

課題名 (タイトル) :

多数の量子ドットからなる系における近接場光相互作用による
光エネルギー移動を利用した新規計算機概念の提案

利用者氏名 :

○若林 政光*, 中田 浩弥*
*, Wang Yuanqing

所属 : *イノベーション推進センター 中村特別研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年ナノ構造体の操作技術は光の回折限界以下で行うことが可能となっている。量子ドット間の近接場相互作用によって起こる励起エネルギー移動を利用したデバイスの提案には、量子ドットの配置とその系で起こりうる励起エネルギー移動の振る舞いを知る必要がある。また、その時間発展の特徴を利用して、組合せ最適化問題の解を与えるアルゴリズムの実装を目指す。

2. 具体的な利用内容、計算方法

複数の量子ドットがある特定の配置をとっているとす。このとき、各量子ドットにおける励起子の確率密度とそれらのコヒーレンスの時間発展は、量子マスター方程式によって記述される。これは、シュレディンガー方程式と等価な Liouville 方程式に、エネルギー散逸の項や pure dephasing の項を付け加えたものである。近接場相互作用は湯川ポテンシャルを用いることで見積もることができる。これが、数値計算の基礎となる理論である。エネルギー散逸が無視できる場合を考えると、励起子の確率分布やコヒーレンスの時間発展は単純振動の線形結合として記述することができるので、並列計算しやすく、大多数の量子ドットからなる系における励起エネルギー移動も短時間で計算することが可能となった。一方、エネルギー散逸や pure dephasing が影響する場合は単純ではなく、4 次の Runge-Kutta 法を用いて逐次的に時間発展を解いてゆく方法を採用した。

3. 結果

エネルギー散逸の効果が無視できる場合、配置の対称性が良いならば、励起子が生じた近辺で移動が終わるのではなく、幅広く拡散することが理論的に示唆された。一方で、対称性があまりない場合、励起子が生じた量子ドットから離れた部分には、あまり励起子が見出されることはないという結果になった。エネルギー

散逸が起こる場合、量子ドット間での励起エネルギーは振動しながら減少してゆき、漸的に基底状態に近づく。このとき、部分系における量子エントロピーは始め増加に向かうが、ある時刻に最大値に達し、その後、減少し続ける。その様子を、量子ドットの配置と、励起子の数を変えながらシミュレーションしたところ、励起子の個数が複数ある場合、量子エントロピーの時間変化は、量子ドットの個数と配置によって異なる結果となった。

励起エネルギー移動の理論的な記述は、光合成膜タンパク内にある色素分子の間で起こるものも同様である。ただし、この場合は、色素分子が近すぎない場合、遷移双極子の間の相互作用として近似して計算することができる。これは、フェルスター機構と呼ばれる。光合成色素の間での励起エネルギー移動においても、各々の量子状態の位相差がばらつき、各位置における励起子の確率密度の振幅が減少してゆく。これは pure dephasing と呼ばれている。量子ドットからなる系の場合も pure dephasing が起こることが考えられる。これらを取り入れ、励起エネルギー移動のプログラムは、どのような量子ドット配置のどのような初期条件においてもシミュレーションできるようになった。

4. まとめ

様々な量子ドット配置の系で起こる励起エネルギー移動のための量子マスター方程式を用いて計算し、各量子ドットにおける励起子の存在確率と状態間のコヒーレンスの時間変化をシミュレーションし、量子エントロピーの時間変化の特徴を見出した。

5. 今後の計画・展望

組み合わせ最適化問題アルゴリズムへの適応。