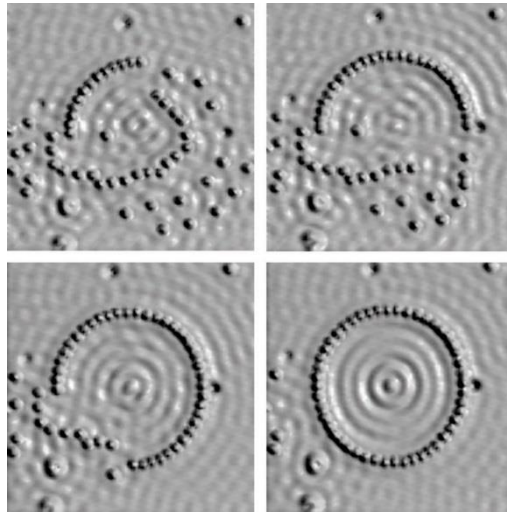


Fig.1-2 円形 QC の構築過程 (Eigler 等[33])

これらの測定温度は液体ヘリウム温度以下である．これは温度上昇に伴い QC 原子は熱拡散を起こすため QC の形を保持することが難しいためである．この Fe-Cu(111)系では吸着された Fe 原子が下地の Cu と強い化学結合を生じていないことを意味する．

銅・金・銀などの貴金属表面には真空とバルクの間に局在し、表面平行方向に自由電子的な Shockley 電子が存在する[34-39](次節で詳述)．Corral 原子は集団として Shockley 電子を閉じ込めるため、QC 内部には電子波によるさざ波状（振動状）の画像が出現する．fcc 格子の清浄理想 Cu(111)表面では銅原子は周期的に正三角形格子を構成していることを考えると、その対称性とはまったく異なる円形状のパターンが現れていることに注意すべきである．すなわち銅表面上にある非局在電子によって QC 内部に定在波が形成されていることを意味する．しかもそれらの非局在電子が数 nm にわたる波動性を有していることを明らかに示している．なお QC 形成においては QC 原子として試料表面と異なる原子を用いる場合が多いが、試料と同種元素で構築した Quantum dot (QD) もしくは Quantum Island (QI) においてもその境界が障壁となって、QD 表面内に束縛された Shockley 電子による振動パターンが見られる．また、金属表面から原子が抜き取られた量子空アイランド quantum vacant island (QVI) においても Shockley 電子によるさざ波状の画像が得られている．さらに、貴金属以外の Ni や Co などの遷移金属 island でも 3 角形状の表面において、貴金属表面上の QC と同様の STM 画像が得られている．InAs のような化合物半導体

island の表面においても同様な STM 画像が得られている．これは MOS の酸化物と半導体の界面において面方向に 2 次元自由電子的 (2DEG) 電子状態が形成されることに対応している．これらの画像も電子が波動性を有していることを如実に表している．[40]．

以前は量子力学のポテンシャル問題として標準的な量子力学の教科書で扱われていた机上のモノであった電子状態が，実体として観察された意義は大きい．QC や QD 以外でも表面上のステップ間にも電子波の定在波が存在することが STM によって観察されている[41]．この解析には光の多層膜に対する多重散乱の解析に用いられる Fabri-Pérot の式を基に議論されることが多い．

1.4. Shockley 電子

Shockley 電子は貴金属表面上に存在し、その波動関数は表面平行方向に自由電子的であり表面垂直方向は指数関数的に減衰するものである[34-39]．

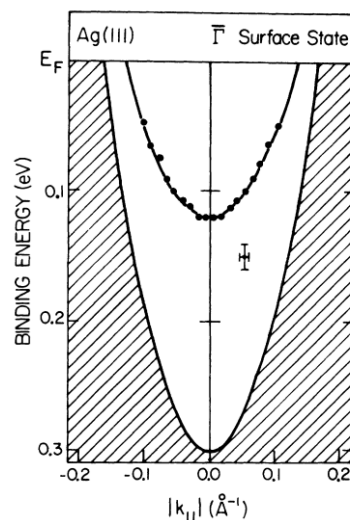


Fig.1-3 Shockley 電子のバンドギャップ

貴金属表面，例えば Ag(111)表面では(111)表面上のバルクのバンドギャップ内に Shockley 電子状態が存在する．表面平行方向の波数の基点は fcc の逆格子のゾーン境界における L 点に設定されている．ほとんど自由な電子モデルでは，結晶外部と内部の波動関数を

$$\psi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho} - \kappa z) \quad (1-1)$$

および

$$\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}) [\exp[(ik_0 + \kappa')z]c_k + \exp\{[i(k_0 - g) + \kappa']z\}c_{k-g}] \quad (1-2)$$

として割り当てる．ここに， \mathbf{r} は 3 次元の位置ベクトルであり $\mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z)$ で定義される． $\boldsymbol{\rho}$ は表面に平行な 2 次元ベクトル $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ であり， z は真空方向の座標である． \mathbf{k}_{\parallel} は表面と平行な波数ベクトルを示す． κ および κ' は実数であり，表面の両側の波動関数の減衰をあらわす．結晶内部のポテンシャルを周期ポテンシャルに拡張すると

$$U(\mathbf{r}) = U_0 + \sum_{\mathbf{g} \neq 0} U_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) \quad (1-3)$$

となる． \mathbf{g} は逆格子ベクトルを表し，波動関数が表面 $z = z_0$ において連続かつ滑らかであるという境界条件よりゾーン境界 $\frac{1}{2}g$ におけるエネルギーバンドは次のようになる．

$$E_{\pm} = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_{\parallel}^2 - \kappa'^2 + \frac{1}{4}g^2) \pm \left(U_g^2 - \frac{\hbar^4}{4m^2} g^2 \kappa'^2 \right)^{1/2} \quad (1-4)$$

複素波数を通じて上のバンド(+)と下のバンド(-)は連続的にゾーン境界に接続されている． κ および κ' の関係式は

$$\kappa + \kappa' = \frac{1}{2} g \tan(\frac{1}{2} g z_0 + \delta) \quad (1-5)$$

となる．ここで $z_0 = 0$ とすると

$$\kappa = \frac{1}{2} g \left(\frac{U_0}{U_0 + U_g} \right) \tan \delta \quad (1-6)$$

の関係が得られる．ここに δ は c_k と c_{k-g} の位相差 $c_k = c_{k-g} \exp(i2\delta)$ を表す．エネルギー $E = [\hbar^2 / (2m)](k_{\parallel}^2 - \kappa^2)$ は放物線状の分散関係を表す．なお，表面平行方向の電子は自由電子の質量より小さい有効質量を持つ．Shockley 状態は真空方向の障壁とバルク方向のバンドギャップの間に生ずる．この状況は p 型および n 型半導体の不純物準位と同様のものである．これらの不純物準位はバンドギャップ内に存在する．n 型半導体の場合，励起された電子は伝導バンドを占め，半導体内を自由に動き回ることができる．p 型半導体の場合，価電子バンド内に形成されたホールが半導体内を自由に動き回る．ドナー準位およびアクセプタ準位は分散を持たない局在準位である．これらの局在準位を占める電子およびホールは結晶内を自由に動くことはできず，長時間それらの準位に留まるのみである．Shockley バンドはエネルギーが高い位置ではバルクバンドに接近するため，高エネルギーの Shockley 電子は結晶内部にも侵入できることになる．通常，STM で半導体表面を測定する場合，± 数 V のバイアス電圧が用いられるが，QC 測定で用いられるバイアス電圧はフェルミエネルギーの上下約 100meV 程度である．これは Shockley 電子のエネルギーバンドの最小値がフェルミエネルギーから測って -100meV 程度であることによる．またこのエネルギー領域に表面平行方向に局在する電子が存在しないこと，ならびにこの領域での表面平行方向の波数 k_{\parallel} がゾーン境界の大きさより十分小さいため，原子配列が見られないことになる．すなわち Shockley 電子は表面平行方向に等方的に分布しており，半導体表面の局在電子状態とは異なっている．半導体では共有結合のため真空方向に原子が突出した異方性を有する電子状態が存在しており，その原子の変位量は貴金属表面の場合に比べて 2 桁大きい．したがって半導体表面での STM 画像には数 eV のバイアス電圧を印加して STM 画像を得ることになる．

2. 量子囲い内に束縛された電子状態

Eigler 等[31,32]が観察した円形 QC 内に見られる同心円状の振動画像は Shockley 電子が QC に束縛されたものである。清浄表面では Shockley 電子のエネルギー分散関係は射影バンドの平行方向の波数 k_{\parallel} の連続関数であるが、QC によって Shockley 電子が束縛された場合、その固有エネルギーおよび波数は離散値となる。彼等は QC 内の電子は円形の無限の高さの障壁内に束縛された定常状態にある電子を考えた。このとき半径 R の位置での固定端境界条件 $J_l(k_{nl}R) = 0$ から決定される電子の規格化された固有関数は第 1 種ベッセル関数を用いて

$$\Psi_{nl}(\rho, \theta) = J_l(k_{nl}\rho) \exp(\pm i l \theta) / [\sqrt{\pi R} J_{l+1}(k_{nl}R)] \quad (1-7)$$

で表される。Eigler 等は個々の固有状態の確率密度の重ね合わせ

$$Z(\rho) = \sum_{nl} g(l) c_{nl} |\Psi_{nl}(\rho)|^2 \quad (1-8)$$

で実験データを再現するため展開係数 c_{nl} を決定した。ここに $g(l)$ は角運動量 l にともなう縮退度とスピン自由度を表す。 $l=0$ のとき $g(0)=2$ であるが、 $l>0$ では $\pm l$ の状態が縮退しているため $g(l)=4$ であることに注意が必要である。彼等は具体的な電流強度から STM 画像を求めている。また STS の実験で得られたベッセル関数のゼロ点から得られるエネルギーピーク位置 $E_{nl} = \hbar^2 k_{nl}^2 / (2m^*) - V_0$ を評価することで、QC に束縛された電子状態が説明できるとした。ここに m^* は有効質量（真空電子質量より小さい）であり、 $-V_0$ はポテンシャルの底を表わす。

Fig.1-4 に量子数である角運動量 l に対する固有エネルギー分布を示す。Fig.1-5 に円の中心での STS を示す。ここでは固有エネルギー幅を簡単のため $0.1(E_{nl} + V_0)$ とした。実験で測定された 6 つのピークがよく再現されている。中心からずれた位置での STS は $l>1$ の状態からの寄与が増えるため Fig.1-5 のピーク間にピークが出現する。以上のことより、定常状態にある電子が STM

画像を形成するとの Crommie 等の主張は基本的には正しいと考えられる．しかしながら固有エネルギーのエネルギー幅を導入することがより一層の実験結果との一致をもたらすことは重要である．実際固有エネルギー幅を微小にすると STS の 6 つのピークの全体的プロファイルが説明できなくなる．具体的な固有状態としては円の中心で STS が測定されているため，Bessel 関数について $J_0(0)=1$ および $l>0$ のとき $J_l(0)=0$ となることから，角運動量がゼロの状態のみが STS に寄与しているとしている．また実験結果ではピーク幅が有限であり QC に束縛された電子は無限の長さの寿命を持って存在しているわけではない．したがって QC 内の電子状態を定常状態として記述することは問題である．

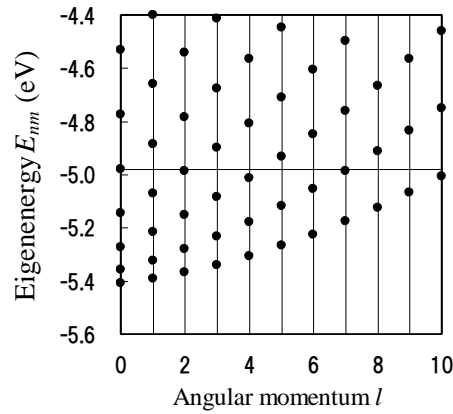


Fig.1-4 STM 画像

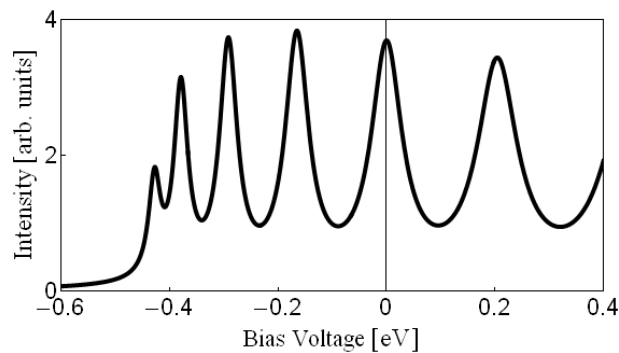


Fig.1-5 円の中心での STS スペクトル

本章の表式(1-7)に基づいて求めた $Z(\rho)$ が示すバイアス電圧 10mV 時のトポグラフ STM 画像を

Fig.1-6 に示す．ここでも固有エネルギー幅を $0.1(E_{nl} + V_0)$ とした．STM 画像は E_F から $E_F+10\text{meV}$ の間に含まれる状態で構成される．中央部のピークならびに 4 つの円形状の波頭がよく再現されていることがわかる．また中央から数えて 2 番目と 4 番目の谷が深いことも再現されている．

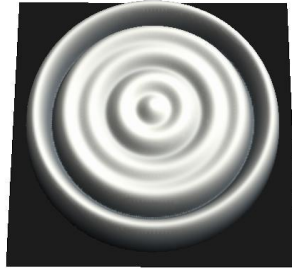


Fig.1-6 STM 画像

その後 Heller 等のグループ[32]は STM 探針から試料表面に供給された電子が各 Corral 原子に散乱されて 2 次元円形波を発生し，それらが重なり合わさって QC 内に固有パターンを形成すると結論した．この際，QC 原子を完全黒体吸収体（Perfect black dot）として扱った．すなわち QC 内電子は個々の QC 原子による散乱波が重ね合わせられた状態とした．また彼等の一部の電子はコラル原子による散乱を受け，結晶内部に侵入することとした．

2.1.1 次元系準定常状態

Kliewer 等が実験を行った矩形 QC[42]内に束縛された電子の解析を行うため，Tamura[43]の論文による手法を用いる．以下にその概要を示す．

はじめに 1 次元凸型ポテンシャル問題を考える．1 次元の時間を含むシュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = H\Psi(x,t) \quad (2-1)$$

となる．ここで H はハミルトニアンである．

$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp(-iEt/\hbar)$ とすると、時間を含まないシュレディンガー方程式は

$$H\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (2-2)$$

となる．1次元系の井戸型障壁を対象として準定常状態の解析を行った Tamura[43]．図 1 に解析に用いたポテンシャルの概略図を示す．

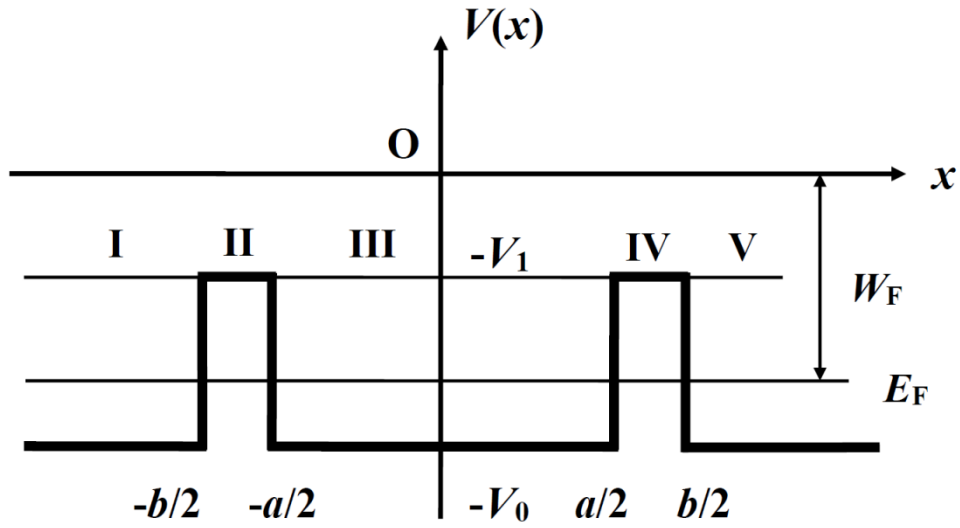


Fig.2-1 1次元の矩形井戸型ポテンシャル

電子を領域Ⅲに注入する状況を考え、各領域における波動関数を以下のように設定する．

$$\psi_I(x) = A\exp(-ikx) \quad (2-3)$$

$$\psi_{II}(x) = B\exp(qx) + C\exp(-qx) \quad (2-4)$$

$$\psi_{III}(x) = D\sin kx + F\cos kx \quad (2-5)$$

$$\psi_{IV}(x) = G\exp(qx) + H\exp(-qx) \quad (2-6)$$

$$\psi_V(x) = J\exp(ikx) \quad (2-7)$$

ここで, $k = \sqrt{(2m^*/\hbar^2)(E+V_0)}$, $q = \sqrt{-(2m^*/\hbar^2)(E+V_1)}$ である. 領域 I の波動関数は $x < 0$ の方向への進行波, 領域 V の波動関数は $x > 0$ の方向への進行波のみである. これは領域 III に注入された電子が領域 III で反射を繰り返し, 後に領域 III から I および V に抜け出る状況を表している. 4 個の境界において各波動関数ならびに導関数が連続に接続するための 8 個の境界条件式から固有値方程式

$$q \cos(ka/2) - k \sin(ka/2) = e^{-q(b-a)} \frac{q+ik}{q-ik} [q \cos(ka/2) + k \sin(ka/2)] \quad (2-8)$$

$$k \cos(ka/2) + q \sin(ka/2) = -e^{-q(b-a)} \frac{q+ik}{q-ik} [k \cos(ka/2) - q \sin(ka/2)] \quad (2-9)$$

が得られる. 式(2-8)は波動関数が $V(x)$ 軸に対して偶関数, 式(2-9)は奇関数の電子状態を与える. $b \rightarrow \infty$ の極限ではよく知られた無限幅の障壁に束縛された定常状態の固有値方程式を与える. 式(2-8), (2-9)に虚数単位 i が含まれているため, 波数の固有値と固有エネルギーは複素数となることがわかる. ここで, k および q を $k = k^{(r)} + ik^{(i)}$, $q = q^{(r)} + iq^{(i)}$ とし $k^2 + q^2 = (2m^*/\hbar)(V_0 - V_1)$ をもちいることで式(2-8), (2-9)を解くことができる. ここに上付き文字(r), (i)は実数部と虚数部を表す. 得られた固有値から固有エネルギー

$$E_n = (\hbar^2/2m^*)k_n^{(r)2} - V_0 = E_n^{(r)} - i\Gamma_n/2 \quad (2-10)$$

が得られる. ここに $E_n^{(r)} = [\hbar^2/(2m^*)](k_n^{(r)2} - k_n^{(i)2}) - V_0$, $\Gamma_n = -(2\hbar^2/m^*)k_n^{(r)}k_n^{(i)}$ である.

Γ_n は $E_n^{(r)}$ におけるエネルギー幅に相当し $k_n^{(r)} > 0$, $k_n^{(i)} < 0$ である.

領域 I での固有関数の規格化定数 $|A_n| = \sqrt{|k_n^{(i)}|}$ で与えられる[43]. この規格化定数より, 領域 III での固有関数の規格化定数

$$D_n = \frac{(q_n - ik_n)}{k_n \cos(k_n a/2) - q_n \sin(k_n a/2)} \exp[q_n (b-a)/2] \exp(ik_n b/2) A_n \quad (2-11)$$

$$F_n = \frac{(q_n - ik_n)}{q_n \cos(k_n a/2) + k_n \sin(k_n a/2)} \exp[q_n (b-a)/2] \exp(ik_n b/2) A_n \quad (2-12)$$

が得られる.

2.2.2 次元系準定常状態

2.1.で設定した凸型ポテンシャルを拡張し 2 次元ポテンシャルを

$$V(\boldsymbol{\rho}) = -V_0 + (V_0 - V_1)[\theta(|x| - a_x/2)\theta(b_x/2 - |x|) + \theta(|y| - a_y/2)\theta(b_y/2 - |y|)] \quad (2-13)$$

とする. ここで $\boldsymbol{\rho}$ は原点を矩形の中心に設定した位置ベクトル $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$, $\theta(x)$ は $\theta(x) > 0$ で $\theta(x) = 1$, $\theta(x) < 0$ で $\theta(x) = 0$ となる階段関数, 障壁幅は x -方向で $(b_x - a_x)/2$, y -方向で $(b_y - a_y)/2$ である. Fig.2-2 に対象とするポテンシャルの 3 次元概略図を示す.

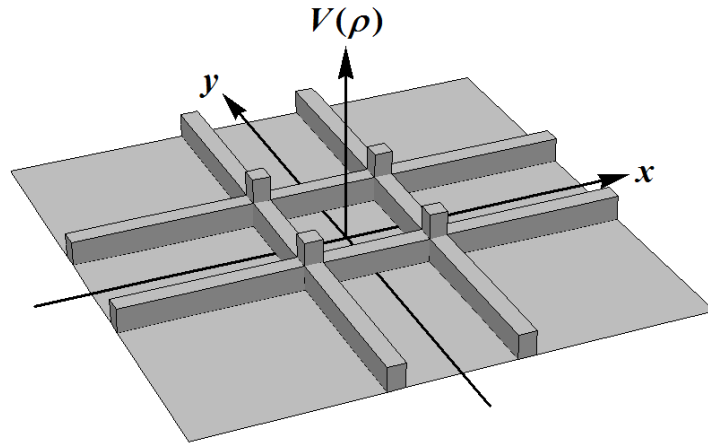


Fig.2-2 3 次元表示した矩形井戸型ポテンシャル

本 2 次元系の時間を含むシュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\boldsymbol{\rho}, t) = H\Psi(\boldsymbol{\rho}, t) \quad (2-14)$$

である． $\Psi(\boldsymbol{\rho}, t) = \Psi(\boldsymbol{\rho}) \exp(-iEt/\hbar)$ とすることで時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$H\Psi(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \Psi(\boldsymbol{\rho}) + V(\boldsymbol{\rho})\Psi(\boldsymbol{\rho}) = E\Psi(\boldsymbol{\rho}) \quad (2-15)$$

となる．この方程式を解くために変数分離法を用い $\Psi(\boldsymbol{\rho}) = \psi(x)\psi(y)$ とする． $\psi(x)$ は x 方向の波動関数， $\psi(y)$ は y 方向の波動関数である．1次元系準定常状態と同様に x 方向の波数の固有値

$$k_{nx} = k_{nx}^{(r)} + ik_{nx}^{(i)}, \quad q_{nx} = q_{nx}^{(r)} + iq_{nx}^{(i)} \text{ と } y \text{ 方向の固有値 } k_{my} = k_{my}^{(r)} + ik_{my}^{(i)}, \quad q_{my} = q_{my}^{(r)} + iq_{my}^{(i)} \text{ が得ら}$$

れる．ここで n または m が奇数のとき対称の固有関数，偶数のとき反対称の固有関数とする．これらの固有値から固有エネルギーは

$$E_{nm} = E_{nx} + E_{my} + V_0 = E_{nm}^{(r)} - i\Gamma_{nm}^{\text{QC}}/2 \quad (2-16)$$

となる．各エネルギー成分は $E_{nx} = (\hbar^2/2m^*)k_{nx}^2 - V_0$ ， $E_{my} = (\hbar^2/2m^*)k_{my}^2 - V_0$ となるので固有

エネルギー E_{nm} の実数部ならびに虚数部は

$$E_{nm}^{(r)} = (\hbar^2/2m^*)(k_{nx}^{(r)2} - k_{nx}^{(i)2} + k_{my}^{(r)2} - k_{my}^{(i)2}) - V_0 \quad (2-17)$$

$$\Gamma_{nm}^{\text{QC}} = -(2\hbar^2/m^*)(k_{nx}^{(r)}k_{nx}^{(i)} + k_{my}^{(r)}k_{my}^{(i)}) \quad (2-18)$$

で与えられる．位置依存性をもつ状態密度は局所所歌密度(Local Density of State : LDOS)とよばれ

$$D(\boldsymbol{\rho}, E) = \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 \frac{\Gamma_{nm}/2}{\pi[(E - E_{nm}^{(r)})^2 + (\Gamma_{nm}/2)^2]} \quad (2-19)$$

で定義される．ここで， Γ_{nm} は QC に付随する Γ_{nm}^{QC} と Γ_0 の和 $\Gamma_{nm} = \Gamma_{nm}^{\text{QC}} + \Gamma_0$ として与える． Γ_0 は電子-電子相互作用，バンド間遷移，バンド内遷移や電子-フォノン相互作用等から生ずるエネルギー幅を表す．ここで， $\Gamma_{nm} \rightarrow 0$ とした場合，LDOS は $D(\boldsymbol{\rho}, V) = \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 \delta(E - E_{nm}^{(r)})$ となる．エネルギーの基準点をフェルミエネルギーにとり， $E = E_F + eV$ とすると

$$D(\boldsymbol{\rho}, V) = \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 \frac{\Gamma_{nm}/2}{\pi[(E_F + eV - E_{nm}^{(r)})^2 + (\Gamma_{nm}/2)^2]} \quad (2-20)$$

となる．バイアス電圧に依存する STM 電流は

$$I_+(\boldsymbol{\rho}, z(\boldsymbol{\rho}), V) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} D(\boldsymbol{\rho}, E) [f_{\text{tip}}(E - eV) - f_{\text{sp}}(E)] T(E - E_F, V, z(\boldsymbol{\rho})) dE \quad (2-21)$$

で表される．ここに電流の添え字+は電子が STM 探針から試料に向かって流れる正のバイアス電圧を表す．また，添え字 tip と sp は，STM 探針および試料を意味する．関数 $f(E)$ はフェルミ分布関数

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F)/(k_B T)]} \quad (2-22)$$

であり， $T = 0\text{K}$ とすると $f(E) = \theta(E_F - E)$ のステップ関数となる． $T(E - E_F, V, z(\boldsymbol{\rho}))$ は探針と試料の間の電子の遷移確率である．WKB 近似の範囲内で，

$$T(E, V, z(\boldsymbol{\rho})) = \exp[-z(\boldsymbol{\rho}) \sqrt{(4m^*/\hbar^2)(W_{\text{sp}} + W_{\text{tip}} + eV - 2E)}] \quad (2-23)$$

となる． $z(\boldsymbol{\rho})$ は，STM 探針の水平位置 $\boldsymbol{\rho}$ における試料と探針の先端との垂直距離を表す．遷移確率 $T(E - E_F, V, z(\boldsymbol{\rho}))$ が $(E - E_F)$ および eV に依存しない低いバイアス電圧の場合 STM 電流の表式は

$$I_+(\boldsymbol{\rho}, z(\boldsymbol{\rho}), V) = K_0 \exp[-\alpha z(\boldsymbol{\rho})] \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 [S_{nm}(V) - S_{nm}(0)] \quad (2-24)$$

となる．ここに $\alpha = \sqrt{(4m^*/\hbar^2)(W_{sp} + W_{tip})}$ ， $S_{nm}(V) = \text{Arctan}[2(E_F + eV - E_{nm}^{(r)})/\Gamma_{nm}]$ であり， K_0 は定数である．定電流モード(Topographical mode)で STM 画像を観察する場合には， $z(\boldsymbol{\rho})$ は $\boldsymbol{\rho}$ と V の陽関数として以下のように表される．

$$z(\boldsymbol{\rho}, V) = \alpha^{-1} \{C_0 + \log_e \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 [S_{nm}(V) - S_{nm}(0)]\} \quad (2-25)$$

ここに， $C_0 = \log_e(I_0/K_0)$ は定数である．

電流の電圧微分 dI/dV は電流式(2-24)より

$$\begin{aligned} \frac{dI_+(\boldsymbol{\rho}, z(\boldsymbol{\rho}), V)}{dV} &= K_0 \exp[-\alpha z(\boldsymbol{\rho})] \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 \frac{\Gamma_{nm}/2}{[(E - E_{nm}^{(r)})^2 + (\Gamma_{nm}/2)^2]} \\ \frac{dI_+(\boldsymbol{\rho}, z(\boldsymbol{\rho}), V)}{dV} &= K_0 \exp[-\alpha z(\boldsymbol{\rho})] D(\boldsymbol{\rho}, V) \end{aligned} \quad (2-26)$$

となる．一定電流の条件下では電流を定数 I_0 とすると

$$\begin{aligned} I_0 &= K_0 \exp[-\alpha z(\boldsymbol{\rho})] \sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 [S_{nm}(V) - S_{nm}(0)] \\ K_0 \exp[-\alpha z(\boldsymbol{\rho})] &= \frac{I_0}{\sum_{nm} |\Psi_{nm}(\boldsymbol{\rho})|^2 [S_{nm}(V) - S_{nm}(0)]} \end{aligned} \quad (2-27)$$

となり,

$$\frac{dI_+(\rho, V)}{dV} = \frac{I_0}{\sum_{nm} |\Psi_{nm}(\rho)|^2 [S_{nm}(V) - S_{nm}(0)]} D(\rho, V) = I_0 F(\rho, V) D(\rho, V) \quad (2-28)$$

と書ける．ここに， $F(\rho, V) = \{\sum_{nm} |\Psi_{nm}(\rho)|^2 [S_{nm}(V) - S_{nm}(0)]\}^{-1}$ である．

2.3. STM の画像解析と STS

本節ではSTM画像の画像解析とSTSについて議論する．まず本手法の有効性を示すためにKliwer等[42]が行った実験との比較を行う．計算ではAg(111)表面上の仕事関数とタングステン探針の仕事関数を $W_{SP} = 4.74\text{eV}$, $W_{tip} = 4.55\text{eV}$ とした．また障壁幅をMn原子の直径とし，

$d = 2.74 \text{ \AA}$ とした[44]．有効質量は $m^* = 0.42m_e$ とした(m_e は真空中の電子質量)．QCのサイズは x 方向で $a_x = 90 \text{ \AA} - d$, $b_x = 90 \text{ \AA} + d$ となり， y 方向で $a_y = 100 \text{ \AA} - d$, $b_y = 100 \text{ \AA} + d$ となる．

Kliwer等の実験によって得られたSTM画像およびSTSを再現する値として $\Gamma_0 = 3\text{mV}$ とした．この系では高いエネルギー準位においても $\Gamma_{nm} \ll |E_{nm} + V_0|$ である．一般に定電流モードにおいてはSTM探針を試料表面上で走査するとき，STM電流を一定に保つためにSTM探針を上下させる．半導体の表面では，電子が表面電子の周囲に局在化しているため，トポグラフ画像は真空方向にとび出ている電子状態を反映する．Quantum Corral の場合，注目する電子系はShockley電子であり，貴金属表面で2次元電子系を形成している．したがって，電子密度分布は2次元表面上に限られ，半導体表面のように電子分布が表面垂直方向にとび出ているわけではない．Fig.2-3とFig.2-4にKliwer等が行った実験によって得られたそれぞれのバイアス電圧でのSTM画像を示す．バイアス電圧によってSTM画像が異なるのは寄与する電子状態が異なっているためである．

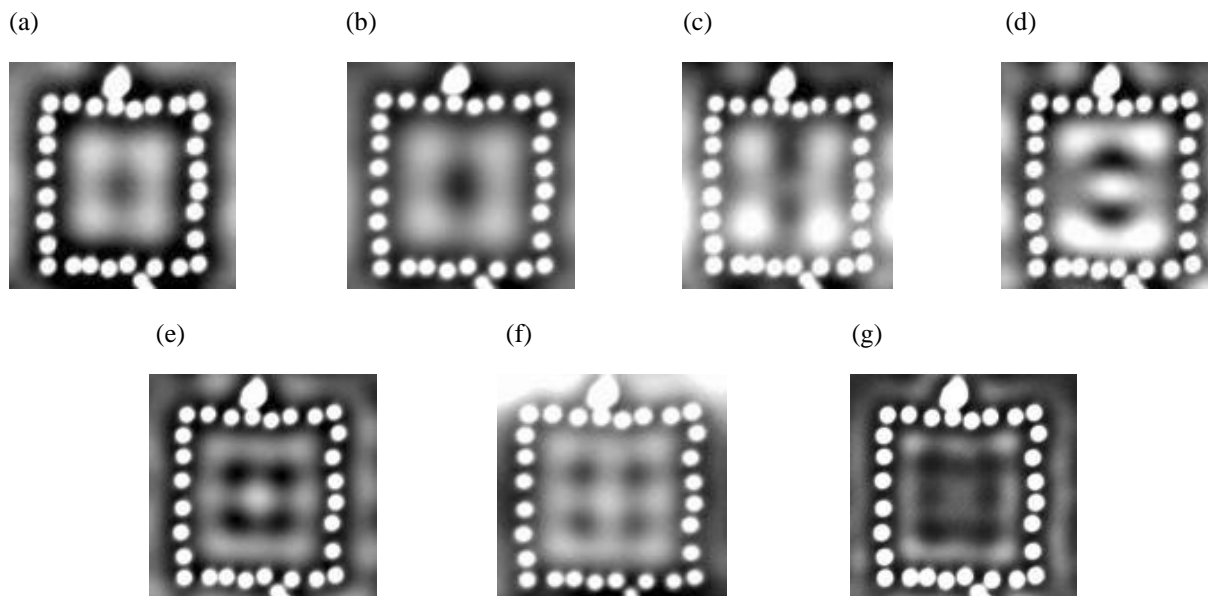


Fig.2-3 Kliewer 等による 7 個のバイアス電圧でのトポグラフ画像の実験結果 : (a) -50mV ,
(b) -30mV , (c) -10mV , (d) $+10\text{mV}$, (e) $+30\text{mV}$, (f) $+50\text{mV}$, (g) $+100\text{mV}$

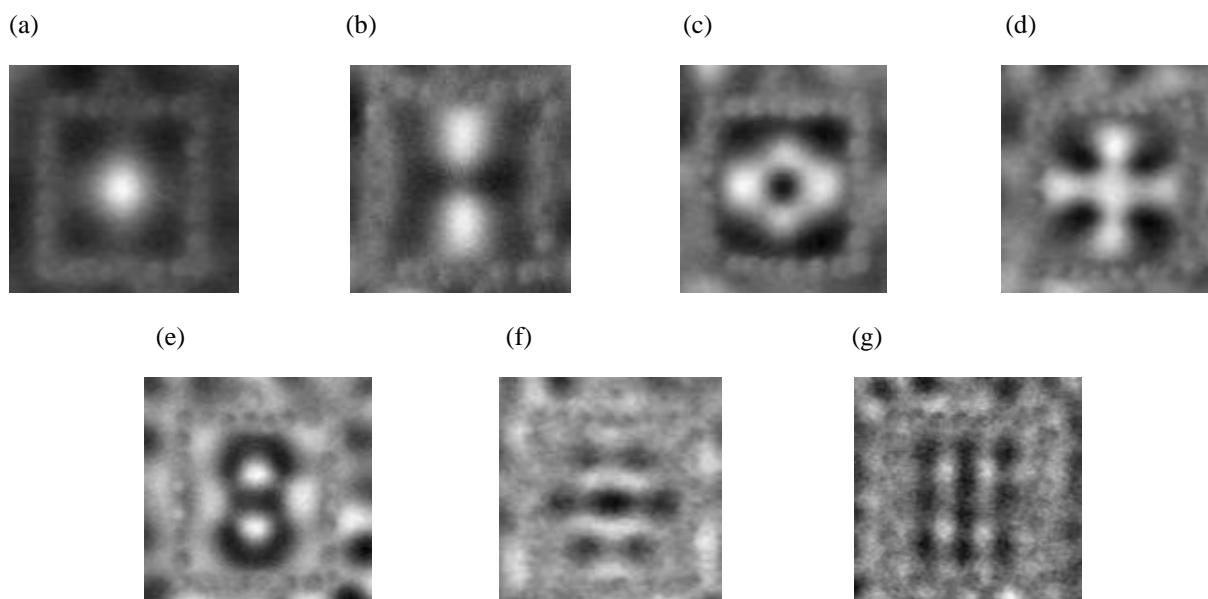


Fig.2-4 Kliewer 等による 7 個のバイアス電圧での dI/dV 画像の実験結果 : (a) -50mV ,
(b) -30mV , (c) -10mV , (d) $+10\text{mV}$, (e) $+30\text{mV}$, (f) $+50\text{mV}$, (g) $+100\text{mV}$

Fig.2-5～Fig.2-7 に本手法によって計算した画像を示す．トポグラフ画像は式(2-25)， dI/dV 画像は式(2-28)，LDOS 画像は式(2-20)を用いて計算を行った．この手法による理論画像は Kliewer らの

実験結果とよい一致が得られている．なお，Fig.2-6(b)の dI/dV 画像は Kliewer 等が行った理論計算結果より実験画像とよい一致を示している．

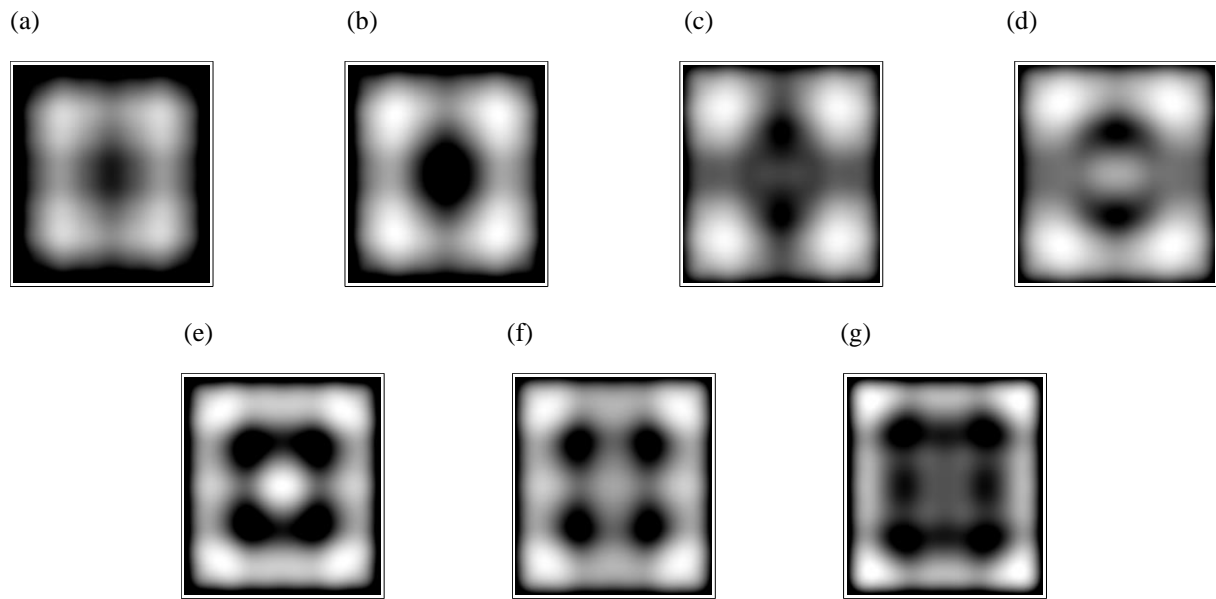


Fig.2-5 7 個のバイアス電圧で得られたトポグラフィの理論画像：(a) -50mV , (b) -30mV , (c) -10mV , (d) $+10\text{mV}$, (e) $+30\text{mV}$, (f) $+50\text{mV}$, (g) $+100\text{mV}$.

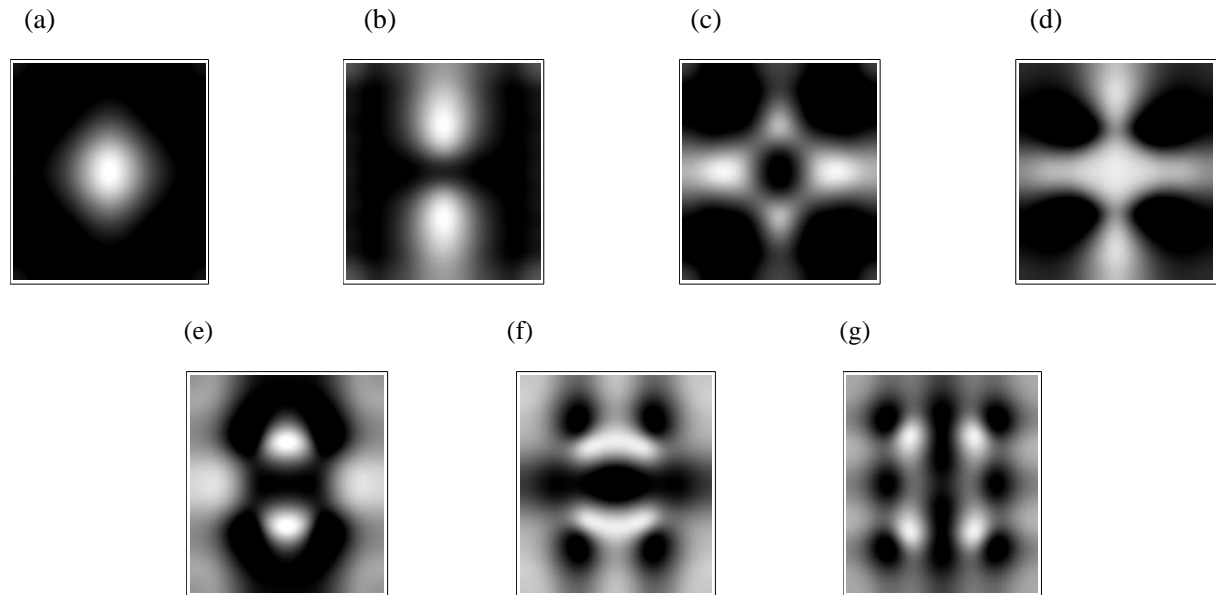


Fig.2-6 7 個のバイアス電圧で得られた dI/dV の理論画像：(a) -50mV , (b) -30mV , (c) -10mV , (d) $+10\text{mV}$, (e) $+30\text{mV}$, (f) $+50\text{mV}$, (g) $+100\text{mV}$.

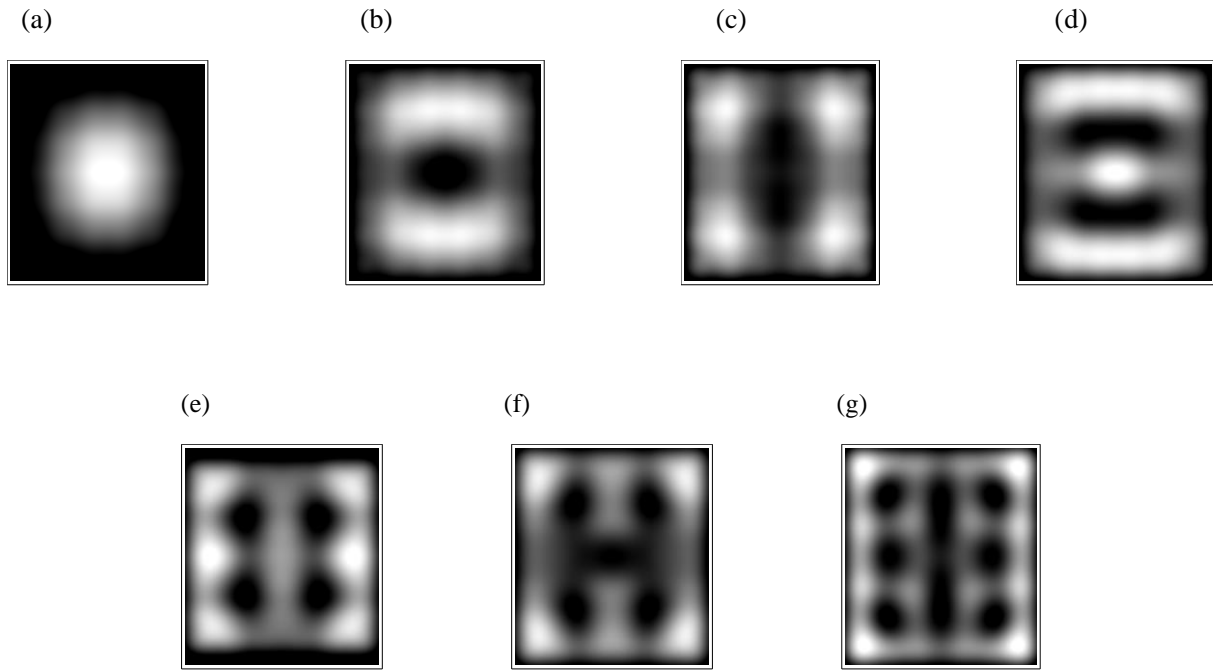


Fig.2-7 7 個のバイアス電圧で得られた LDOS の理論画像 : (a) -50mV , (b) -30mV , (c) -10mV , (d) $+10\text{mV}$, (e) $+30\text{mV}$, (f) $+50\text{mV}$, (g) $+100\text{mV}$.

Fig.2-8 に STS の実験結果と理論結果を示す．実験結果と理論結果はよく一致している． -20mV の位置の小さいピークは原点からずれたことによるものであり，反対称波動関数が寄与するためである．Fig.2-9 に STS の詳細な各電子状態の寄与を示す．それぞれの状態を加算することで STS のピークが形成されていることがわかる．

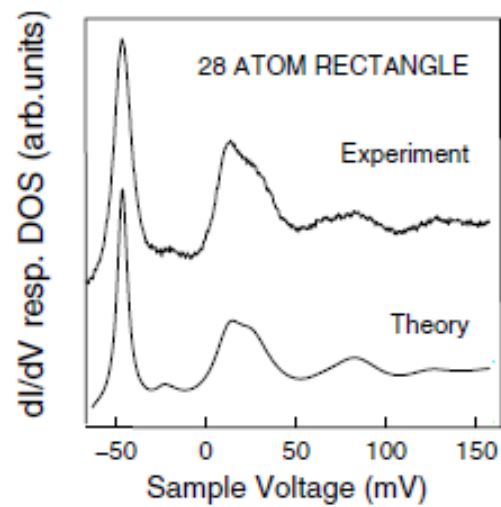


Fig.2-8 Kliewer 等の STS の実験結果と理論結果

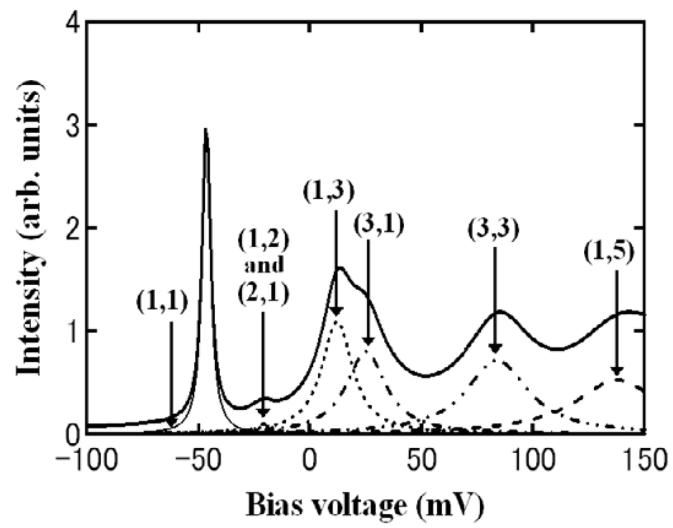


Fig.2-9 本研究の STS の理論結果

Kliwer 等の STM 実験画像と本計算 STM 画像のパターンが非常によく一致していることがわかる。また、STS もよく一致している。

3. STM 電流の量子輸送とフラクタル

3.1. 目的

本章では, 矩形 QC の量子化された STM 電流とステップ状の I - V 特性を明らかにする. さらに, QC に束縛された電子状態の量子化と STM 電流におけるバイアス電圧の変化に伴う電流画像などの系統的变化を明らかにする.

3.2. STM の I - V 特性と障壁幅

本節では QC サイズは x 方向で $a_x = 90 \text{ \AA}$, $b_x = 90 \text{ \AA} + 2pd$, y 方向で $a_y = 91 \text{ \AA}$, $b_y = 91 \text{ \AA} + 2pd$ とし, QC の内部領域のサイズが $90 \text{ \AA} \times 91 \text{ \AA}$ の矩形 QC を対象とする(p は整数). パラメータは 2.3.節と同じく Ag(111)表面上の仕事関数とタングステン探針の仕事関数を $W_{\text{sp}} = 4.74 \text{ eV}$, $W_{\text{tip}} = 4.55 \text{ eV}$ とした. また障壁幅を Mn 原子の直径とし, $d = 2.74 \text{ \AA}$ とした[44]. 有効質量は $m^* = 0.42m_e$ とした. Fig.3-1 から Fig.3-4 はそれぞれ障壁幅が $p=1, 2, 3, 4$ の QC に対する中心位置での I - V 特性(太線)を示し, 細い曲線は局所状態密度 LDOS を示す. ()内の数字は LDOS のピーク位置に対応する固有状態を示している. QC の中心位置では対称波動関数のみが STM 電流に寄与する. 固有エネルギーの昇順は近似的に $n^2 + m^2$ の総和から推定することができる. STM 電流は E_F から $E_F + eV$ の範囲で eV について LDOS を積分することによって得られる. 各ステップ位置は固有電圧 E_{nm}/e に対応している. 積分の終点が固有電圧 E_{nm}/e を超えると, STM 電流は次の固有電圧まで一定に保たれる. 各ステップの傾斜は LDOS の各ピーク幅の逆数に対応する. 薄い障壁の QC の場合 STM 電流がより厚い障壁の QC よりも大きいことに注目する必要がある. 薄い障壁では電子透過を容易にするため, 幅が広い LDOS の各ピークの傾向を反映している. 近くの広いピークとの重ね合わせにより STM 電流は増加する. 障壁の厚さが増えるにしたがって, LDOS のピークは分離され, I - V 特性のステップは直角状のステップになる. 2 つの電子状態が寄与するバイアス電圧で, STM 電流の増加量は Fig.3-3 と Fig.3-4 から明らかなように 2 倍である.

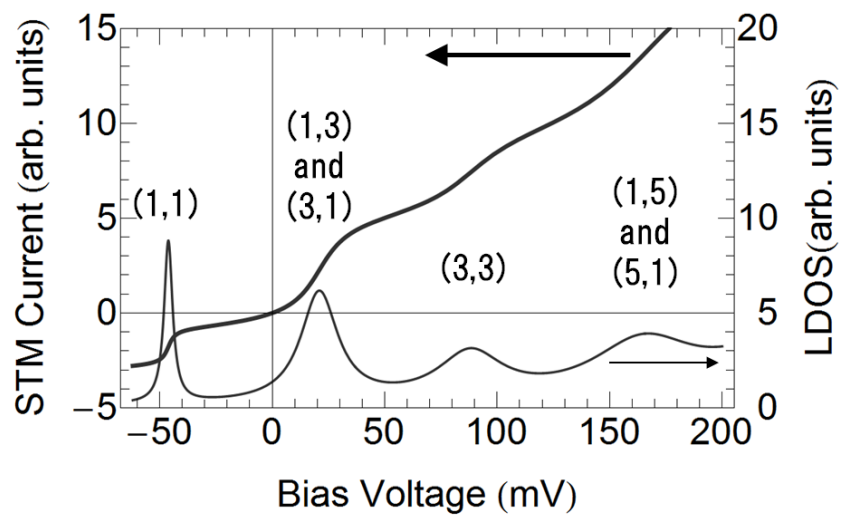


Fig.3-1 障壁幅 d である QC の中心位置での I - V 特性と LDOS. 各数字は固有状態を表す

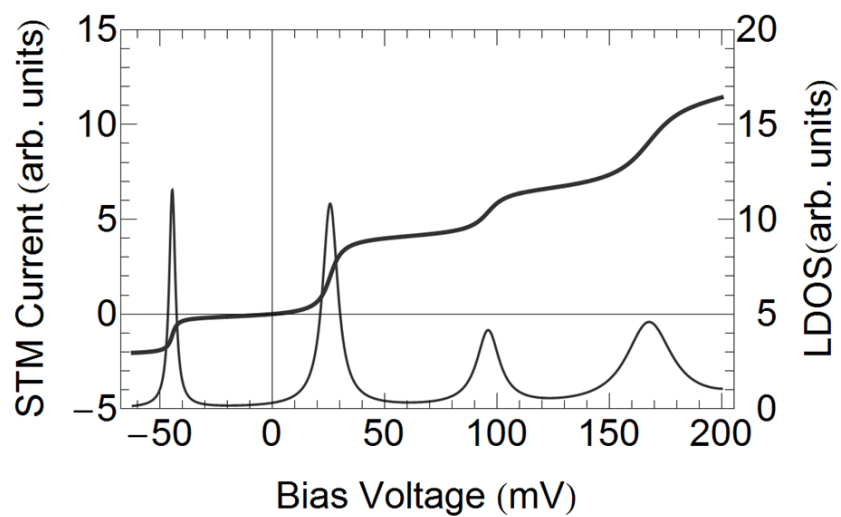


Fig.3-2 障壁幅 $2d$ である QC の中心位置での I - V 特性と LDOS

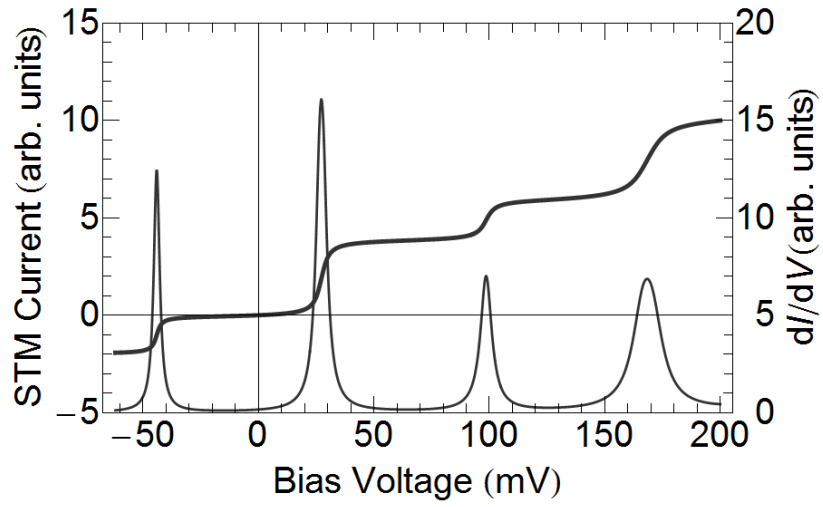


Fig.3-3 障壁幅 $3d$ である QC の中心位置での I - V 特性と LDOS

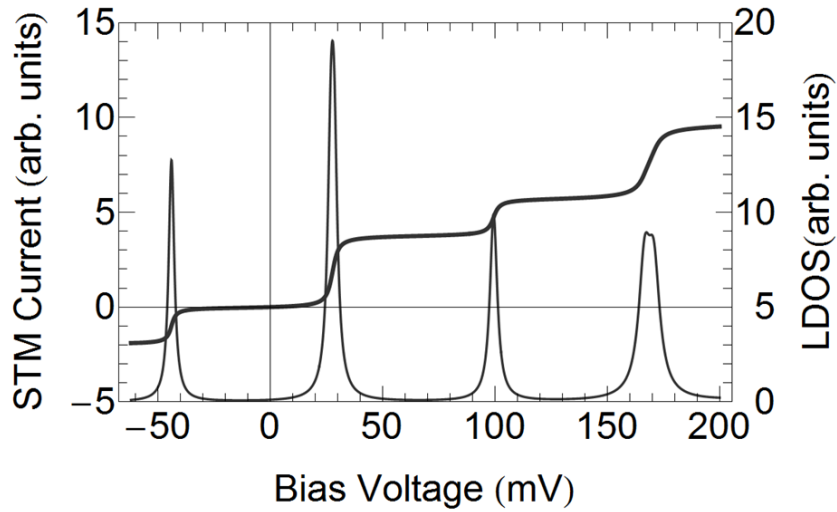


Fig.3-4 障壁幅 $4d$ である QC の中心位置での I - V 特性と LDOS

Table.3-1 と Table.3-2 に $90\text{\AA} \times 91\text{\AA}$ のサイズで障壁幅 $4d$ の QC の固有エネルギーとエネルギー幅を示す. 非対角要素の $E_{nm}^{(r)} - E_F$ は $E_{mn}^{(r)} - E_F$ とほぼ等しい. これは, 対象としている QC が正方形に近いことによる. Γ_{nm}^{QC} についても同様の傾向がある.

Table.3-1 固有エネルギー $E_{nm}^{(r)} - E_F$ (meV)

n	m				
	1	2	3	4	5
1	-44.0	-17.3	27.0	88.5	166.6
2	-16.7	10.0	54.2	115.7	193.9
3	28.4	55.1	99.4	160.9	239.0
4	91.1	117.8	162.1	223.6	301.7
5	170.8	197.5	241.7	303.2	381.3

Table.3-2 固有エネルギー Γ_{nm}^{QC} (meV)

n	m				
	1	2	3	4	5
1	0.03	0.14	0.48	1.34	3.29
2	0.14	0.25	0.59	1.46	3.40
3	0.50	0.61	0.95	1.82	3.76
4	1.41	1.52	1.86	2.72	4.67
5	3.47	3.57	3.92	4.78	6.73

3.3. I - V 特性の位置依存性

STM 電流画像は各バイアス電圧でのトポグラフ画像に似ている。これはトポグラフ画像が対数スケール上の STM 電流画像であるためである。Fig.3-5 は障壁幅 $4d$ の QC で 8 つのバイアス電圧で計算した STM 電流画像を示す。これらの画像はバイアス電圧に強く依存する。+27mV で漠然とした中心のスポットは+54mV で明るいものになる。この状況は Fig.3-4 で STM 電流が+30mV 近傍で増加し、+40mV から+90mV の範囲で飽和していることから説明することができる。多くの電子状態の中で対称波動関数の(1,3)と(3,1)状態が中心に明るいスポットをもたらす。

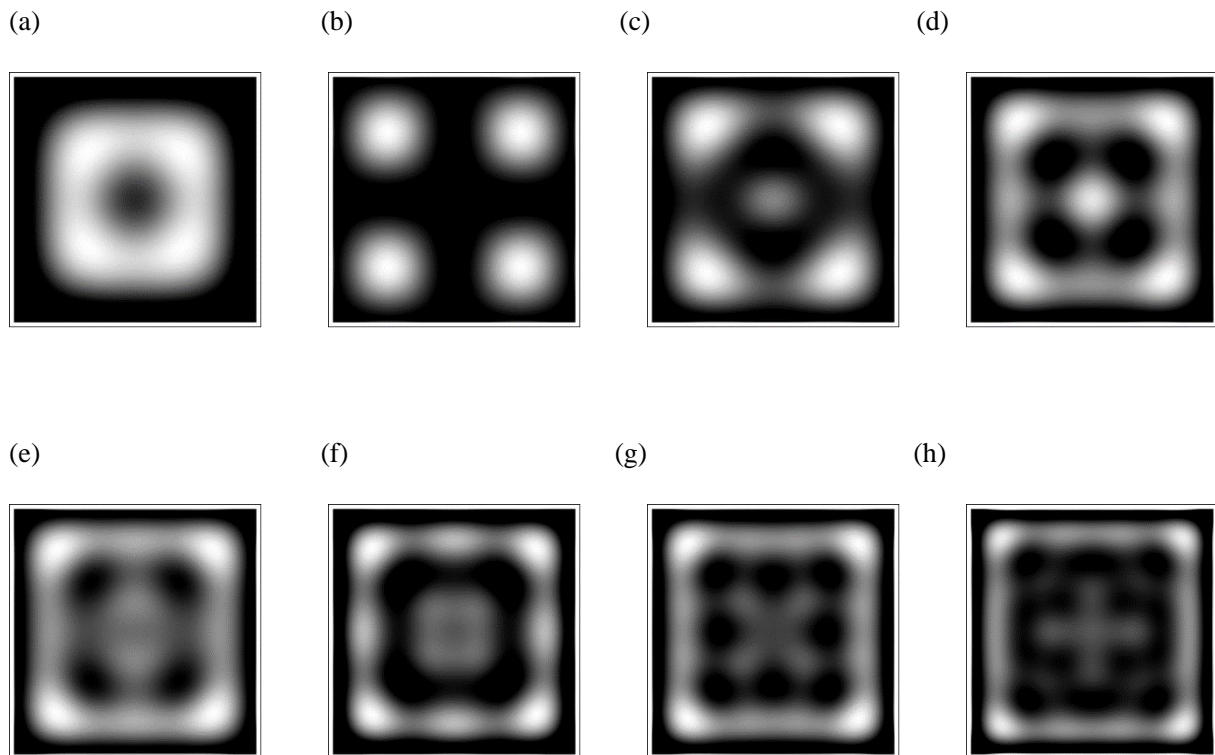


Fig.3-5 8 個のバイアス電圧時の STM 電流画像:(a)-45mV, (b)+10mV, (c)+27mV, (d)+54mV, (e)+90mV, (f)+100mV, (g)+120mV, (h)+194mV

+10mV と+27mV のときのコーナーの近くの 4 のスポットは(1,2)と(2,1)状態の両方から来ている.+120mV のときの文字”X”のようなパターンの出現理由は(1,4)と(4,1)状態に帰することができる.(1,4)状態の確率密度は x 軸上でゼロであり, x 軸に平行な 4 つのストライプを示す.(4,1)状態は y 軸上でゼロであり, y 軸に平行な 4 つのストライプを示す. したがって, (1,4)と(4,1)状態の組み合わせによって中央にパターン”X”をもたらす. Fig.3-6 に(1,4)と(4,1)状態の両方を除外した+120mV での STM 電流画像を示す. 明らかに中央のパターン”X”が消えている.

+194mV で記号”+”が中央に現れているが, これは(1,5)と(5,1)状態の両方からの寄与による.(1,5)状態の確率密度が x 軸に平行な 5 つのストライプを示し, (5,1)状態は y 軸に平行に 5 つのストライプを示すためである. Fig.3-7 に(1,)と(,1)状態の両方を除外した+194mV での STM 電流画像を示す. ここでは中央のパターン”+”が消えている.

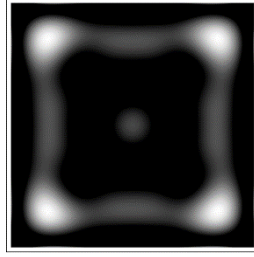


Fig.3-6 (1,4)と(4,1)状態の寄与を除いたバイアス電圧+120mV の STM 電流画像

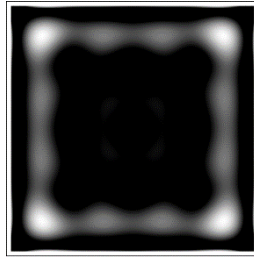


Fig.3-7 (1,)と(5,1)状態の寄与を除いたバイアス電圧+194mV の STM 電流画像

Fig.3-8 は $4d$ の障壁幅を持つ QC の中心位置で計算された I - V 特性を示す．中心位置では対称波動関数のみ STM 電流に寄与する．テラスは LDOS の隣接ピーク間の小さな LDOS 領域からきている．STM 電流の大きなステップは関連するバイアス電圧での LDOS の大きなピークから，また小さなステップは LDOS の小さなピークからきている．Fig.3-9 は x 軸上の位置 $(a_x/8, 0)$ で計算された STM 電流を示している．Fig.3-10 は中心位置からずれた斜め方向の位置 $(a_x/8, a_y/8)$ で計算された STM 電流画像を示している．細かなステップの系列は x および y 方向の両方の対称および反対称状態からの寄与を反映している．これらの結果は LDOS のピーク位置およびピーク形状の分布が STM 電流のバイアス電圧依存性から決定できることを示している．

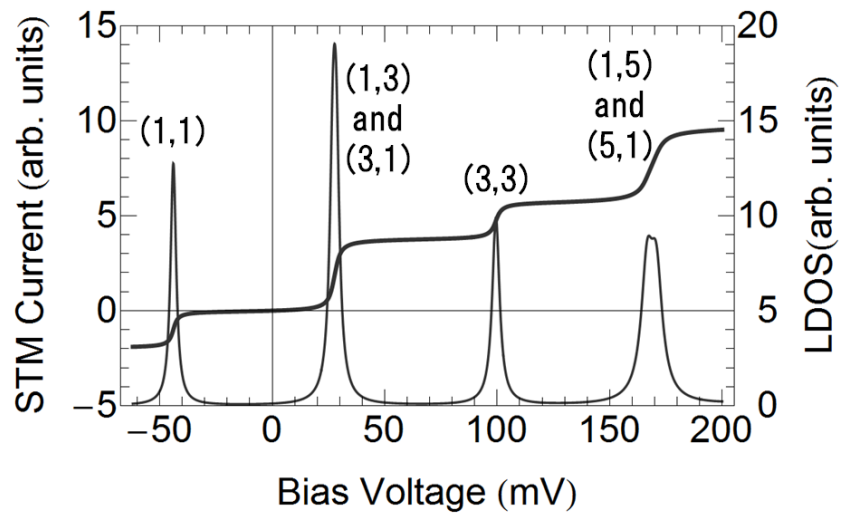


Fig.3-8 障壁幅 $4d$ の QC の(0,0)での I - V 特性と LDOS

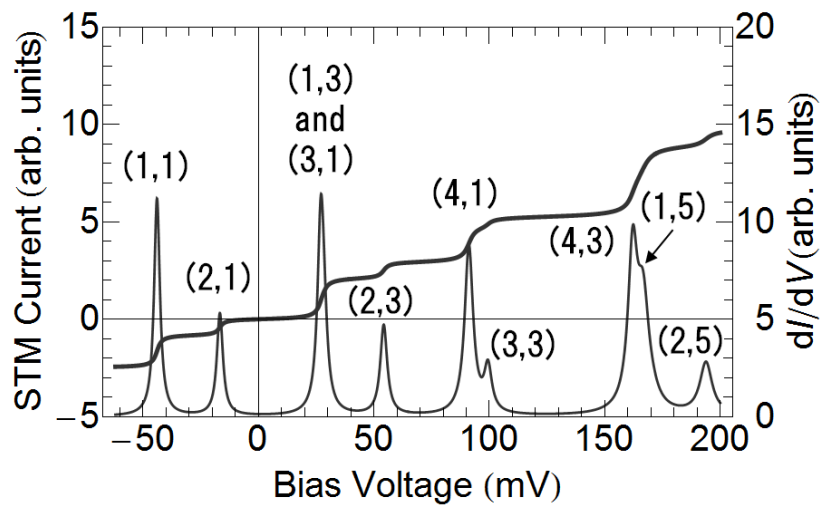


Fig.3-9 障壁幅 $4d$ の QC の $(a_x/8, 0)$ での I - V 特性と LDOS

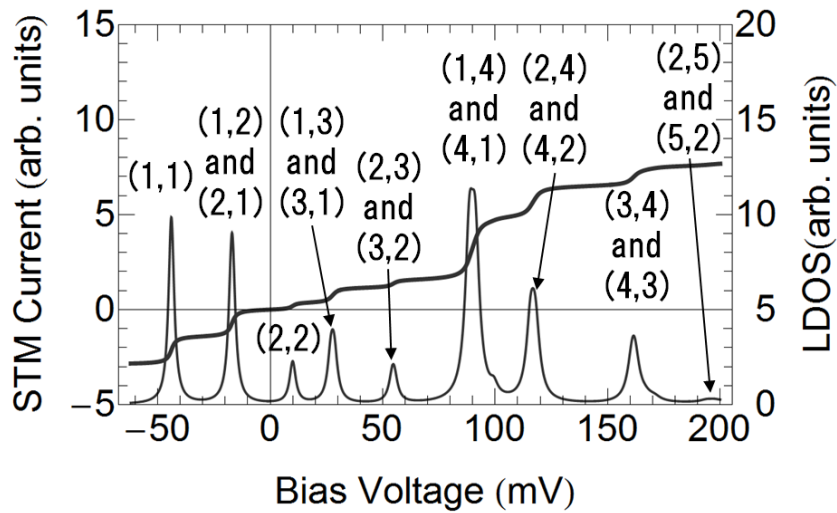


Fig.3-10 障壁幅 $4d$ の QC の $(a_x/8, a_y/8)$ での I - V 特性と LDOS

Fig.3-11 に LDOS 画像を示す. いくつかは圧縮されたパターンを示すことが注目される. -15mV での方形パターンは $+120\text{mV}$ で 4 つのブロックに分割される. 主に $(2,2)$ 状態で構成される $+10\text{mV}$ での 4 つのスポットは主に $(3,3)$ 状態で構成される $+100\text{mV}$ での 9 つのスポットになっている. $(1,1)$ 状態で構成される -45mV での 1 つのスポットだけでなく, スポットで構成される画像は (n,n) 状態からきている. また $+27\text{mV}$ でのパターンが $+194\text{mV}$ の 4 つのブロックに分割されていることがわかる. 高いバイアス電圧では, 多くの電子状態からの寄与があるためより複雑になっている.

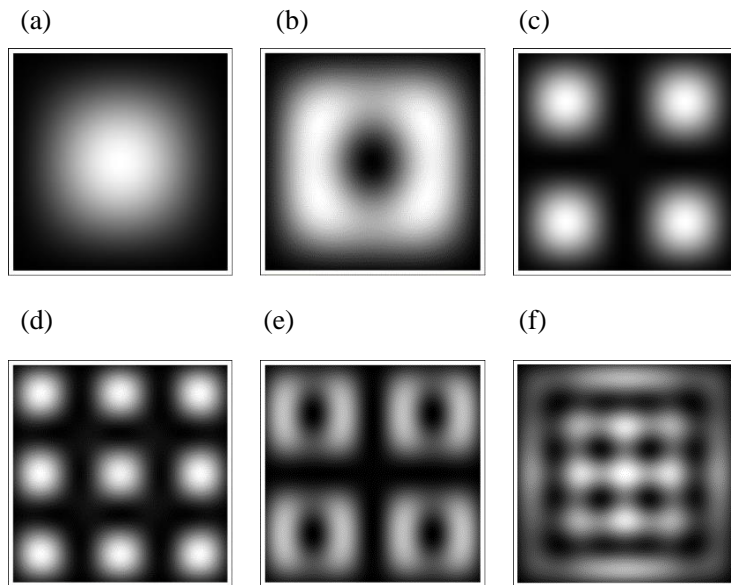


Fig.3-11 6 つのバイアス電圧時の LDOS 画像: (a) -45mV , (b) -15mV , (c) $+10\text{mV}$, (d) $+100\text{mV}$, (e) $+120\text{mV}$ and (f) $+168\text{mV}$.

これら以外のバイアス電圧での LDOS 画像において複雑かつ独特のパターンを示すものがある。Fig.3-12 にそれらを示す。QC の形状が矩形であるにもかかわらず、曲線状のパターンが生じている。

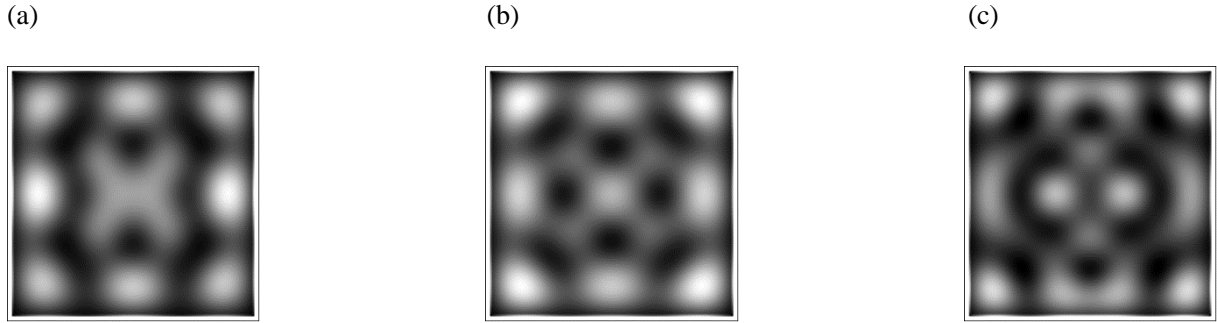


Fig.3-12 独特のパターンの LDOS 画像

3.4. STM 電流の QC サイズ依存性とフラクタル

障壁幅 $4d$ のときの I - V 特性ならびに LDOS の QC サイズ依存性を求める。サイズの増加に伴って、 I - V 特性の大きな段差が消え、STM 電流がバイアス電圧に対して線形依存性を示すと同時に LDOS のすべてのピークが低くなる。曲線の傾きを得るには、バイアス電圧に対する STM 電流の導関数を使用することが一見可能と思われるが誤った手法である。これは、直線に見える I - V 曲線が小さなステップの重ね合わせで構成されているためである。例えばゼロバイアス電圧近傍の導関数は無限小の微分係数を与える。本研究では平均 I - V 曲線の傾きを求めるために、バイアス電圧 0 から特定の値 V_{\max} までの範囲で積分し、 I - V 曲線下の面積を使用する。その面積が $\int_0^{V_{\max}} I(\rho, V) dV$ であり、底辺を V_{\max} とする直角三角形を設定することにより斜辺の傾きを以下のように定義する。

$$\frac{2}{V_{\max}^2} \int_0^{V_{\max}} I(\rho, V) dV \quad (3-1)$$

Fig.3-13 から Fig.3-15 に示した細い線は式(3-1)を用いて平均化した I - V 特性を示す。これらの直

線はほぼ同じである．特に Fig.3-14 においては I - V 曲線が直線を中心にしてわずかに波打っているだけである．また LDOS に関して，フラクタル性を持っている．Fig.3-13 の 4 つのピークが，Fig.3-14 のほぼ -60mV から +5mV の範囲に圧縮されている．同様に Fig.3-14 のすべてのピークの分布形状が，Fig.3-15 のほぼ -60mV から +5mV の範囲に圧縮されている．ステップの高さは QC に束縛された電子状態の量子化の度合いを表す．量子効果は QC サイズの減少にともなって強くなる．厳密に言えば，このフラクタル性は QC のサイズと障壁幅の両方を広げた場合に適応されるべきである．しかし本研究の結果はフラクタル性がほぼ同じ障壁幅の QC にも適用されることを示している．さらに，Fig.3-15 の LDOS のピークは全域にわたって散在し変調をともなっていることがわかる．

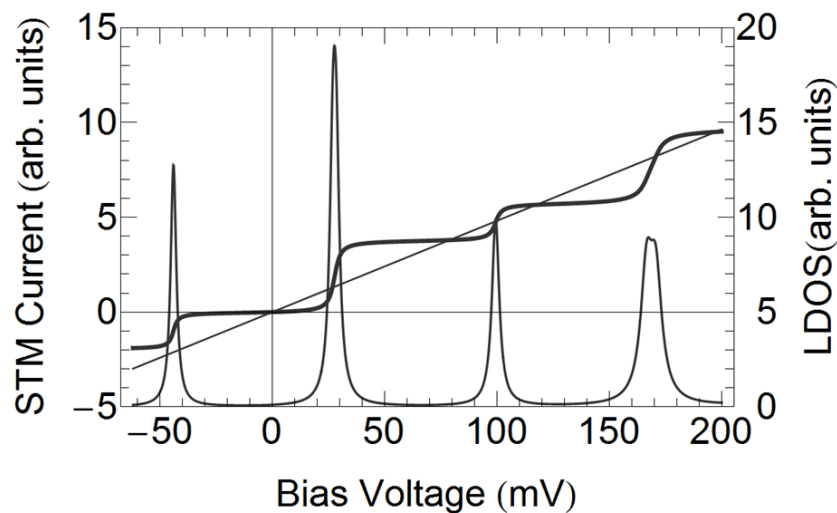


Fig.3-13 障壁幅 $4d$ かつ QC サイズ $90\text{\AA} \times 91\text{\AA}$ の中心位置での I - V 特性と LDOS

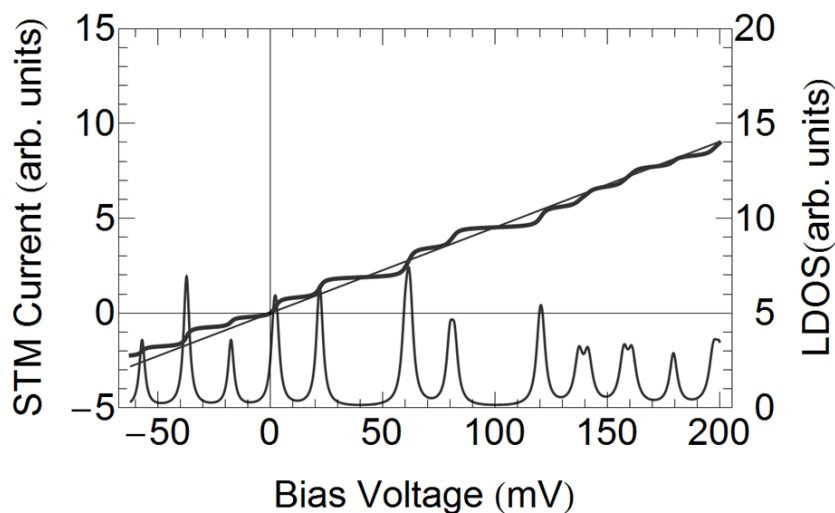


Fig.3-14 障壁幅 $4d$ かつ QC サイズ $180\text{\AA} \times 182\text{\AA}$ の中心位置での I - V 特性と LDOS

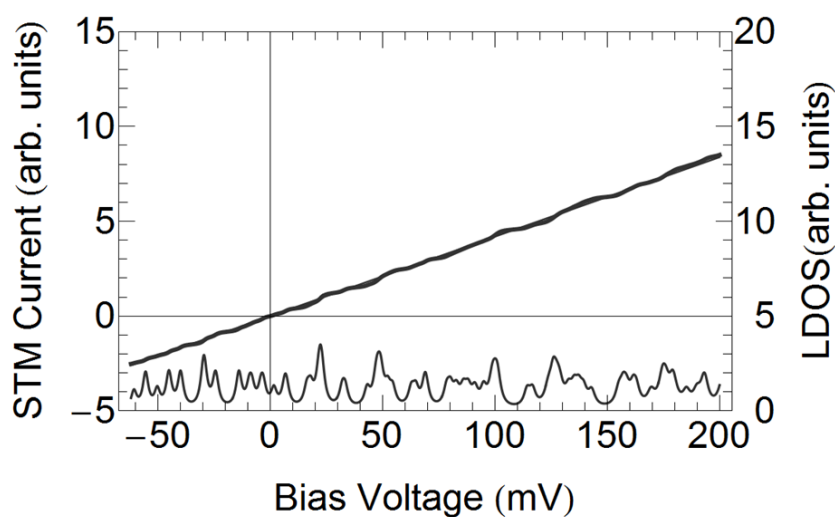


Fig.3-15 障壁幅 $4d$ かつ QC サイズ $360\text{\AA} \times 364\text{\AA}$ の中心位置での I - V 特性と LDOS

上記では LDOS にフラクタル性があることを示した．ここでは LDOS に焦点をあて，LDOS のフラクタル性の詳細を明らかにする．

Fig.3-14 のスケールを拡大したグラフと，Fig.3-13 とを比較するためにそれぞれを挿入したグラフを Fig.3-16 に示す． $90\text{\AA} \times 91\text{\AA}$ の QC の LDOS ピークは -50mV から $+200\text{mV}$ の範囲に現れ， $180\text{\AA} \times 182\text{\AA}$ の QC のピークは -62mV から $+10\text{mV}$ の範囲に現れる．両方のピークパターンが互いに対応する．

また, Fig.3-17 に Fig.3-15 のピークを拡大したグラフと Fig.3-14 を挿入したグラフを示す. 上述と同様に LDOS のフラクタル性を示す. $180\text{\AA}\times 182\text{\AA}$ の QC の LDOS ピークは -60mV から $+200\text{mV}$ の範囲で現れ, $360\text{\AA}\times 364\text{\AA}$ の QC の LDOS ピークは -62mV から $+7\text{mV}$ の範囲で現れ, 両方のピークパターンが互いに対応する.

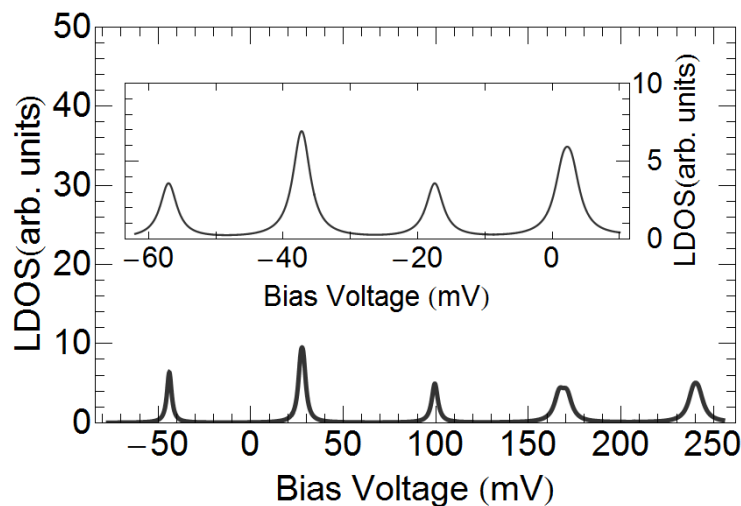


Fig.3-16 中心位置で測定した 2 つの QC の LDOS:太線は $90\text{\AA}\times 91\text{\AA}$, 挿入された細線は $180\text{\AA}\times 182\text{\AA}$

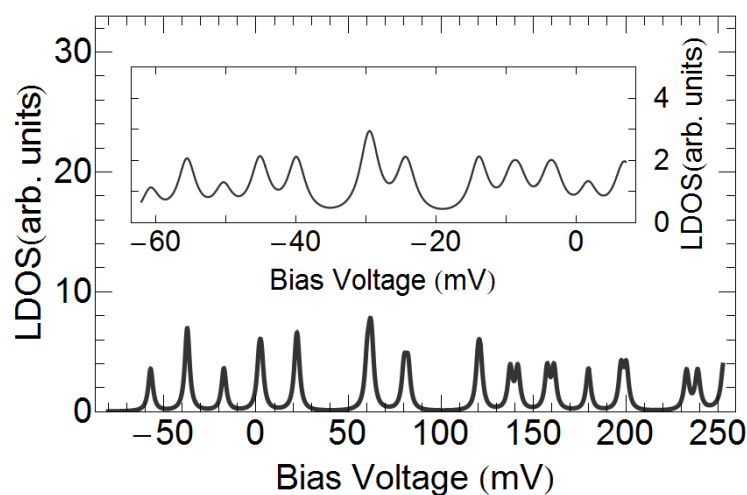


Fig.3-17 中心位置で測定した 2 つの QC の LDOS:太線は $180\text{\AA}\times 182\text{\AA}$, 挿入された細線は $360\text{\AA}\times 364\text{\AA}$

I - V 曲線についてもフラクタル性を満たしていることがわかる. 長方形の QC の両辺の長さを増

やすと，例えば 2 倍にすると固有エネルギーが元の QC の 4 分の 1 になり，各固有エネルギーの STM 電流も元の 4 分の 1 となる．Fig.3-18 には QC サイズを 2 倍に拡大したときの効果を矢印で示した．このスケーリング則が成り立つ理由は，無次元パラメータ $\xi = ka$ と $\eta = qa$ を導入することによって説明することができる． x 方向の固有状態 $\psi_{\text{III}n}(x)$ が対称波動関数のとき

$$\psi_{\text{III}n}(x) = \frac{(\eta_n - i\xi_n)}{(\eta_n \cos \xi_n / 2 + \xi_n \sin \xi_n / 2)} \exp[\eta_n (b_x / a_x - 1) / 2] \exp[i\xi_n b_x / (2a_x)] \cos[\xi_n (x / a_x)] A_n \quad (3-2)$$

となり，反対称波動関数のとき

$$\psi_{\text{III}n}(x) = \frac{(\eta_n - i\xi_n)}{(\xi_n \cos \xi_n / 2 - \eta_n \sin \xi_n / 2)} \exp[\eta_n (b_x / a_x - 1) / 2] \exp[i\xi_n b_x / (2a_x)] \sin[\xi_n (x / a_x)] A_n \quad (3-3)$$

となる．複素固有値の計算結果である ξ_n および η_n は， a_x と b_x にはほとんど依存しない． ξ_m ， η_m ，

a_y および b_y で表される固有関数 $\psi_{\text{III}m}(y)$ の y 成分に対しても同様である．式(2-24)の $|\Psi_{nm}(\rho)|^2$

に含まれる係数 A_{nx} ， A_{my} は，

$$|A_{xn}|^2 = |k_{xn}^{(i)}| = |\xi_{xn}^{(i)}| / a_x \quad (3-4)$$

$$|A_{ym}|^2 = |k_{ym}^{(i)}| = |\xi_{ym}^{(i)}| / a_y \quad (3-5)$$

となるので $|\Psi_{nm}(\rho)|^2$ から $1/(a_x a_y)$ を抽出することができ，QC サイズが増加すると STM 電流が QC の面積に逆比例して低下することになる．したがって両方の座標軸のスケールが同じ割合で減少すると考えることができる．このようにして STM 電流がフラクタル性に従うことがわかる．

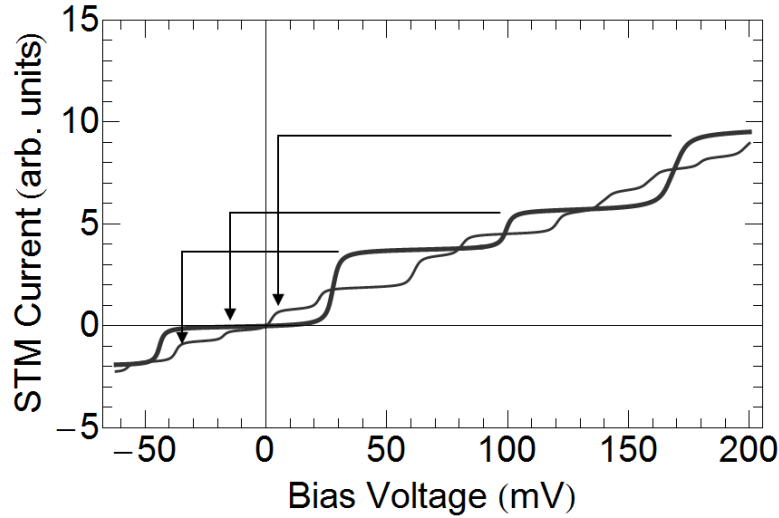


Fig.3-18 異なる QC の中心位置での I - V 特性; $90\text{\AA} \times 91\text{\AA}$ と $180\text{\AA} \times 182\text{\AA}$ のサイズ.

矢印は固有エネルギーの縮小とその後の STM 電流の縮小を示している.

Fig.3-19 は大きさ $720\text{\AA} \times 728\text{\AA}$ の非常に大きな QC の中心での I - V 特性および LDOS を示している. STM 電流は平均化した直線とほぼ同じである. LDOS 曲線は小さな変調を示している. また QC のサイズが非常に大きい場合であっても LDOS はゼロになることはない. この特性は本システムが示すフラクタル構造からくる. 横軸と縦軸の圧縮率が同じことによる. また一見 LDOS の変調がランダムに分布しているように見えるが, フラクタル構造を示している. Fig.3-20 に中心から外れた位置($a_x/10, a_y/5$)での dI/dV および STM 電流の計算結果を示す. Fig.3-19 と比較すると dI/dV の縦座標の数値 1.35 の付近を変動している. Fig.3-19 より変動が細かくなっていることは反対称電子状態からの寄与によるものである. したがって, 非常に大きい QC で LDOS が位置に関係なく一定値に収束することがわかる. -50mV から $+100\text{mV}$ までのバイアス電圧の範囲内で QC($720\text{\AA} \times 728\text{\AA}$ のサイズで障壁幅 $4d$)の I - V 特性と LDOS を算出した. これらの画像は非常に小さな変調を含むほぼ均一なコントラストを示す. これは非常に大きい QC の LDOS が位置依存性のない DOS(状態密度)になることを意味する. Fig.3-21 に異なる QC サイズの LDOS 画像を示した. Fig.3-21(a), (b)に $720\text{\AA} \times 728\text{\AA}$ の QC サイズ, (c), (d)に $90\text{\AA} \times 91\text{\AA}$ の QC サイズの LDOS 画像を示す. Fig.3-21(c), (d)と比較すると(a), (b)はほぼ一様な DOS を示している. この LDOS の収

束値は2次元電子ガス(2DEG)系のDOSに対応する．このDOSは

$$D_{2\text{DEG}}(E) = \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} \quad (3-6)$$

で定義され，エネルギー依存性がない定数である (Appendix.A 参照)．ここに， S は系の面積である．LDOS が定数に近づいていくため，その積分量である I - V 曲線は V に対して線形依存性をもつオーミックな電気伝導特性を示すことになる．

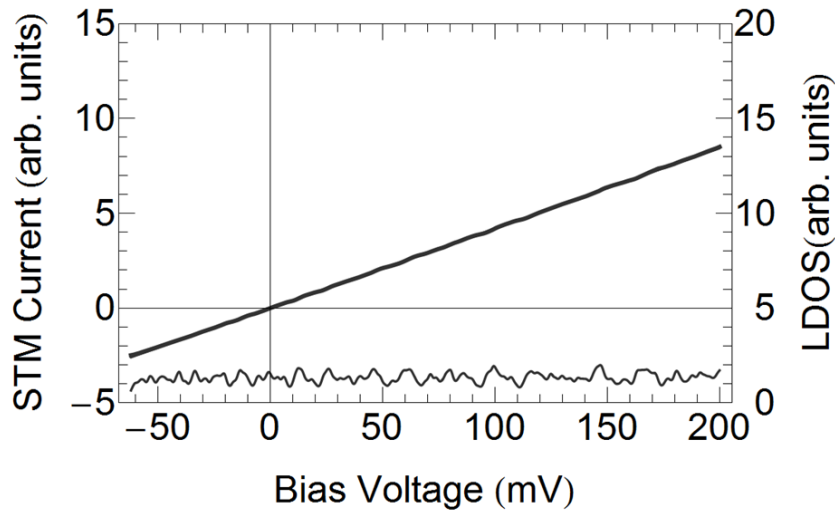


Fig.3-19 QC サイズ $720\text{\AA} \times 728\text{\AA}$ (障壁幅 $4d$) の中心位置での STM 電流および平均化された STM 電流ならびに LDOS

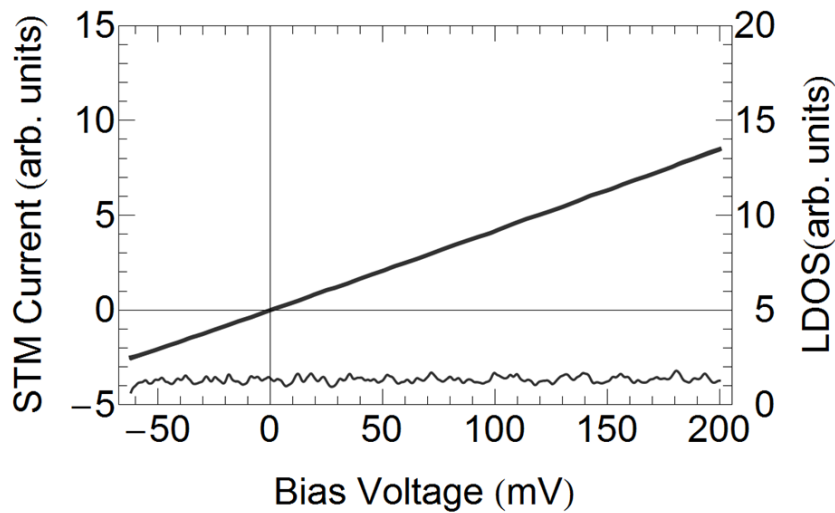


Fig.3-20 QC サイズ $720\text{\AA} \times 728\text{\AA}$ (障壁幅 $4d$) の中心以外の位置 ($a_x/10, a_y/5$) での STM 電流および平均化された STM 電流ならびに LDOS

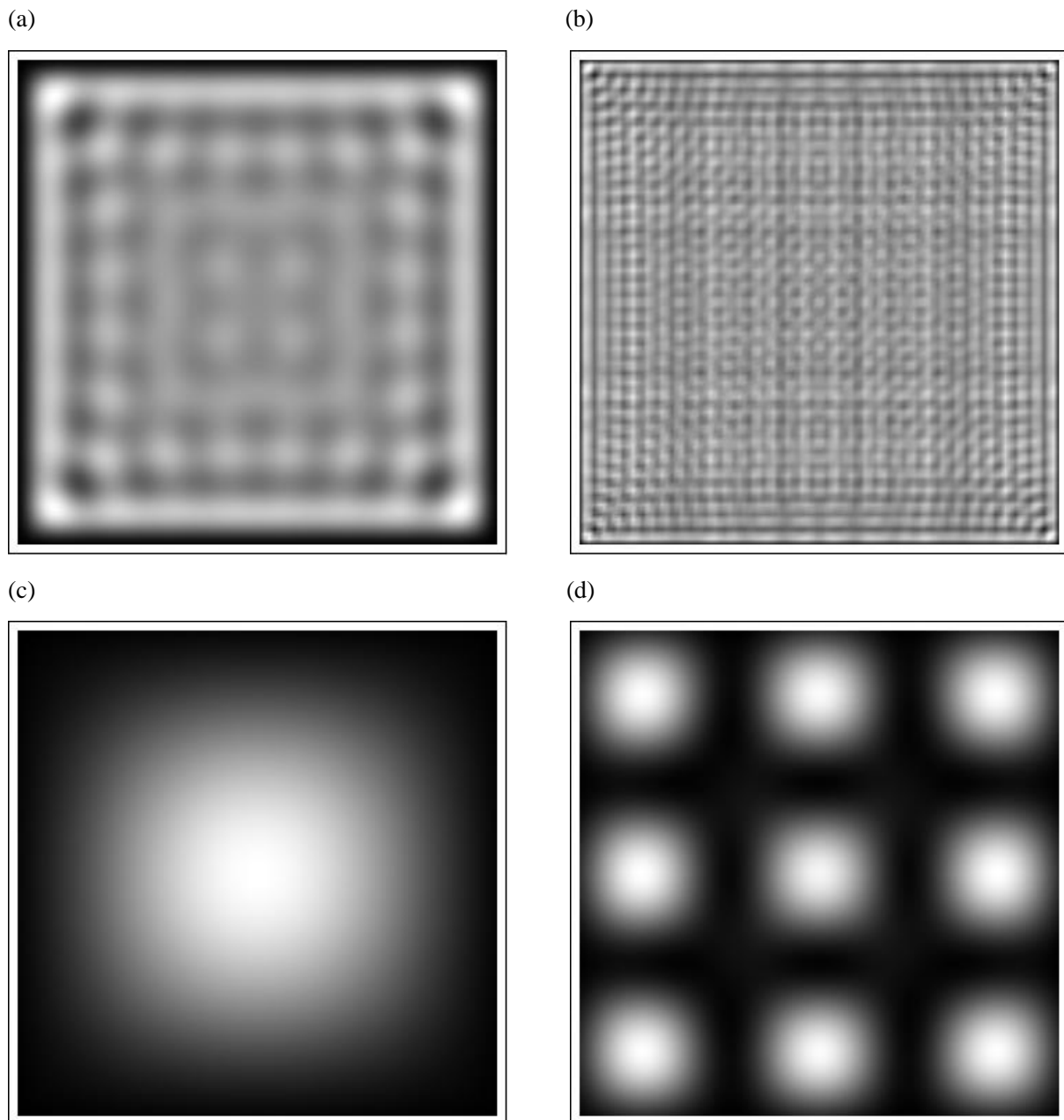


Fig.3-21 QC サイズ $720\text{\AA} \times 728\text{\AA}$ (障壁 4d) の LDOS 画像 : バイアス電圧 (a) -50mV, (b) +100mV

QC サイズ $90\text{\AA} \times 91\text{\AA}$ (障壁 4d) の LDOS 画像 : バイアス電圧 (c) -50mV, (d) +100mV

3.5. 結論

ほとんどのナノ構造は、貴金属と半導体界面の表面上に作成されており、それらのいくつかは小さな粒子を用いて構築されてきた。これらのナノ構造について電圧に対する電流と磁場に対する電気伝導度が測定されている。測定された I - V 特性および電気伝導度に表れるステップとテラスには量子化が見られる。これらと同じように、本 QC システムでは量子化された STM 像および

量子化された I - V 特性が見られた. STM 画像に関して LDOS 画像はフラクタル性を示すが, STM 電流画像はフラクタル性を示さないことがわかった. さらに, 非常に大きな QC に対する I - V 特性はオーミックな関係になり, LDOS は STM 電流の I - V 特性から 2DEG の DOS のように定数となることを明らかにした. この結果は本モデルの妥当性を示している.

4. 有限矩形井戸型ポテンシャルに束縛された粒子の不確定性関係

4.1. 目的

古典力学では粒子の運動量や位置などの正準量を完全な精度で同時に求めることができる。この意味で、古典力学は決定論的であると言われている。それらの物理量は初期状態を与えられると、いつでも確実に予測することができる。これと対照的に、量子力学における正準量は完全な精度で同時に決定することはできない。それらは確率論的に決定することができる。この意味で量子力学は非決定論的であると言われている。非決定論からくるこの正準変数間の不確定性の関係は、量子力学の様々な特徴の中で概念的な基盤の一つである。

Heisenberg[45]は、粒子の運動量と位置の間の不確定性関係を、思考実験に基づき、測定に付随するそれらの物理量の測定誤差と変化量について示した。対象となる粒子の位置を測定するとき位置の平均誤差を $\varepsilon(x)$ 、その測定による運動量の平均誤差を $\eta(p)$ とすると

$$\varepsilon(x)\eta(p) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4-1)$$

が成り立つとした。これは位置の測定精度を高めると、対象とする粒子の運動量が大きく変化し運動量の測定誤差が増大することを意味している。

これはフラウンホーファー回折の実験（下図参照）で確認することができる。図のように中央に円状スリットがある板を設置した系を考える。

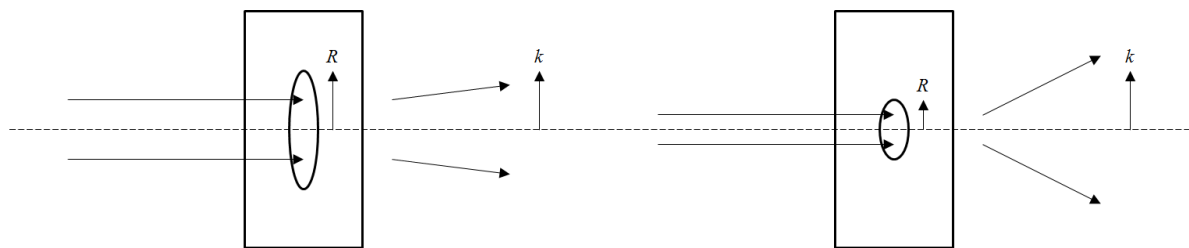


Fig.4-1 フラウンホーファー回折実験と不確定性関係

このとき、透過粒子がつくる回折画像の強度分布は

$$I(k) \propto |f(k)|^2 = \left| \iint_S \exp[i(k_x x + k_y y)] dx dy \right|^2 \quad (4-2)$$

である． S は積分領域が円形内部であることを意味する． $f(k)$ は円形穴のフーリエ変換であり，以下のように定義される．

$$f(k) = \iint_S \exp[i(k_x x + k_y y)] dx dy = \int_0^R \int_0^{2\pi} \exp(ikr \cos \theta) r dr d\theta \quad (4-3)$$

ここで積分公式

$$\frac{1}{2\pi i^n} \int_0^{2\pi} \exp(iz \cos \theta) \cos n\theta d\theta = J_n(z) \quad (4-4)$$

$$\int z^{\nu+1} J_\nu(\alpha z) = \frac{z^{\nu+1}}{\alpha} J_{\nu+1}(\alpha z) \quad (4-5)$$

を用いると，

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \exp(ikr) \cos \theta r dr d\theta = 2\pi \int_0^R J_0(kr) r dr = \frac{2\pi R}{k} J_1(kR) \quad (4-6)$$

である．ここに， $J_1(x)$ は 1 次ベッセル関数である．1 次ベッセル関数のゼロ点は $x=3.83171\dots$ である．これより， k と R の関係式は $R=3.83171/k$ が得られ，反比例していることがわかる．Fig.4-2 はそれぞれ $R=2.0, 0.5$ で計算した結果である．

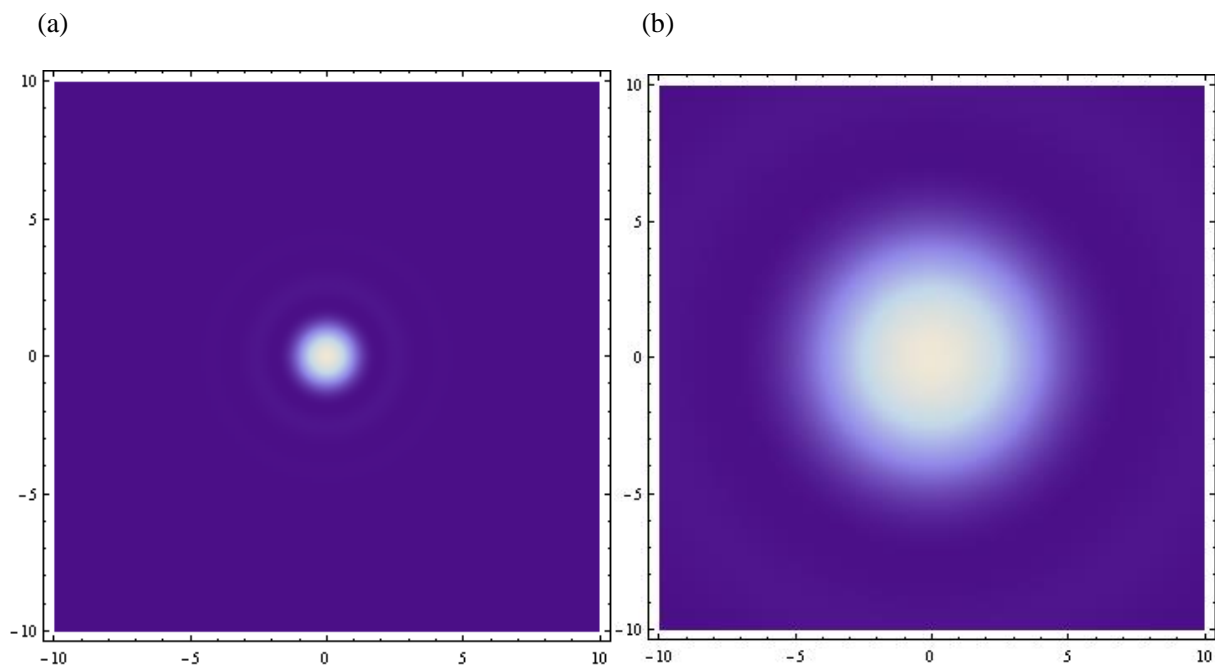


Fig.4-2 フラウンホーファー回折における強度分布 $I(k)$: (a) $R=2.0$ (b) $R=0.5$

以上から穴が大きい(位置の精度が低い)場合, 回折の角度(運動量の誤差)は小さく, 穴が小さい(位置の精度が高い)場合, 回折の角度(運動量の誤差)は大きい. このように板の穴の大きさが位置の精度に対応し, 回折の角度が運動量の誤差に対応している.

Heisenberg [45]の思考実験では測定にともなう誤差や物理量の揺らぎを対象としたが, Kennard [46], Robertson [47]ならびに Schrödinger [48]は, Schwarz 不等式を用いて, 一般化された不確定性関係を示した. 物理量 A , B の標準偏差を ΔA , ΔB とすると

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} [A, B] \quad (4-7)$$

で与えられることを明らかにした. ここに $[A, B]$ は交換関係 $[A, B] = AB - BA$ であり, 二乗標準偏差は

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (4-8)$$

で定義される．ここに $\langle A \rangle$ は物理量 A の期待値である．これは測定にともなう誤差とは関係なく，粒子自身が本質的に不確定性関係を持っていることを示している．

それ以来，一般化された不確定性関係について多くの研究が行われてきた．2003 年，Ozawa [49] は正準物理量の測定に関する外乱および誤差に由来する補正項を付加して以下の不確定性関係を導出した．

$$\varepsilon(A)\eta(B) + \varepsilon(A)\Delta B + \Delta A\eta(B) \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (4-9)$$

また，これらに加えて Shannon によって定義された情報理論のエントロピーを用いて，不確定性関係が議論されている．多くの研究者が，いくつかの種類のポテンシャル(無限障壁井戸型ポテンシャル，有限障壁井戸型ポテンシャル，調和振動子ポテンシャル)に閉じ込められた粒子の運動量と位置の不確定性関係を研究してきた．

前章で QC に束縛された電子状態にサイズ依存性があることが確認された．電子状態は運動量によって決定されているため，運動量にもサイズ依存性がある．本章では運動量および固有エネルギーのサイズ依存性ならびに電子の運動量および位置に関する不確定性関係のサイズ依存性を明らかにする．対象を定常状態に限定し，それぞれ無限障壁井戸型ポテンシャル，有限障壁井戸型ポテンシャル，調和振動子ポテンシャルに束縛された粒子の測定誤差と実験精度を含まない本質的な不確定性関係を明らかにする．

4.2. 運動量と位置の標準偏差

井戸型ポテンシャルならびに調和振動子ポテンシャルに閉じ込められ粒子の定常状態を求めるために多くの研究が行われている．ここでは井戸幅を a とする有限障壁高さ 1 次元井戸型ポテンシャルを以下のように定義する．

$$V(x) = -V_1\theta(-x - a/2) - V_0\theta(x + a/2)\theta(a/2 - x) - V_1\theta(x - a/2) \quad (4-10)$$

ここに $\theta(x)$ はステップ関数であり, $x \geq 0$ で $\theta(x) = 1$ それ以外では $\theta(x) = 0$ である. 以下に概略図を示す.

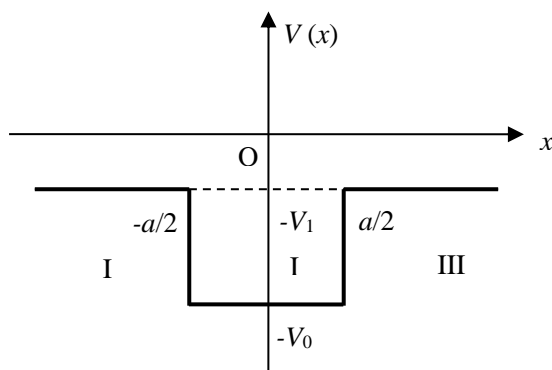


Fig.4-3 1次元有限障壁井戸型ポテンシャル

シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (4-11)$$

である. このポテンシャルに閉じ込められた電子状態はポテンシャルが左右対称であるため, 波動関数 $\Psi(x)$ は対称波動関数と反対称波動関数に分離される. 対称波動関数は

$$\Psi_s(x) = \psi_{\text{Is}}(x) \theta(-x - a/2) + \psi_{\text{IIs}}(x) \theta(x + a/2) \theta(a/2 - x) + \psi_{\text{IIIs}}(x) \theta(x - a/2) \quad (4-12)$$

となる. ここに,

$$\psi_{\text{Is}}(x) = \sqrt{\frac{2q}{qa+2}} \cos \frac{ka}{2} e^{q(x+a/2)} \quad (4-13)$$

$$\psi_{\text{IS}}(x) = \sqrt{\frac{2q}{qa+2}} \cos kx \quad (4-14)$$

$$\psi_{\text{IIS}}(x) = \sqrt{\frac{2q}{qa+2}} \cos \frac{ka}{2} e^{-q(x-a/2)} \quad (4-15)$$

である．反対称波動関数は

$$\Psi_{\text{A}}(x) = \psi_{\text{IA}}(x)\theta(-x-a/2) + \psi_{\text{IIA}}(x)\theta(x+a/2)\theta(a/2-x) + \psi_{\text{IIIA}}(x)\theta(x-a/2) \quad (4-16)$$

と書ける．ここに

$$\psi_{\text{IA}}(x) = -\sqrt{\frac{2q}{qa+2}} \sin \frac{ka}{2} e^{q(x+a/2)} \quad (4-17)$$

$$\psi_{\text{IIA}}(x) = \sqrt{\frac{2q}{qa+2}} \sin kx \quad (4-18)$$

$$\psi_{\text{IIIA}}(x) = \sqrt{\frac{2q}{qa+2}} \sin \frac{ka}{2} e^{-q(x-a/2)} \quad (4-19)$$

である．対称波動関数に対する固有値方程式は $k \sin(ka/2) - q \cos(ka/2) = 0$ ，反対称波動関数に対する固有値方程式は $k \cos(ka/2) + q \sin(ka/2) = 0$ となる． k および q の固有値はこれらとは独立した式 $k^2 + q^2 = (2m^*/\hbar^2)V_{\text{H}}$ を連立して得られる．ここで，有効質量 m^* を $m^* = m_{\text{e}}$ ， $V_{\text{H}} = V_0 - V_1$ とした．以下，固有値の量子数を整数 n とする．対称波動関数では n は偶数，反対称波動関数では n は奇数である．無限障壁井戸型ポテンシャルの固有関数は有限障壁井戸型ポテンシャルの固有関数の q を ∞ にすることで得られる．

Fig.4-4,4-5 に無次元運動量 ξ_n の井戸幅 a 依存性を示す．太い実線は有限障壁井戸型ポテンシ

ルの無次元運動量，破線は無限障壁井戸型ポテンシャルの無次元運動量を表している．いずれも無限障壁井戸型ポテンシャルの場合，無次元運動量は a 依存性がない一定値 $(n+1)\pi$ である．基底状態の ξ_0 は $a=0$ で 0 に収束し， $a \rightarrow \infty$ では π に収束する．励起状態 ξ_1 は $a=0$ で π に収束し， $a \rightarrow \infty$ では 2π に収束する．細い縦線は有限障壁井戸型ポテンシャルの各状態が存在できる領域幅の下限を示している．

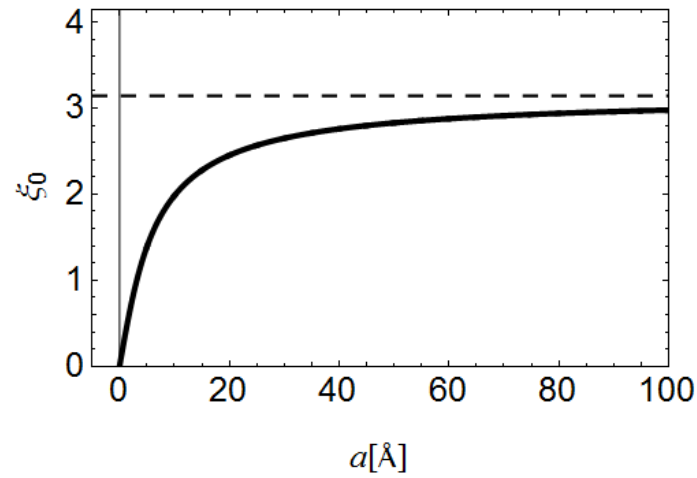


Fig.4-4 $V_H = 0.5\text{eV}$ における ξ_0 の a 依存性

細い縦線は $a=0\text{\AA}$ の基準線を示す．

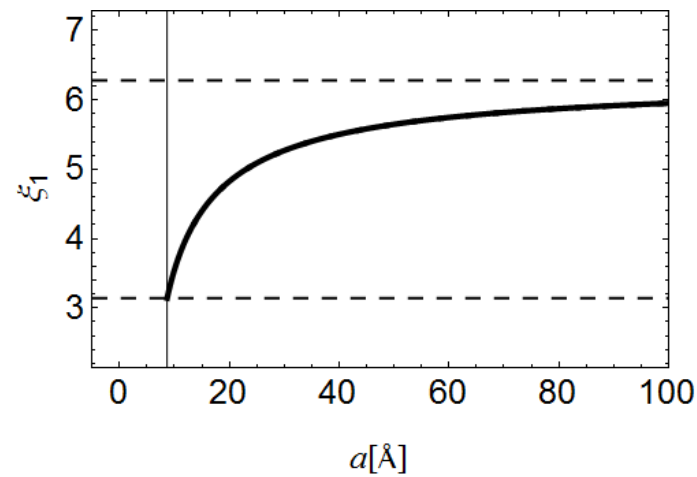


Fig.4-5 $V_H = 0.5\text{eV}$ における ξ_1 の a 依存性

細い縦線は $a = 8.6674\text{\AA}$ の基準線を示す．

領域幅の下限より小さい領域幅の場合，固有状態のエネルギー準位が障壁よりも高くなるため定常状態が存在しない．これに反し，無限障壁井戸型ポテンシャルにおいては存在できる領域幅の下限は存在しない．これは Fig.4-6 からわかる．太い実線は対称波動関数の $\eta = \xi \tan \frac{\xi}{2}$ ，細い実線は反対称波動関数 $\eta = \xi \cot \frac{\xi}{2}$ ，破線は $\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_H$ である．Fig.4-6 では $V_H = 0.5$ ， $a = 10$ としている．この実線と破線の交点座標 (ξ, η) が解である．破線は V_H を固定すると a によって比例するため，小さくすると交点は一つのみになる．さらに小さくしても必ず交点が存在するため，基底状態は常に存在する．

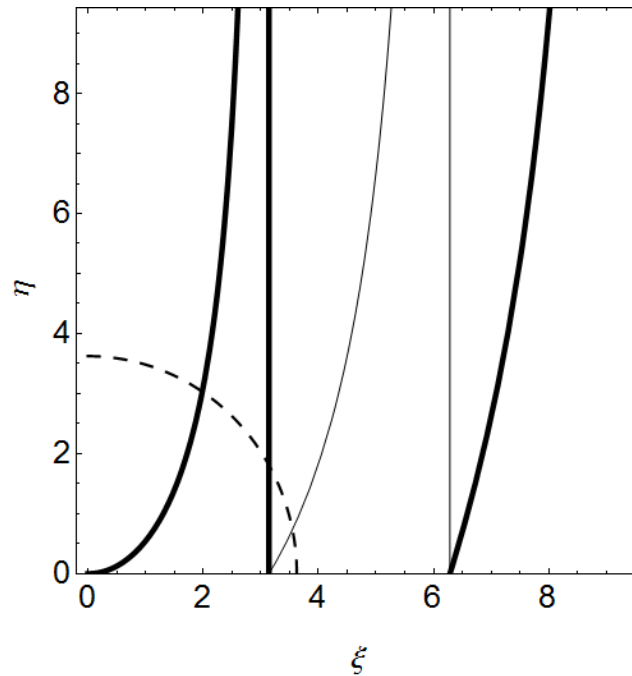


Fig.4-6 $V_H = 0.5 \text{ eV}$ ， $a = 10$ における ξ と η の関係性

Fig.4-7,4-8 に固有エネルギー E_n の井戸幅 a 依存性を示す．太い実線は有限障壁井戸型ポテンシャルの固有エネルギー，破線は無限障壁井戸型ポテンシャルの固有エネルギーを表している．無限障壁ポテンシャルの固有エネルギーは $a \rightarrow 0$ で ∞ に発散し， $a \rightarrow \infty$ では 0 に収束する．しかし，有限障壁ポテンシャルの固有エネルギーは $a \rightarrow 0$ で発散せず，各状態は 0.5 に収束する．これは

対称固有関数 $\xi^2 = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_H \cos^2 \frac{\xi}{2} = \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_H$ を用いて固有エネルギーの式に代入すると

$E = \frac{\hbar^2 \xi^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{2m}{\hbar^2} a^2 V_H = V_H$ である。これは基底状態の場合であるが、 ξ が $n\pi$ となるときの a を極限とした場合も同様である。このときの a は励起状態の下限の値と同じである。反対称固有関数でも同様である。したがって、 $a \rightarrow 0$ および励起状態における a の下限の有限値は $V_H = 0.5$ となる。励起状態では有限障壁井戸型ポテンシャルに a の下限があるが、無限障壁井戸型ポテンシャルでは下限は存在しない。

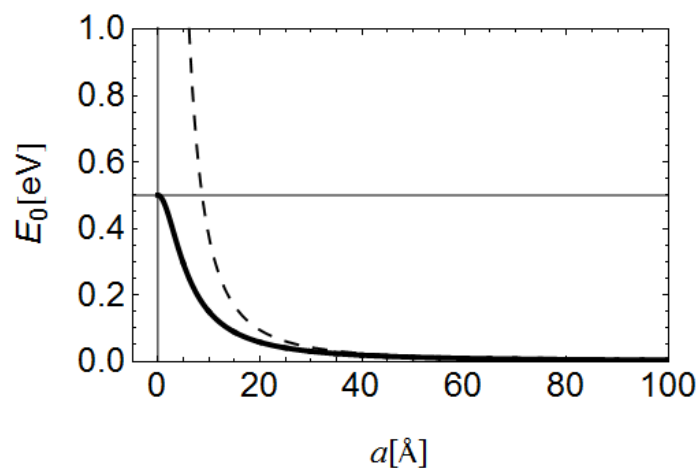


Fig.4-7 $V_H = 0.5\text{eV}$ における E_0 の a 依存性

細い縦線は $a = 0\text{\AA}$ の基準線を示す。

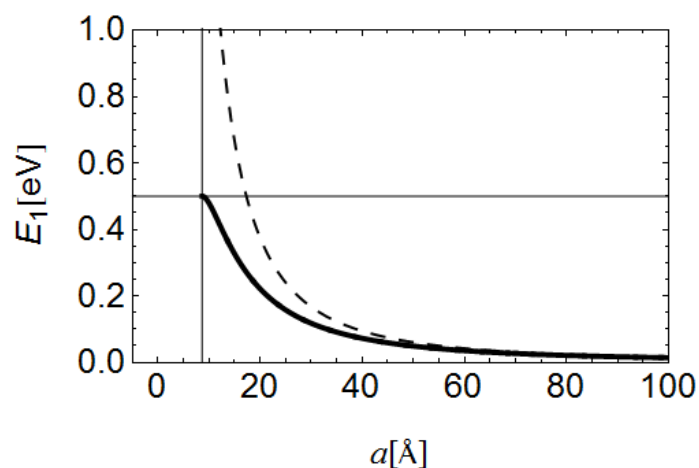


Fig.4-8 $V_H = 0.5\text{eV}$ における E_1 の a 依存性

細い縦線は $a = 8.6674\text{\AA}$ の基準線を示す。

対称波動関数の位置と運動量の二乗標準偏差はそれぞれ以下に示される期待値で定義される。

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_s(x) \frac{d^2}{dx^2} \Psi_s(x) dx \quad (4-20)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \Psi_s(x)^2 dx \quad (4-21)$$

位置と運動量の1次の期待値はそれぞれゼロ: $\langle x \rangle = 0$ および $\langle p \rangle = 0$ であるため、標準偏差は

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{\eta}{\eta+2}} \xi \quad (4-22)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = a \sqrt{\frac{[(\eta+2)^3 + 4]}{12\eta^2(\eta+2)} - \frac{1}{2\xi^2}} \quad (4-23)$$

となる。ここでは、無次元変数 $\xi = ka$ と $\eta = qa$ を用いた。 ξ および η の固有値は、対称波動関数については $\eta = \xi \tan(\xi/2)$ および $\xi^2 + \eta^2 = 2m^* V_H a^2 / \hbar^2 = \alpha^2$ から得られ、反対称波動関数については $\eta = -\xi \cot(\xi/2)$ および $\xi^2 + \eta^2 = 2m^* V_H a^2 / \hbar^2 = \alpha^2$ から求めることができる。なお Δp にはプランク定数が含まれているが、 Δx には含まれていない。以上のことから

$$\Delta p \cdot \Delta x = \hbar \xi \sqrt{\frac{\eta}{\eta+2}} \sqrt{\frac{[(\eta+2)^3 + 4]}{12\eta^2(\eta+2)} - \frac{1}{2\xi^2}} \quad (4-24)$$

が得られる。この表式は陽に井戸幅 a を含んでいない。 Δp 、 Δx 、 $\Delta p \cdot \Delta x$ の表式は対称波動関数と反対称波動関数の両方に共通なものである。

無限障壁井戸型ポテンシャルに対して、 $\Delta p_n^{\text{inf}} = \hbar \xi_n^{\text{inf}} / a$ および $\Delta x_n^{\text{inf}} = a \sqrt{1 - 6/\xi_n^2} / \sqrt{12}$ が

得られる． n は n 番目のエネルギー準位を表す．したがって

$$\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}} = \frac{\pi \hbar (n+1)}{2\sqrt{3}} \sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2 (n+1)^2}} \quad (4-25)$$

が得られる．ここに， $n = 0, 1, 2, \dots$ である．この表式には井戸幅 a が含まれていない． $V_H = 0.5\text{eV}$

のとき $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ は $\Delta p_0^{\text{inf}} \cdot \Delta x_0^{\text{inf}} = 0.5679\hbar \geq \hbar/2$ [50,51] , $\Delta p_1^{\text{inf}} \cdot \Delta x_1^{\text{inf}} = 1.6703\hbar$,

$\Delta p_2^{\text{inf}} \cdot \Delta x_2^{\text{inf}} = 2.6272\hbar$ となる．式(4-25)より n が無限に近づくと， $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ は n に比例するこ

とがわかる．したがって， $\Delta_{n+1,n} = \Delta p_{n+1}^{\text{inf}} \cdot \Delta x_{n+1}^{\text{inf}} - \Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ によって定義された増加量は

$\Delta_{10} = 1.1024\hbar$, $\Delta_{21} = 0.9569\hbar$, $\Delta_{32} = 0.9308\hbar$, $\Delta_{43} = 0.9210\hbar$ であり $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ の間隔は \hbar

にほぼ等しい． n が増加すると $\Delta_{\infty+1,\infty} = \pi\hbar/(2\sqrt{3}) = 0.9069\hbar$ を極限值として一定値に近づく．ま

た Δp_0 の存在範囲は限られている．Fig.4-9 の太線は $V_H = 0.5\text{eV}$ のときの $\Delta p_0/\hbar$ を a の関数と

して示している．ピーク位置は Δp の導関数がゼロ，すなわち

$$\frac{d}{da} \Delta p = \frac{\hbar^2}{a^3 \Delta p} \frac{\xi^2 [\xi^2 - \eta(\eta^2 + \eta - 2)]}{(\eta + 2)^3} = 0 \quad (4-26)$$

から得られ，ピーク位置は $a = 5.8301 \text{ \AA}$ である． a がゼロへに近づくと， Δp_0 はゼロに収束す

る．このとき波動関数は非常に小さい領域に圧縮されるように見えるが，波動関数の q がゼロに

近づくので，領域 II および III において指数関数的に広がっている．これは運動量偏差が小さくな

ることを意味している． a がピーク位置よりも充分大きい場合， Δp は式 (4-22) より $\Delta p_0 = \pi\hbar/a$

と近似することができる． a が無限に近づくにつれて， Δp_0 はゼロに収束し，運動量はよく定義さ

れた物理量となる．

Fig.4-9 の破線は無限障壁井戸型ポテンシャルに対する $\Delta p_0^{\text{inf}}/\hbar = \pi/a$ を表す．上記の有限障壁井戸型ポテンシャルとは異なり，破線は a がゼロに近づくにつれて無限に発散する． a が無限大に近づくとき， Δp_0 は Δp_0^{inf} に収束する．励起状態の Δp_n の a 依存性は Δp_0 と同様のプロファイルを示す． n が大きくなるにつれ， Δp_n のピーク位置は右にシフトする．Fig.4-10 は Δp_1 の a 依存性を示す． Δp_0 と比較すると，ピーク位置は右にシフトし，ピーク値は増加する．Majerník と Majerníková[52]は励起状態の Δp_n の計算結果を示していない．

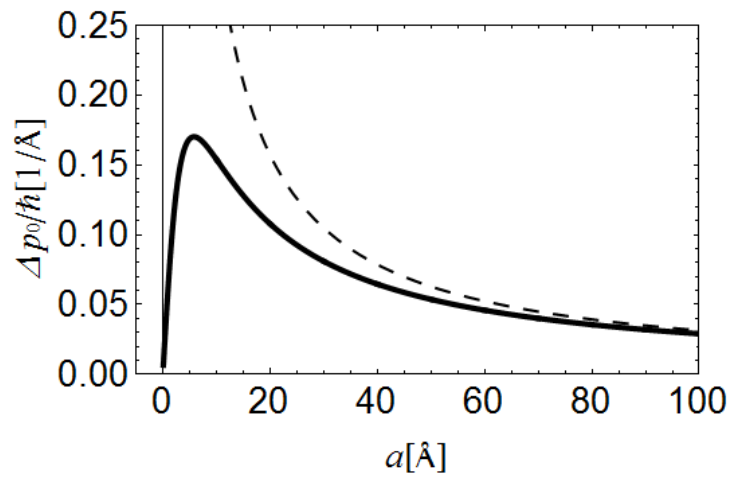


Fig.4-9 $V_H = 0.5\text{eV}$ における Δp_0 の a 依存性

細い縦線は $a = 0\text{\AA}$ の基準線を示す．

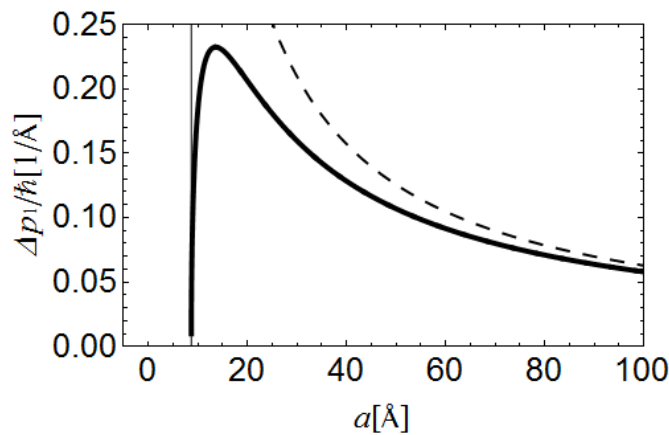


Fig.4-10 $V_H = 0.5\text{eV}$ における Δp_1 の a 依存性

細い縦線は $a = 8.6674\text{\AA}$ の基準線を示す．

Fig.4-11 は $V_H = 0.5\text{eV}$ における Δx_0 の a 依存性を示す． Δp_0 とは対照的に， Δx_0 にはディップが存在する． Δx の導関数がゼロになる

$$\frac{d}{da} \Delta x = \frac{a}{2\Delta x} \left\{ \frac{(\eta+2)^3 - 2}{6\eta(\eta+2)^2} - \frac{\eta}{\xi^2(\eta+2)} - \frac{\xi^2[(\eta+2)^3 + 3(\eta+2) - 2]}{3\eta^3(\eta+2)^3} \right\} = 0 \quad (4-27)$$

から，ディップの位置 $a = 7.042\text{\AA}$ が得られる．ディップ位置よりも小さい領域では， a が減少するにつれて Δx_0 は無限に発散する．これは波動関数の q が減少するにつれ，波動関数が井戸の外側の領域に広がるからである．また a がゼロの極限と無限の極限で， Δx_0 は発散することを示している．なお，小さい a の領域では， $\Delta x_0 > a$ である． a がディップ位置よりも大きいとき， Δx は a の増加にともなって直線的に増加する．このとき， Δx は直線 $\Delta x_0 = 0.1808a$ [\AA] に収束し， $\Delta x_0 < a$ となる． Δx_0 の実線は破線の位置よりも高く，破線とは決して一致しない．

ここで Δx_0 の漸近形を導出するために，基底状態の超越方程式 $\cos(\xi_0/2) = \xi_0/\alpha$ を解くための摂動論を提案する．詳細については，Appendix B に示す． a が十分大きい場合の固有値 ξ_0 の a^{-1} の二次の摂動項までを考慮すると，

$$\Delta x_0 = \frac{\sqrt{\pi^2 - 6}}{2\sqrt{3}\pi} \left(a + \frac{2}{K} \right) \quad (4-28)$$

が得られる．ここに， $K = \sqrt{2mV_H/\hbar^2}$ である．

Fig.4-11 に Δx_0 の a 依存性を示す．ポテンシャル障壁 V_H が高くなると，Fig.4-11 の太線は破線に近づく．また V_H が減少するにつれてギャップが開く．Majerník と Majerníková[52]によって与えら

れた Δx_0 は, a と V_H の微小領域に限られており, 大きな領域の a に対する状況は示されていない.

Fig.4-12 に第一励起状態の Δx_1 の a 依存性を示す. Fig.4-11 と比較すると, ディップ位置は右にシフトし, 破線の傾きは Fig.4-11 の傾きよりも大きくなっている. Majerník と Majerníková[52]は励起状態の Δx_n を求めている.

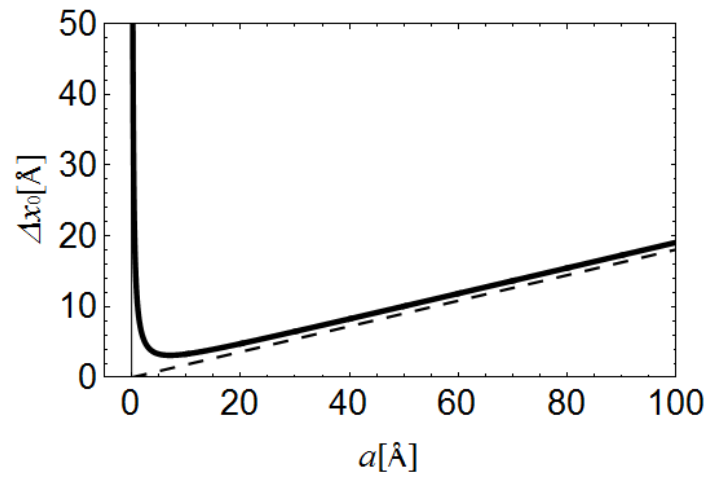


Fig.4-11 $V_H = 0.5\text{eV}$ における Δx_0 の a 依存性

細い縦線は $a = 0\text{\AA}$ の基準線を示す

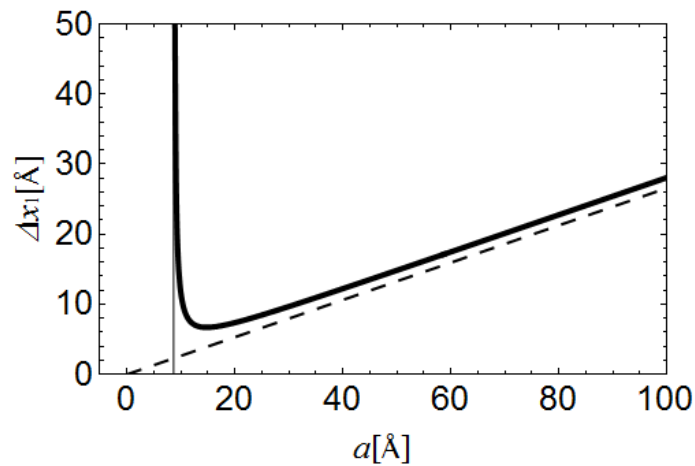


Fig.4-12 $V_H = 0.5\text{eV}$ における Δx_1 の a 依存性

細い縦線は $a = 8.6674\text{\AA}$ の基準線を示す

Fig.4-13 に $V_H = 0.5\text{eV}$ における $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0 / \hbar$ を a の関数として示す．破線は無限障壁井戸型ポテンシャルの $\Delta p_0^{\text{inf}} \cdot \Delta x_0^{\text{inf}} / \hbar$ を表している． Δp_0 とは対照的に Δx_0 にはディップが存在する．

$\Delta p \cdot \Delta x$ の導関数のゼロ点は

$$\frac{d}{da}(\Delta p \cdot \Delta x) = \Delta x \frac{d}{da} \Delta p + \Delta p \frac{d}{da} \Delta x = 0 \quad (4-29)$$

から求められ， $\Delta p \cdot \Delta x$ の最小値を与える位置が得られる．最小値を求める表式を以下に示す．

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x}{\Delta p} \frac{\hbar^2}{a^3} \frac{\xi^2}{(\eta+2)^3} \{ [\xi^2 - \eta(\eta^2 + \eta - 2)] \\ + \frac{\eta^3 \xi^2 (\eta+2)^3}{\{\xi^2 [(\eta+2)^3 + 4] - 6\eta^2(\eta+2)\}} \left[\frac{(\eta+2)^3 - 2}{\eta(\eta+2)^2} - \frac{6\eta}{\xi^2(\eta+2)} - \frac{2\xi^2 [(\eta+2)^3 + 3(\eta+2) - 2]}{\eta^3(\eta+2)^3} \right] \} \end{aligned} \quad (4-30)$$

$V_H = 0.5\text{eV}$ のとき，最小値を与える a の値は $a = 12.452 \text{ \AA}$ となる． Δp_0 のピークの右側が Δx_0 のディップの位置を上げるので， $\Delta p \cdot \Delta x$ のディップの位置は Δp_0 のピーク位置および Δx_0 のディップ位置よりも大きくなっている． $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ の最小値は $0.50718 \hbar$ で，ほぼ $0.5 \hbar$ である． a が無限大または V_H の無限大の極限では， $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ は定数 $\hbar \sqrt{(\pi^2 - 6)/12} = 0.56786 \hbar$ に収束する．この結果を Fig.4-13 に破線で示した．

Δp_0 は Δx_0 に現れる発散を打ち消して，一定の $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ を与える． $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ の積の存在領域は Δx_0 とは対照的に有限である． $a \rightarrow 0$ の極限において， $\Delta p_0 = \hbar \alpha^2 / (2a)$ および $\Delta x_0 = \sqrt{2a} / \alpha^2$ より $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ は定数 $\hbar / \sqrt{2}$ に収束する．これらの結果は引力デルタ関数ポテンシャル $-\gamma \delta(x) - V_1$ に閉じ込められた粒子の $\Delta p \cdot \Delta x$ に対応する．そこには一つの定常状態しか存在しない．このポテンシャルに対する固有関数は $\psi(x) = \sqrt{m\gamma / \hbar^2} \exp[-(m\gamma / \hbar^2) |x|]$ であり，エネルギー準位は

$E = -m\gamma^2/(2\hbar^2) - V_1$ である． $\Delta p = m\gamma/\hbar$ ， $\Delta x = \hbar^2/(\sqrt{2}m\gamma)$ ， $\Delta p \cdot \Delta x = \hbar/\sqrt{2}$ の標準偏差を得る．これらの結果の詳細な導出は Appendix C に示す．

V_H がより小さな有限障壁井戸型ポテンシャルにおいては， Δp_0 のピーク位置， Δx_0 のディップ位置， $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ のディップの位置は，より大きな a の位置にそれぞれシフトする．

Fig.4-14 に第一励起状態の $\Delta p_1 \cdot \Delta x_1 / \hbar$ を示す． Δp ， Δx と同様に井戸幅 a に対する最小値が存在する． $\Delta p_1 \cdot \Delta x_1 / \hbar$ は基底状態のプロファイルと基本的には似ているが， a の最下限においては有限にならず無限発散する．

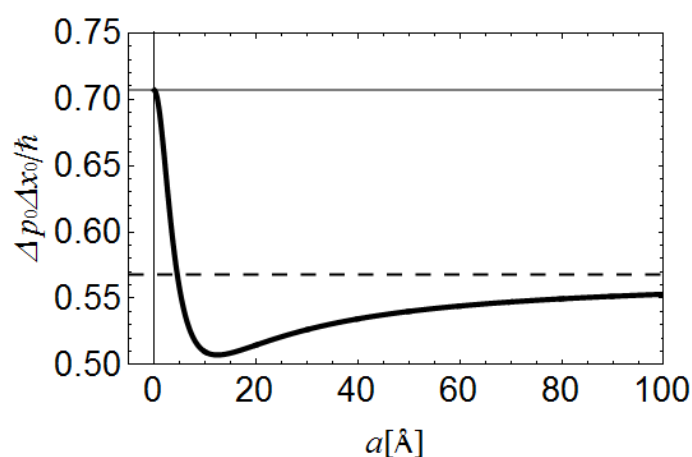


Fig.4-13 $V_H = 0.5\text{eV}$ における $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ の a 依存性

横線は最大値 $1/\sqrt{2} = 0.7071$ を表す

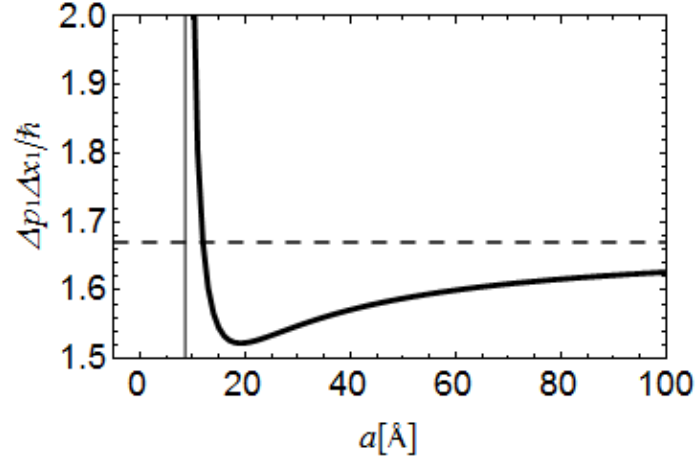


Fig.4-14 $V_H = 0.5\text{eV}$ における $\Delta p_1 \cdot \Delta x_1$ の a 依存性

細い縦線は $a = 8.6674\text{\AA}$ の基準線を示す

さらに、 ξ_n および η_n は $a^2 V_H$ によって決定されるため、 $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ は $a^2 V_H$ に依存する。

Δp_0 の逆数は Δx_0 に似ており、その逆もまた同様である。この特徴は、 $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ の積がほぼ一定であることを反映している。

Fig.4-15 に a および V_H に対する $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ の 3D 画像を示す。 V_H が増加するにつれて $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ が一定値に飽和し、曲面の谷の底が同じ高さを有することを示している。

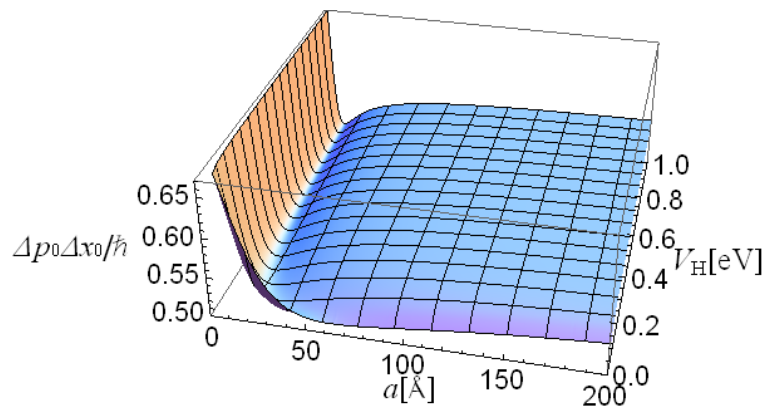


Fig.4-15 a および V_H に対する $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ の 3D 画像

Fig.4-16 に下から $n = 0, 1, 2$ のときの $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ の 3D 画像を示す. n の増加に伴い, 急峻な勾配の位置が a と V_H の大きな領域にシフトする. 第一励起状態の $\Delta p_1 \cdot \Delta x_1$ は $a^2 V_H = 37.562 \text{ \AA}^2 \text{ eV}$ を満たす曲線で発散し, 第二励起状態の $\Delta p_2 \cdot \Delta x_2$ は $a^2 V_H = 150.248 \text{ \AA}^2 \text{ eV}$ を満たす曲線で発散する. したがって, $n \geq 1$ の励起状態の $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ には上限値がなく最小値 ($\Delta p_1 \cdot \Delta x_1 \geq 1.5227\hbar$ と $\Delta p_2 \cdot \Delta x_2 \geq 2.4653\hbar$) が存在する.

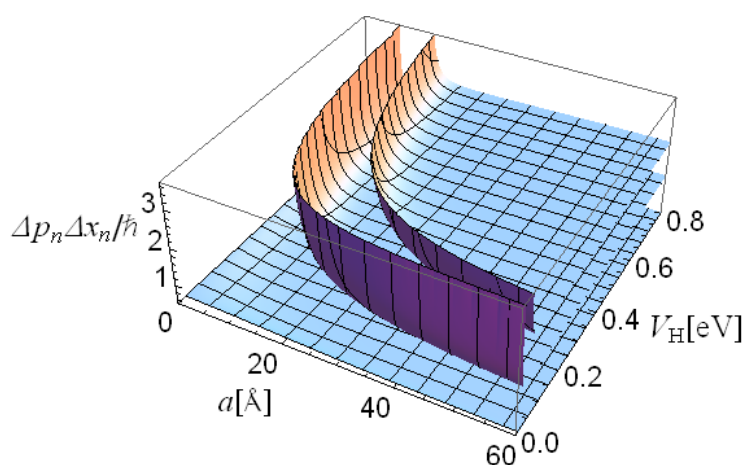


Fig.4-16 下から順に $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0, \Delta p_1 \cdot \Delta x_1$ ならびに $\Delta p_2 \cdot \Delta x_2$ を重ねた 3D 画像

n の増加に伴い, $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ はほぼ $(n+1/2)\hbar$ として増加し, これは $m\omega^2 x^2/2$ として定義される調和振動子ポテンシャルに閉じ込められた粒子の場合とほぼ同じである. ここに, ω は固有周波数である. エネルギー準位は $\hbar\omega$ で等間隔であり, 粒子の標準偏差 Δp_n^{hp} および Δx_n^{hp} は,

$$\Delta p_n^{\text{hp}} = \sqrt{\hbar m \omega} \sqrt{n+1/2} \quad (4-31)$$

$$\Delta x_n^{\text{hp}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \sqrt{n+1/2} \quad (4-32)$$

で得られる. ここに, $n = 0, 1, 2, \dots$ である.

これらの偏差は \hbar と ω に依存し、それらの積は

$$\Delta p_n^{\text{hp}} \cdot \Delta x_n^{\text{hp}} = \hbar(n+1/2) \quad (4-33)$$

となり m と ω に依存しないことがわかる[53]。標準偏差の積は $n=0$ の基底状態で最小値となる。

増加量 $\Delta p_{n+1} \cdot \Delta x_{n+1} - \Delta p_n \cdot \Delta x_n$ は定数 \hbar である。これらの表式の導出の詳細は Appendix D に示す。

自由波動関数で構成された最小波束は、波動関数の包絡線がガウス分布関数を含むので、調和振動子ポテンシャルと同じ $\Delta p \cdot \Delta x$ の特徴を示す。無限障壁井戸型ポテンシャルに閉じ込められた粒子のエネルギー準位は、調和振動子ポテンシャルに閉じ込められた粒子のエネルギー準位 $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ とは対照的に $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2m)$ として得られる。しかしながら、連続した

$\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ がほぼ \hbar の等間隔になっていることは調和振動子ポテンシャルの場合と共通である。

どちらの場合でも $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ は n にほとんど依存しないことは奇妙に思えるが、式(4-25)はこの

特徴を表している。これは、 $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ の n 依存性は主に大きな n に対する Δp_n に起因するから

である。調和振動子ポテンシャルの場合、 $\Delta p_n^{\text{hp}} \cdot \Delta x_n^{\text{hp}}$ の n 依存性は Δp_n^{hp} と Δx_n^{hp} の両方から生じる。

4.3. 異なるポテンシャルに束縛された粒子の不確定性関係

本節では異なる種類のポテンシャルに束縛された粒子の不確定性関係の結果を要約する。以下にこれらのポテンシャルにおける $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ の範囲をリストアップする。

[i]有限障壁高さポテンシャル

基底状態は $\hbar/\sqrt{2} \geq \Delta p_0 \cdot \Delta x_0 \geq 0.50718\hbar$ ，第一励起状態は $\Delta p_1 \cdot \Delta x_1 \geq 1.5227\hbar$ ，第二励起状態は $\Delta p_2 \cdot \Delta x_2 \geq 2.4653\hbar$ である。 $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ は[iv]で示す $\Delta p^\delta \cdot \Delta x^\delta = \hbar/\sqrt{2}$ と同じ上限値を持つ。全

ての標準偏差 Δp_n , Δx_n および $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ は井戸幅 a に依存する.

[ii] 無限障壁高さポテンシャル

各 n 状態は $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}} = \frac{\hbar \pi (n+1)}{2\sqrt{3}} \sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2 (n+1)^2}} \geq \hbar \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}}$ である. Δp_n^{inf} と Δx_n^{inf} は井戸幅

a に依存するが, $\Delta p_n^{\text{inf}} \cdot \Delta x_n^{\text{inf}}$ は井戸幅 a に依存しない.

[iii] 調和振動子ポテンシャル

各 n 状態は $\Delta p_n^{\text{hp}} \cdot \Delta x_n^{\text{hp}} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq \hbar/2$ である. Δp_n^{hp} と Δx_n^{hp} は井戸幅 a に依存するが,

$\Delta p_n^{\text{hp}} \cdot \Delta x_n^{\text{hp}}$ は井戸幅 a に依存しない.

[iv] デルタ関数型ポテンシャル

束縛状態は一つだけ存在し, $\Delta p^\delta \cdot \Delta x^\delta = \hbar/\sqrt{2}$ の等式のみである.

4.4. 結論

有限障壁井戸型ポテンシャル内に閉じ込められた粒子の運動量偏差 Δp ならびに位置偏差 Δx との間の不確定性関係は, 無限障壁ポテンシャルおよび調和振動子ポテンシャルの場合について議論されたような単純なものではない. 基底状態に関して, Δp_0 は上限を有し, Δx_0 は下限を有する. 積の $\Delta p_0 \cdot \Delta x_0$ は井戸幅およびポテンシャル高さの関数として発散のない有限範囲内に存在する. $n \geq 1$ の励起状態に関して, $\Delta p_n \cdot \Delta x_n$ は最小値を有するが, 上限はない.

総括

本論文の2つの主要テーマは有限系を対象としたものである。1つ目のテーマである矩形 QC に準定常として束縛された電子状態ならびに STM 電流の I - V 特性, STS および LDOS 画像の解析において、これらに特異なサイズ依存性であるフラクタル構造が出現することを明らかにした。2つ目のテーマである 1 次元有限系の有限高さポテンシャルに束縛された電子の運動量ならびに位置に対する不確定性関係において顕著なサイズ依存性が存在することを確認した。これらの解析結果は従来指摘されていなかったものであり、関連分野に新たな知見を提供するものである。また第2テーマは2次元系への拡張も可能であり、第1テーマの研究対象である QC に束縛された電子が示す不確定性関係の研究が展開されるものと思われる。

付録 A

状態密度(DOS : Density of State)の導出

状態密度はデルタ関数を持ちいて

$$D(E) = \sum_{\sigma} \sum_k \delta(E - E_k) \quad (\text{A-1})$$

で定義される．自由電子の場合， $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$ であり，スピン自由度 σ の総和は 2 となる．

\sum_k は次元によって定義が異なるため，それぞれの次元によって状態密度が異なる．

(I) 1 次元系

$$D_1(E) = 2 \sum_k \delta(E - E_k) = \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} \delta(E - E_k) dk \quad (\text{A-2})$$

で定義される．ここに， L は系の長さである．状態密度は

$$D_1(E) = \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} \delta(E - \hbar^2 k^2 / (2m)) dk \quad (\text{A-3})$$

となる．デルタ関数の公式

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|} \quad (\text{A-4})$$

および， $a > 0$ のときの公式

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a} [\delta(x - a) + \delta(x + a)] \quad (\text{A-5})$$

をもちいると

$$\begin{aligned} D_1(E) &= \frac{L}{\pi} \int_0^\infty \delta(E - \hbar^2 k^2 / (2m)) dk \\ &= \frac{L}{\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \delta(k^2 - 2mE/\hbar^2) dk \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

より

$$D_1(E) = \frac{L}{\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\sqrt{E}} \int_0^\infty \delta\left(k - \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) dk \quad (\text{A-7})$$

と変形でき、 k で積分すると状態密度は

$$D_1(E) = \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (\text{A-8})$$

となる．この表式は $E = 0$ で発散する．

(2) 2次元系

$$D_2(E) = 2 \sum_k \delta(E - E_k) = \frac{2S}{4\pi^2} \int_0^\infty k \delta(E - E_k) \int_0^{2\pi} d\theta dk = \frac{S}{\pi} \int_0^\infty k \delta(E - E_k) dk \quad (\text{A-9})$$

で定義される．ここに、 S は系の面積である．状態密度は

$$D_2(E) = \frac{S}{\pi} \int_0^\infty k \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) dk \quad (\text{A-10})$$

となる．1次元系と同じ手法を用いると状態密度は

$$\begin{aligned}
 D_2(E) &= \frac{S}{\pi} \int_0^\infty k \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) dk \\
 &= \frac{S}{\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty k \delta(k^2 - 2mE/\hbar^2) dk \\
 &= \frac{S}{\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{2\sqrt{E}} \int_0^\infty k \delta\left(k - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}\right) dk
 \end{aligned} \tag{A-11}$$

より

$$D_2(E) = \frac{mS}{\pi\hbar^2} \tag{A-12}$$

となる定数になり，エネルギーに依存しない一定値になる．

(3) 3次元系

$$D_3(E) = 2 \sum_k \delta(E - E_k) = 2 \frac{\Omega}{8\pi^3} \int_0^\infty k^2 \delta(E - E_k) \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi d\theta dk = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty k^2 \delta(E - E_k) dk \tag{A-13}$$

で定義される．ここに， Ω は系の体積である．よって状態密度は

$$D_3(E) = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty k^2 \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) dk \tag{A-14}$$

となり，1次元系と同様の手法を用いると状態密度は

$$\begin{aligned}
D_3(E) &= \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty k^2 \delta(E - \hbar^2 k^2 / 2m) dk \\
&= \frac{\Omega}{\pi^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty k^2 \delta(k^2 - 2mE/\hbar^2) dk \\
&= \frac{\Omega}{2\pi^2} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} E \right)^{-\frac{1}{2}} \int_0^\infty k^2 \delta\left(k - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}\right) dk
\end{aligned} \tag{A-15}$$

より

$$D_3(E) = \frac{\Omega}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \tag{A-16}$$

となる.

2次元系 DOS : 矩形2次元系の場合

$a_y = \gamma a_x$ とすると複素固有エネルギーは

$$E_{nm}^{(r)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a_x^2} (n^2 + m^2/\gamma^2) \tag{A-17}$$

となる. m^* は有効質量である. DOS は LDOS の位置依存性が無くなるため,

$$\sum_{nm} \frac{\Gamma/2}{\pi[(E - E_{nm}^{(r)})^2 + (\Gamma/2)^2]} \tag{A-18}$$

であり, 複素固有エネルギーを代入すると

$$\sum_{nm} \frac{\Gamma/2}{\pi\{[E - (\pi^2 \hbar^2 / 2m^* a_x^2)(n^2 + m^2/\gamma^2)]^2 + (\Gamma/2)^2\}} \tag{A-19}$$

である．全固有エネルギーに拡張すると

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\Gamma/2}{\pi \{ [E - (\pi^2 \hbar^2 / 2 m^* a_x^2)(n^2 + m^2 / \gamma^2)]^2 + (\Gamma/2)^2 \}} dndm \quad (\text{A-20})$$

である．ここで

$$n^2 + m^2 / \gamma^2 = u^2 \quad (\text{A-21})$$

とすると， $n = u \cos \theta$ ， $m = \gamma u \sin \theta$ と書ける． ヤコビアンは $\frac{\partial n}{\partial u} = \cos \theta$ ， $\frac{\partial n}{\partial \theta} = -u \sin \theta$

$\frac{\partial m}{\partial u} = \gamma \sin \theta$ ， $\frac{\partial m}{\partial \theta} = \gamma u \cos \theta$ となることから

$$dndm = \begin{vmatrix} \frac{\partial n}{\partial u} & \frac{\partial n}{\partial \theta} \\ \frac{\partial m}{\partial u} & \frac{\partial m}{\partial \theta} \end{vmatrix} du d\theta = \gamma u du d\theta \quad (\text{A-22})$$

となり，

$$\gamma \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma/2}{\pi \{ [E - (\pi^2 \hbar^2 / 2 m^* a_x^2) u^2]^2 + (\Gamma/2)^2 \}} u du d\theta \quad (\text{A-23})$$

が得られる． さらに $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m^* a_x^2} u^2 = x$ とすると $\frac{\pi^2 \hbar^2}{m^* a_x^2} u du = dx$ となり， DOS は

$$\frac{\gamma m^* a_x^2}{\pi^3 \hbar^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma/2}{(E - x)^2 + (\Gamma/2)^2} dx d\theta \quad (\text{A-24})$$

で与えられる．積分を実行すると

$$\begin{aligned}
& \frac{\gamma m^* a_x^2}{\pi^3 \hbar^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma/2}{(E-x)^2 + (\Gamma/2)^2} dx d\theta \\
&= \frac{\gamma 2m^* a_x^2}{\pi^2 \hbar^2} \text{Arctan} \frac{2(x-E)}{\Gamma} \Big|_0^\infty \\
&= \frac{m^* \gamma a_x^2}{\pi \hbar^2}
\end{aligned} \tag{A-25}$$

が得られる． γa_x^2 は矩形の面積に対応し，(A-12)と一致する．

付録 B

超越方程式を解くための摂動論

ディップ位置よりも大きな井戸幅における標準偏差の近似式を導くために、超越方程式を解くための摂動論を提案する.

ξ_n と η_n の固有値方程式は, 対称波動関数の 2 つの独立した方程式 $\xi_n^2 + \eta_n^2 = \alpha^2$ および $\xi_n \sin(\xi_n/2) - \eta_n \cos(\xi_n/2) = 0$ から得ることができる. ここに, $\alpha^2 = 2m^*V_H a^2/\hbar^2 = K^2 a^2$, $K = \sqrt{2m^*V_H/\hbar^2}$ である. これらの方程式から固有値方程式

$$\cos\left(\frac{1}{2}\xi_n\right) = \frac{1}{\alpha}\xi_n \quad (\text{B-1})$$

が得られる.

ここでは, α^{-1} が小さくなるような, 大きな a の場合を対象とする.

摂動次数が $\alpha^{-1} = (\hbar/\sqrt{2m^*V_H})/a$ である方程式 $\cos\left(\frac{1}{2}\xi_n\right) = \frac{1}{\alpha}\xi_n$ の両辺に摂動パラメータ λ を導入する. 基底状態の ξ_0 を対象とし λ で展開する.

$$\xi_0 = \xi_0^{(0)} + \lambda \xi_0^{(1)} + \lambda^2 \xi_0^{(2)} + \dots \quad (\text{B-2})$$

式 (B-2) を式 (B-1) に代入し, $\cos(\xi_0/2)$ を λ で展開すると,

$$\begin{aligned} \cos\frac{1}{2}\xi_0^{(0)} - \lambda\frac{1}{2}\xi_0^{(1)}\sin\frac{1}{2}\xi_0^{(0)} - \lambda^2\left(\frac{1}{8}\xi_0^{(1)2}\cos\frac{1}{2}\xi_0^{(0)} + \frac{1}{2}\xi_0^{(2)}\sin\frac{1}{2}\xi_0^{(0)}\right) + O(\lambda^3) \\ = \lambda\frac{1}{\alpha}(\xi_0^{(0)} + \lambda\xi_0^{(1)} + \lambda\xi_0^{(2)}). \end{aligned} \quad (\text{B-3})$$

が得られる．上式の λ の同じ次数の項を比較すると， $\xi_0^{(0)} = \pi$ ， $\xi_0^{(1)} = -(2\xi_0^{(0)}/\alpha) = -2\pi/\alpha$ ，

$\xi_0^{(2)} = -2\xi_0^{(1)}/\alpha = 4\pi/\alpha^2$ として 2 次の摂動項が得られる．

本摂動法により， $(\Delta x)^2$ を得るために，式(4-23)の二乗を

$$(\Delta x)^2 = a^2 \left[\frac{1}{12} + \frac{1}{4\eta} + \frac{1}{2\eta^2} + \frac{1}{12(\eta+2)} - \frac{1}{2\xi^2} \right] \quad (\text{B-4})$$

と部分分数分解する． λ による $1/\eta = 1/\tan(\xi/2)$ の摂動展開に関しては，

$$\frac{1}{\eta} = \lambda \frac{1}{\alpha} + O(\lambda^3) \quad (\text{B-5})$$

を得る．さらに， $1/(2\xi^2)$ の摂動展開を

$$\frac{1}{2\xi^2} = \frac{1}{2\pi^2} + \lambda \frac{2}{\pi^2\alpha} + \lambda^2 \frac{2}{\pi^2\alpha^2} \quad (\text{B-6})$$

として得られる．最終的に

$$(\Delta x)^2 = \frac{(\pi^2 - 6)}{12\pi^2} \left(a + \frac{2}{K} \right)^2 \quad (\text{B-7})$$

となる．本摂動法を $a \rightarrow 0$ の場合に適用すると，

$$(\Delta p) = \frac{\hbar}{2} K^2 a \quad (\text{B-8})$$

と

$$(\Delta x) = \frac{\sqrt{2}}{K^2} \frac{1}{a} \quad (\text{B-9})$$

の標準偏差が得られ,

$$(\Delta p)(\Delta x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad (\text{B-10})$$

となる.

任意の励起状態 ξ_n を λ で展開すれば, 同様の方法で励起状態の標準偏差も得られる.

付録 C

以下のデルタ関数ポテンシャルに束縛された粒子の固有状態，固有エネルギーおよび運動量と位置の標準偏差を導出する．

$$V_{\delta}(x) = -\gamma\delta(x - x_0) - V_1 \quad (\text{C-1})$$

解くべきシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [-\gamma\delta(x - x_0) - V_1] \psi(x) = E \psi(x) \quad (\text{C-2})$$

である．波動関数 $\psi(x)$ を以下のようにフーリエ展開

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx) dk \quad (\text{C-3})$$

してシュレディンガー方程式に代入すると

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 c_k \exp(ikx) dk - \gamma\delta(x - x_0) \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx) dk = (E + V_1) \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx) dk \quad (\text{C-4})$$

が得られ，さらに両辺に $\exp(-iqx)$ をかけたのちに x で積分すると以下の方程式が得られる．

$$c_q \exp(iqx_0) = \left(\frac{m\gamma}{\pi\hbar^2} \right) \frac{1}{(q^2 + \kappa^2)} \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx_0) dk \quad (\text{C-5})$$

ここにパラメター κ を $E = -\hbar^2 \kappa^2 / (2m) - V_1$ の形で導入した．デルタ関数の定義式

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx) dk \quad (\text{C-6})$$

ならびに $\psi(x_0)$ が

$$\psi(x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx_0) dk \quad (\text{C-7})$$

で定義されることを考慮すると固有値方程式

$$1 = \left(\frac{m\gamma}{\pi\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(q^2 + \kappa^2)} dq = \frac{m\gamma}{\hbar^2 \kappa} \quad (\text{C-8})$$

が得られる．この表式から固有エネルギーが

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} - V_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m\gamma}{\hbar^2} \right)^2 - V_1 = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2} - V_1 \quad (\text{C-9})$$

となり，固有関数が

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx) dk = \left(\frac{m\gamma}{\pi\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[ik(x-x_0)]}{(k^2 + \kappa^2)} dk \int_{-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx_0) dk \\ \psi(x) &= \psi(x_0) \exp[-\kappa|x-x_0|] \end{aligned} \quad (\text{C-10})$$

で与えられることがわかる．ここに複素積分により得られる結果

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[ik(x-x_0)]}{(k^2 + \kappa^2)} dk = \frac{\pi}{\kappa} \exp[-\kappa |x-x_0|] \quad (\text{C-11})$$

をもちいた．固有関数を規格化すると

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{m\gamma}{\hbar^2}} \exp[-\kappa |x-x_0|] \quad (\text{C-12})$$

となる．運動量ならびに位置の二乗標準偏差はそれぞれ

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx = \left(\frac{m\gamma}{\hbar} \right)^2 \quad (\text{C-13})$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) x^2 \psi(x) dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) x \psi(x) dx \right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{m\gamma} \right)^2 \quad (\text{C-14})$$

で与えられる．ここに $\langle p \rangle = 0$ ， $\langle x \rangle = x_0$ をもちいた．以上の結果から運動量と位置の不確定

さの積 $\Delta p \cdot \Delta x$ は

$$(\Delta p)(\Delta x) = \hbar \left(\frac{m\gamma}{\hbar} \right) \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2}m\gamma} \right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad (\text{C-15})$$

になる．

付録 D

調和振動子ポテンシャルに束縛された粒子の運動量ならびに位置の標準偏差を第 2 量子化の手法を用いて導出する．消滅(下降)演算子 a と生成(上昇)演算子 a^\dagger を以下のように定義する．

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \quad (D-1)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \quad (D-2)$$

これらの表式より運動量演算子ならびに位置は

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a^\dagger - a) \quad (D-3)$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad (D-4)$$

で与えられる．ここに記号 \dagger はエルミート共役を表す．運動量と位置の標準偏差を得るには，期待値 $\langle n | \hat{p}^\dagger \hat{p} / n \rangle$ ならびに期待値 $\langle n | \hat{x}^\dagger \hat{x} / n \rangle$ を求める必要がある．ここにディラックの表記をもちいた． n は n 番目のエネルギー準位 ($n=0, 1, 2, \dots$) を表す．また $\langle n | \hat{p}^\dagger | n \rangle = 0$, $\langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$, $\langle n | \hat{x}^\dagger | n \rangle = 0$, $\langle n | \hat{x} | n \rangle = 0$ であるので運動量の二乗標準偏差は

$$(\Delta p)^2 = \langle n | \hat{p}^\dagger \hat{p} / n \rangle = \frac{\hbar m \omega}{2} \langle n | 2a^\dagger a + 1 / n \rangle = \hbar m \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (D-5)$$

位置の二乗標準偏差は

$$(\Delta x)^2 = \langle n | \hat{x}^\dagger \hat{x} / n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | 2a^\dagger a + 1 / n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (D-6)$$

で与えられる．なお，対称演算子 $a^\dagger a$ は n に置き換えた．運動量の標準偏差と位置の標準偏差の積 $\Delta p \cdot \Delta x$ は

$$(\Delta p)(\Delta x) = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{D-7})$$

で与えられる． $n = 0$ の基底状態では最小値

$$(\Delta p)(\Delta x) = \frac{\hbar}{2} \quad (\text{D-8})$$

になる．

参考文献

- [1] G. Binning and H. Rohrer, *Helv. Phys. Acta* **55** 726 (1982).
- [2] G. Binning, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, *Appl. Phys. Lett.* **40** 178 (1982).
- [3] G. Binning, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.* **49** 57 (1982).
- [4] G. Binning, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.* **50** 120 (1983).
- [5] G. Binning and H. Rohrer, *Rev. Mod. Phys.* **59** 615 (1987).
- [6] R. E. Schlier and H. E. Farnsworth, *J. Chem. Phys.* **30** 917 (1987).
- [7] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, M. Takahashi, and S. Takahashi, *J. Vac. Sci. Technol.* **3** 1502 (1985).
- [8] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi, and M. Takahashi, *Surf. Sci.* **164** 367 (1985).
- [9] W. A. Hofer, A. S. Foster, and A. L. Shluger, *Rev. Mod. Phys.* **75** 1287 (2003).
- [10] W. A. Hofer, *Prog. Surf. sci.* **71** 147 (2003).
- [11] C. J. Chen, *INTRODUCTION TO SCANNING TUNNELING MICROSCOPY* 2nd ed. (Oxford University Press, New York) 2008.
- [12] R. Wiesendanger, *Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy* (Cambridge University Press, Cambridge) 1994.
- [13] G. Binning, K. H. Frank, H. Fuchs, N. Garcia, B. Reihl, H. Rohrer, F. Salvan, and A. R. Williams, *Phys. Rev. Lett.* **55** 991 (1985).
- [14] R. S. Becker, J. A. Golovchenko, D. R. Hamann, and B. S. Swartzentruber, *Phys. Rev. Lett.* **55** 2032 (1985).
- [15] R. M. Feenstra, A. Stroscio, and A. P. Fein, *Surf. Sci.* **181** 295 (1987).
- [16] G. Binning, C. F. Quate, and Ch. Gerber, *Phys. Rev. Lett.* **56** 930 (1986).
- [17] L. Bartels, G. Meyer, and K.-H. Rieder, *Phys. Rev. Lett.* **79** 697 (1997).
- [18] L. Bartels, G. Meyer, K.-H. Rieder, D. Velic, E. Knoesel, A. Hotzel, M. Wolf, and G. Ertl, *Phys. Rev. Lett.* **80** 2004 (1998).
- [19] G. Meyer, S. Zöphel, and K.-H. Rieder, *Phys. Rev. Lett.* **77** 2113 (1996).
- [20] R. Wiesendanger, H.-J. Güntherodt, G. Güntherodt, R. J. Gambino, and R. Ruf, *Phys. Rev. Lett.* **65** 247 (1990).
- [21] O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode, and R. Wiesendanger, *Science* **292** 2053 (2001).
- [22] M. Bode, *Rep. Prog. Phys.* **66** 523 (2003).
- [23] O. Pietzsch, S. Okatov, A. Kubetzka, M. Bode, S. Heinze, A. Lichtenstein, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **96** 237203 (2006).
- [24] R. Wiesendanger, *Rev. Mod. Phys.* **81** 1495 (2009).
- [25] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, J. M. Valles, Jr., and J. V. Waszczak, *Phys. Rev. Lett.* **62** 214 (1989).
- [26] H. F. Hess, R. B. Robinson, and J. V. Waszczak, *Phys. Rev. Lett.* **64** 2711 (1990).
- [27] I. Maggio-Aprile, Ch. Renner, A. Erb, E. Walker, and Ø. Fischer, *Phys. Rev. Lett.* **75** 2754 (1995).
- [28] Ø. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile, and Ch. Berthod, *Rev. Mod. Phys.* **79** 353 (2007).
- [29] D. M. Eigler and E. K. Schweizer, *Nature* **344** 524 (1990).

- [30] J. A. Strosio and D. M. Eigler, *Science* **254** 1319 (1991).
- [31] M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, *Science* **262** 218 (1993).
- [32] E. J. Heller, M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler, *Nature* **369** 464 (1994).
- [33] STM Image Gallery // IBM, 1995. www.almaden.ibm.com/vis/stm/corral.html (reference date: 12. Dec. 2011).
- [34] E. T. Goodwin, *Proceeding of Cambridge Philosophical Society* **35**: 205 (1939).
- [35] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt Reinhart, Philadelphia) p.369 (1976).
- [36] N. V. Smith, *Phys. Rev. B* **32** 3549 (1985).
- [37] S. D. Kevan, *Phys. Rev. B* **34** 6713 (1986).
- [38] S. D. Kevan and R. H. Gaylord, *Phys. Rev. B* **36** 5809 (1987).
- [39] M. C. Desjonquères and D. Spanjaard, *Concepts in Surface Physics* 2nd ed. (Springer, Berlin) p.197 (1996).
- [40] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54** 437 (1982).
- [41] L. Bürgi, O. Jeandupeux, A. Hirstein, H. Brune, and K. Kern, *Phys. Rev. Lett.* **81** 5370 (1998).
- [42] J. Kliewer, R. Berndt, and S. Crampin, *New J. Phys.* **3** 22.1 (2001).
- [43] A. Tamura, *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 025303 (2011).
- [44] A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry* 5th edn (Oxford University Press, Oxford) p 1288.
- [45] W. Heisenberg *Z. Physik* **43** 172 (1927).
- [46] E. H. Kennard *Z. Physik* **44** 326 (1927).
- [47] H. P. Robertson *Phys. Rev.* **34** 163 (1929).
- [48] E. Schrödinger *Sitz. Preuss. Akad. Wiss.* **14** 296 (1930).
- [49] M. Ozawa *Phys. Rev. A* **67** 042105-1 (2003) and references therein.
- [50] A. F. J. Levi, *Applied Quantum Mechanics* 2nd ed. (Cambridge Univ. Press, Cambridge) pp. 270-271 (2006).
- [51] N Zettili, *Quantum Mechanics* 2nd ed. (John Wiley & Sons, Ltd., New York) pp. 254-256 (2009).
- [52] V. Majerník and E. Majerníková *J. Phys. A: Math. Gen.* **35** 5751 (2002).
- [53] Merzbacher E, *QUANTUM MECHANICS* (Dover Pub., New York) p. 229 (1999).

謝辞

本研究を行うにあたり，ご指導いただきました，埼玉工業大学 大学院 工学研究科 前研究指導教員 田村 明名誉教授，研究指導教員 内田 正哉 教授，古谷 清藏准教授，巨 東英教授，根岸 利一郎教授ならびに多大なご助力をいただきました光岡 重徳工学博士，熊谷 卓也工学博士や埼玉工業大学の関係者様など，多くの方々に厚く御礼申し上げます．

博士学位論文の対象となる学術論文

1. Fractal features of the quantized scanning tunneling current and the local density of states for a quantum corral,

Yohhei Tatsumi, Shigenori Mitsuoka and Akira Tamura,

Surface Review and Letters, accepted, 17 July 2017, in press.

2. Uncertainty relations for a particle confined in a finite square well potential,

Akira Tamura and Yohhei Tatsumi

European Journal of Physics, accepted, 4 August 2017, in press.