

(千葉大学学位申請論文)

任意形状の系における磁化スピン相互作用および  
スピン軌道相互作用がある場合の  
磁場中量子伝導特性の解析

2008年1月

千葉大学大学院自然科学研究科  
人工システム科学専攻電子・光システム講座

宮川 悠

# 目次

第 1 章	はじめに	1
第 2 章	メソスコピック系の電子輸送	3
2.1	メソスコピック系とは	3
2.1.1	ドリフト速度とフェルミ速度	3
2.1.2	状態密度とフェルミ分布	4
2.1.3	拡散電流とアインシュタインの関係式	5
2.1.4	位相干渉長	6
2.1.5	メソスコピック系の分類	6
2.2	Landauer の公式	7
2.2.1	2次元電子ガス	7
2.2.2	サブバンド	8
2.2.3	1次元系の Landauer の公式	10
2.2.4	擬1次元系の Landauer の公式	12
2.2.5	コンダクタンスの量子化	14
2.2.6	2端子測定と4端子測定の違い	15
2.2.7	複数の端子がある場合の S 行列	16
2.2.8	透過確率の時間反転対称性	18
2.2.9	Landauer-Büttiker の公式	19
第 3 章	スピンの性質	20
3.1	電子のスピン	20
3.1.1	スピン角運動量	20
3.1.2	磁気モーメント	21
3.1.3	スピン間の交換相互作用	23
3.2	スピノル場の回転	26
3.3	常磁性体	29
3.3.1	常磁性体のハイゼンベルグ模型	29
3.3.2	常磁性体のイジング模型	31
3.4	強磁性体	32
3.4.1	強磁性体の自発磁化	32
3.4.2	磁区構造	35
3.5	スピントロニクス	36
3.5.1	異方性磁気抵抗効果	36
3.5.2	巨大磁気抵抗効果	37

3.5.3	トンネル磁気抵抗効果 . . . . .	39
3.5.4	メゾスコピック系でのスピントロニクス . . . . .	39
<b>第 4 章</b>	<b>磁壁の影響</b>	<b>42</b>
4.1	磁区がある場合の Schrödinger 方程式 . . . . .	42
4.1.1	磁化中でのスピンのエネルギー . . . . .	42
4.1.2	スケーリング . . . . .	43
4.1.3	スピントリップ . . . . .	43
4.1.4	ヘルムホルツ方程式への変換 . . . . .	44
4.2	1次元系における磁壁の影響 . . . . .	44
4.2.1	磁区と磁壁の形状 . . . . .	44
4.2.2	転送行列法 . . . . .	44
4.2.3	計算結果 . . . . .	47
<b>第 5 章</b>	<b>磁場中の自由電子の運動</b>	<b>50</b>
5.1	古典論 . . . . .	50
5.1.1	ハミルトニアン . . . . .	50
5.1.2	電子の運動 . . . . .	51
5.2	量子論 . . . . .	53
5.2.1	交換関係 . . . . .	54
5.2.2	ランダウゲージ . . . . .	54
5.2.3	対称ゲージ . . . . .	55
5.2.4	ゲージ変換 . . . . .	56
5.2.5	ランダウ準位の縮退 . . . . .	57
5.3	AB 効果と AAS 効果 . . . . .	58
<b>第 6 章</b>	<b>境界要素法</b>	<b>62</b>
6.1	境界要素法とは . . . . .	62
6.1.1	グリーン関数 . . . . .	62
6.1.2	境界積分方程式 . . . . .	63
6.1.3	境界条件 . . . . .	64
6.2	境界要素法の適用 . . . . .	65
6.2.1	未知変数の連立方程式とグリーン関数の特異性 . . . . .	65
6.2.2	未知変数の決定 . . . . .	66
6.2.3	ダブルポイント . . . . .	68
6.2.4	リード線の接続 . . . . .	69
<b>第 7 章</b>	<b>2次元系における任意形状、有限強度の磁性散乱体がある場合の境界要素法</b>	<b>73</b>
7.1	境界積分方程式 . . . . .	73
7.2	定式化 . . . . .	74
7.3	磁化の大きさの検討 . . . . .	75
7.4	計算結果 . . . . .	76
7.4.1	磁性散乱体の形状依存性 . . . . .	76

7.4.2	ポテンシャルと磁区との比較	79
7.4.3	ランダムな形状による影響	80
7.4.4	計算精度	84
7.5	議論	84
<b>第 8 章</b>	<b>2次元系における複数の点状磁性散乱体がある場合の境界要素法</b>	<b>85</b>
8.1	境界積分方程式	85
8.2	近似	85
8.3	全ての磁性散乱体の磁化ベクトル $M$ が等しい場合	87
8.4	4つ点状の磁性散乱体を並べた場合	88
8.4.1	定式化	88
8.4.2	全ての磁化ベクトルの向きが等しい場合	89
8.4.3	磁化ベクトルの向きが等しくない場合	92
8.4.4	入射スピンによる違い	93
8.5	規則的に配置した場合	94
8.5.1	定式化	94
8.5.2	1層配置	95
8.5.3	2層配置	97
8.5.4	3層配置	100
8.5.5	3層配置のスピン分極率	102
8.5.6	磁化の大きさによる影響	103
8.6	議論	107
<b>第 9 章</b>	<b>境界要素法、有限要素法の加速</b>	<b>108</b>
9.1	専用計算機による境界要素法の加速	108
9.2	MPIによる境界要素法の加速	110
9.2.1	ループの分割	110
9.2.2	境界要素法、有限要素法でのMPI並列計算	113
<b>第 10 章</b>	<b>多数の格子状、ランダムに配置した点状磁性体がある場合の解析</b>	<b>114</b>
10.1	正方格子状配置とランダム配置との比較	114
10.2	格子状配置によるバンドの形成	116
10.3	格子状モデルでのコンダクタンス	121
10.3.1	コンダクタンスにおけるバンドの形成	121
10.4	点状磁性散乱体の格子状配置	126
10.4.1	スピンの観測方向の回転	126
10.4.2	$M_x$ または $M_y$ のみがある場合	127
10.4.3	コンダクタンスのスピン分極率	131
10.4.4	点状磁性散乱体の格子状配置スピンフィルター	131

<b>第 11 章 有限要素法</b>	<b>133</b>
11.1 ガラーキン法	133
11.2 変分法との比較	135
11.3 境界条件	135
11.4 リード線の取り扱い	136
11.5 Delaunay 三角形分割	138
11.5.1 Delaunay 三角形分割とは	138
11.5.2 Delaunay 三角形分割の判定条件	138
11.5.3 アルゴリズム	140
11.6 係数行列	140
11.6.1 1 次要素	141
11.6.2 2 次要素	144
11.7 ポイントコンタクト	145
11.8 磁性ポイントコンタクト	147
<b>第 12 章 一様磁場がある場合の有限要素法</b>	<b>149</b>
12.1 弱形式	149
12.2 境界条件	149
12.3 解の信頼性	151
12.3.1 解の収束性	151
12.3.2 確率の保存	153
12.3.3 波動関数の位相	153
12.4 ゲージによる違い	156
12.5 任意形状量子ドット	158
12.6 AB リング	159
12.7 ポイントコンタクト	166
12.7.1 ゼーマンエネルギーを考慮しない場合	166
12.7.2 ゼーマンエネルギーを考慮した場合	168
<b>第 13 章 ラッシュバスピ軌道相互作用がある場合の有限要素法</b>	<b>171</b>
13.1 弱形式	171
13.2 境界条件	172
13.3 量子細線モデル	173
13.4 ポイントコンタクト	174
13.5 ラッシュバ項とドレッシェルハウス項の比較	184
13.6 計算精度の検討	186
13.7 一様磁場中にラッシュバスピ軌道相互作用がある場合の伝導特性	188
<b>第 14 章 結言</b>	<b>192</b>

# 第1章 はじめに

近年、半導体微細加工技術の急速な発展により、電子デバイスの性能は飛躍的に向上した。それに伴い電子機器、なかでもコンピュータの性能は以前では考えられないほど向上しており、現在の爆発的な情報産業の発展を支えている。このように、コンピュータは性能が向上するほどその用途が広がり、さらなる高性能が期待される。

しかしながら最近、その性能の向上にも陰りが見え始めている。これまで、CPUやICなどの電子デバイスは、マクロ的な挙動を仮定した上で集積率を高めることによって、より高速に動作し、かつエネルギーの消費量も少なくなってきた。その線幅はすでに60nm、そして45nmと原子数百個程度の大きさにまでなってきている。この大きさは、既にマクロではなくマクロとマイクロの間であるメゾスコピック系の領域に入りつつある。このため、電子の位相を考慮しないオームの法則は成り立ち無くなり、これまでの電子デバイスの動作原理は崩壊する。

そこで、メゾスコピック系で成り立つ新たな動作機構が数多く提案され、さまざまな研究が行われている。しかしながら、メゾスコピック系は系全体に電子の波動関数が広がっており、非常に系の形に敏感である。そのため、試料ごとに結果が異なることがあり、より普遍的な物理現象を利用した動作機構が求められている。

そこで、本研究ではメゾスコピック系でのスピントロニクスデバイスの解析を行う。スピントロニクスは電子の電荷に加え、電子のスピンを利用した新たなデバイスの研究を行う分野であり、近年注目されている。なかでも、金属格子における巨大磁気抵抗効果(GMR)は、ハードディスクのヘッドに利用され、ヘッドの磁気抵抗比を劇的に高めることに成功した。それによりディスクの記憶密度を上げることが可能になり、ハードディスクの大容量化に大きく貢献した。これによって、2007年にグリーンベルクとフェルトはノーベル物理学賞を受賞している。また、トンネル磁気抵抗効果(TMR)は次世代のメモリといわれているMRAMに利用され、すでに量産が始まっている。[1]

本研究では、メゾスコピック系における任意形状の系の電子のスピン状態を考慮した量子伝導特性の解析を行う。メゾスコピック系は、非常にクリーンであるため系全体でコヒーレンスであり、スピン緩和時間も十分に長い。そのため、系内部でスピンの操作を行い、それを観測できればスピンを利用したさまざまなデバイスの開発が期待される。[2, 3, 4, 5] また、スピンはアップスピンとダウンスピン、2つの状態しか持たないため、それらを0と1に見立てれば電子一つで動作するデバイスも作製できる可能性がある。

このようなスピンを操作する効果として、本研究では磁化スピン相互作用とラッシュバスピ軌道相互作用を想定する。まず、磁化スピン相互作用の研究では、半導体中に磁化を導入し、その局在磁気モーメントと伝導電子とのスピン間の相互作用により生じるスピン反転やスピン分極の解析を行う。磁化を持ちいたすピント路に楠デバイスのデバイスの特徴として、外部磁場により磁化の向きを変えることが出来るため、試料を作成した後でも

スピンへの作用を変えることが出来るという点がある。[7, 8, 9]

また、ラシュバスピ軌道相互作用は、2次元電子系に外部電場を印可することによる対称性の乱れを原因とした相対論的な効果である。デバイスの応用への利点として、磁場ではなく電場によりその強さを制御できるため、扱いやすい。なかでも Datta と Das により提案されたスピン FET は、ドレインとソース電極に磁性体を導入しソース電極よりスピン注入させ、ゲート電圧によってラシュバスピ軌道相互作用の強さを制御してスピン反転を起こしスピン状態を操作する。[6] その後、ドレイン電極の磁化の向きによってアップとダウンスピンでの透過率が変わるため、これによりゲート電圧によってスイッチングを制御するものである。従来の FET とくらべてスピンの向きを変えるだけなので小さなゲート電圧で済み、高速に動作する。そのうえドレインとソース電極の磁性体の磁化の向きを変えることが出来るので、これを利用して新たな論理回路を作ることも可能である。

メゾスコピック系にこれら2つの効果を導入した場合の数値解析を行う。また、メゾスコピック系では、系の形状が伝導に大きく影響するため任意の形状に対応した数値計算が必要である。任意形状の計算では、これまで強束縛近似や波束を入射しその時間発展を見るウェーブパケット法など近似的な計算は行われているが、有限要素法や境界要素法と言った支配方程式を直接解く方法はあまり用いられてこなかった。

そこで、本研究では、有限要素法や境界要素法を用いて、任意形状の系を持つ2次元電子系に一樣磁場や磁化スピン相互作用および、ラシュバスピ軌道相互作用がある場合の電子伝導特性の解析を行う。このような電子のスピンを考慮した有限要素法、そして境界要素法はこれまでにないものである。メゾスコピック系において、境界要素法を用いた場合は、系の支配方程式とそれに対応するグリーン関数から境界積分方程式を立て、境界上の積分を実行することにより内部の未知変数を計算する。一方、有限要素法の場合は、波動関数と試行関数とを形状関数を基底として展開し、それらにより作られる汎関数の停留を求めることによって、節点での波動関数を求める。境界要素法は境界の離散化のみで良いため、系全体を離散化する有限要素法と比べて、次元が一つ小さく、そのためメモリーの使用量が少なくすむ。よって、大きなメモリー量を要求する大規模かつエネルギーの大きな計算においては、境界要素法の方が有利である。そこで、磁化スピン相互作用がある場合については、境界要素法を用いる。本研究では境界要素法を複数の任意形状、もしくは点状の磁性散乱体が含まれる系にも適用できるように拡張する手法を提案する。

つぎに、ラシュバスピ軌道相互作用については、有限要素法を用いる。これは、境界要素法を適用するにはグリーン関数が必要であるが、ラシュバスピ軌道相互作用がある場合には、グリーン関数が分からないため適用できないためである。また有限要素法は、ほとんどの微分方程式に対応でき、古くから多くの分野で用いられている計算手法である。それにもかかわらず、これまでメゾスコピック系で有限要素法を用いた解析はほとんど行われていない。特に、磁場がある場合を実際に解析を行った例はほぼないものと思われる。そこで、本研究では、まず一樣磁場がある場合の有限要素法による解析を行い、AB リングやランダム形状の量子ドットなどの計算例を示す。その後、ラシュバスピ軌道相互作用を導入したポイントコンタクトでの計算結果を示す。

## 第2章 メゾスコピック系の電子輸送

### 2.1 メゾスコピック系とは

近年の微細加工技術の発達により、平均自由行程と同じオーダーの試料の作成、およびその電気抵抗等の測定が可能となった。そのような系ではマクロスコピックな系とは異なる電子伝導特性が期待され、マクロとマイクロの間という意味でメゾスコピック系 [10] と呼ばれている。そこでまず最初にマクロスコピック系での電子伝導現象について簡単に説明し、次にメゾスコピック系との違いを述べる。

#### 2.1.1 ドリフト速度とフェルミ速度

マクロスコピックな系において、電子は多数のフォノンなどの散乱体により散乱されある終端速度で移動していると考えられる。今、電界  $E$  中に有効質量  $m^*$  の電子がある時の運動方程式は

$$m^* \frac{dv_D}{dt} = -eE - kv \quad (2.1.1)$$

で表せる。ただし、 $v_D$  は電子の電界によるドリフト速度で  $k$  は散乱体による抵抗の比例係数である。これを解くと

$$v_D = -\frac{e}{k} (1 - \exp(-\frac{k}{m^*} t)) \quad (2.1.2)$$

となる。定常状態を考え  $t \rightarrow \infty$  とすれば

$$v_D = -\frac{e}{k} E \quad (2.1.3)$$

ここで数回の散乱により運動量が失われるまでの時間を  $\tau_m$  とし、散乱により運動量が完全に失われるとしたときの失われる運動量と、その間に外場から得られる力積が等しいと考えられるので

$$-m^* v_D = eE \tau_m \quad (2.1.4)$$

となり、(2.1.3) 式より  $k = m^*/\tau_m$  となる。よってドリフト速度  $v_D$  は

$$v_D = -\frac{e\tau_m}{m^*} E = -\mu E \quad (2.1.5)$$

と表せる。ここで  $\tau_m$  は運動量緩和時間、 $\mu$  は移動度と呼ばれる。また電流密度  $j_{drift}$  は

$$j_{drift} = -nev_D = \frac{ne^2\tau_m}{m^*} E = \sigma E \quad (2.1.6)$$



となりオームの法則が成り立つ。 $n$ は伝導に寄与する単位体積あたりの電子数、 $\sigma$ は電気伝導率である。

ところで、電子は電界による運動だけではなくドリフト速度と比べて非常に速い速度でランダムな方向に運動している。ここで、伝導に寄与するのはフェルミエネルギー  $E_f$  近くのエネルギーを持つ電子なので

$$E_f = \frac{1}{2} m^* v_F^2 \quad (2.1.7)$$

より、電子はこのフェルミ速度  $v_F$  程度の速度で散乱体間を運動し散乱によりランダムな運動をしている。

また、電子が散乱により運動量が失われるまでの平均の距離である平均自由行程は

$$l_m = v_F \tau_m \quad (2.1.8)$$

と表せる。

よって、マクロスコピックに見れば電子は全体としてはドリフト速度で移動しているが、ミクロでは散乱体と散乱体の間をフェルミ速度で移動し散乱されランダムな運動をしている。

### 2.1.2 状態密度とフェルミ分布

フェルミエネルギー  $E_f$  が与えられたとき、電子の分布はフェルミ分布で与えられる。

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} \quad (2.1.9)$$

十分に温度が低い場合、 $E - E_f \gg k_B T$  とすれば (2.1.9) 式はボルツマン分布となり、

$$f_0(E) \approx \exp\left(\frac{-(E - E_f)}{k_B T}\right) \quad (2.1.10)$$

となる。さらに温度を低くし、 $T$  を  $0K$  近くまで下げるとステップ関数となり、

$$f_0(E) \approx \theta(E_f - E) \quad (2.1.11)$$

となる。また、2.1.4 節でも述べるがメゾスコピック系の実験の多くがフォノンによる散乱を少なくするためこのような低温で行われる。

2次元系の状態密度は  $\pi k^2$  の中に

$$\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} = \frac{4\pi^2}{S} \quad (2.1.12)$$

がいくつ含まれているかを考え、スピンの縮退を考慮して含まれる全ての状態の数は

$$N_T(E) = 2 \times \frac{\pi k^2}{4\pi^2/S} = S \frac{k^2}{2\pi} = \frac{mS}{\pi \hbar^2} E \quad (2.1.13)$$

となる。ただし、 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ とした。状態密度は単位面積、単位エネルギーあたりの電子数なので

$$N(E) = \frac{1}{S} \frac{dN_T(E)}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \quad (2.1.14)$$

で与えられる。同様にして1次元系の状態密度は

$$N_T(E) = 2 \times \frac{2k}{2\pi/L} = \frac{2\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} \quad (2.1.15)$$

であるので

$$N(E) = \frac{1}{L} \frac{dN_T(E)}{dE} = \frac{2}{\pi\hbar v} \quad (2.1.16)$$

となる。ただし、 $v = \frac{\hbar k}{m}$ である。

ところで、極低温での2次元系の電子密度は(2.1.11)式と(2.1.14)式よりバンドの底のエネルギーを $E_s$ とすれば

$$n_s = \int_{E_s}^{\infty} N(E) f_0(E) dE = \frac{m}{\pi\hbar^2} (E_f - E_s) \quad (2.1.17)$$

となる。

また、ボルツマン分布で与えられるときは(2.1.10)式より

$$n_s = \frac{m}{\pi\hbar^2} \frac{\exp\left(\frac{-E_s - E_f}{k_B T}\right)}{k_B T} \quad (2.1.18)$$

となる。

### 2.1.3 拡散電流とアインシュタインの関係式

試料中に電子の濃度勾配があり、それによる拡散電流を考える。試料の左端でのフェルミエネルギーを $\mu_1$ 、右端を $\mu_2$ とすればこのエネルギーの間にある電子密度は極低温であれば(2.1.17)式より $N_s = \frac{m}{\pi\hbar^2}$ として

$$n = N_s(\mu_1 - \mu_2) \quad (2.1.19)$$

であり試料の長さを $L$ 、拡散係数を $D$ とすれば拡散電流 $j$ は

$$j_{diff} = -eD\nabla n = -e^2 D N_s \frac{\mu_1 - \mu_2}{eL} = -e^2 D N_s E \quad (2.1.20)$$

で与えられる。

定常状態ではドリフト電流(2.1.6)式と拡散電流(2.1.20)式が釣り合うと考えられるので $j_{drift} + j_{diff} = 0$ とすれば

$$D = \frac{\mu}{e} \frac{n_s}{N_s} = \frac{\mu}{e} (\mu_1 - \mu_2) \quad (2.1.21)$$

となる。

また、分布がボルツマン分布で与えられるとき (2.1.19) 式は (2.1.18) 式より

$$n = \frac{N_s}{k_B T} \exp\left(\frac{-(\mu_1 - \mu_2)}{k_B T}\right) \quad (2.1.22)$$

であるので同様にすれば (2.1.21) 式は

$$D = \mu \frac{k_B T}{e} \quad (2.1.23)$$

となる。この拡散係数と移動度との間に成り立つ関係をアインシュタインの関係式という。

#### 2.1.4 位相干渉長

ここまでは電子が散乱により失われるのは運動量のみとしてきた。この場合には不純物等による散乱が全て弾性散乱であり、他の散乱がないものとすれば干渉性が保れる。しかし、実際にはフォノンやクーロン相互作用により非弾性散乱も起きる。そこで、電子が数回の非弾性散乱によりその位相の記憶を失う、つまり干渉性が失われるまでの時間を  $\tau_\varphi$  とすればその位相干渉長は 1 回のステップで平均自由行程  $l_m$  だけ進むランダムウォークと考えられる。位相干渉長を  $l_\varphi$  とすれば  $\tau_\varphi/\tau_m$  回のステップの分散で与えられるので

$$l_\varphi^2 = \frac{\tau_\varphi}{\tau_m} l_m^2 \langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{v_f^2 \tau_m \tau_\varphi}{2} \quad (2.1.24)$$

となる。ただし、 $\langle \rangle$  は統計平均を表し

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 \theta d\theta = \frac{1}{2} \quad (2.1.25)$$

である。さらに、(2.1.21) 式より

$$l_\varphi^2 = D \tau_\varphi \quad (2.1.26)$$

となる。

温度が低ければフォノンによる影響が少なくなるので  $\tau_\varphi$  は大きくなる。また、(2.1.21) 式より電子濃度が高ければ  $D$  も大きくなる。つまり、位相干渉長  $l_\varphi$  は低温で高濃度であれば長くなり、より大きな試料においても干渉効果が起こるようになる。

#### 2.1.5 メゾスコピック系の分類

ミクロスコピックな系とはフェルミ波長  $\lambda_f$  と同程度の系である。またマクロスコピックな系とは平均効果が生じる、つまり位相干渉長  $l_\varphi$  よりも十分に大きな系のことである。このミクロとマクロの間はメゾスコピック系と呼ばれている。つまり、系の長さを  $L$  とすれば

$$\begin{aligned} \text{ミクロスコピック系} & L \leq \lambda_f \\ \text{メゾスコピック系} & \lambda_f < L \leq l_\varphi \\ \text{マクロスコピック系} & l_\varphi \leq L \end{aligned}$$

と分類できる。

また、メゾスコピック系はその特徴的な長さに注目すればさらに細分化できる。もし、系が平均自由行程  $l_m$  よりも小さければ電子は全く散乱されずに流れることになる。この領域をバリスティック領域という。散乱されないのでランダムウォークによる拡散はなくなり位相干渉長 (2.1.26) 式は、

$$l_\varphi = v_f \tau_\varphi \quad (2.1.27)$$

となる。

次に系に散乱体を導入しいくつかの散乱体により散乱され拡散が起きている領域を拡散領域という。さらに散乱体を増やし多数の散乱体により散乱され局在が起きる領域を局在領域という。

それぞれを特徴的な長さによってまとめると

バリスティック領域	$\lambda_f < L \leq l_m$
拡散領域	$l_m < L \leq l_l$
局在領域	$l_l < L \leq l_\varphi$

となる。ただし、 $l_l$  は局在長である。

## 2.2 Landauer の公式

### 2.2.1 2次元電子ガス

近年、メゾスコピック系の実験の多くが GaAs と AlGaAs のヘテロ界面上に形成される 2次元電子ガスを用いて行われている。構造図を図 2.1 に示す。

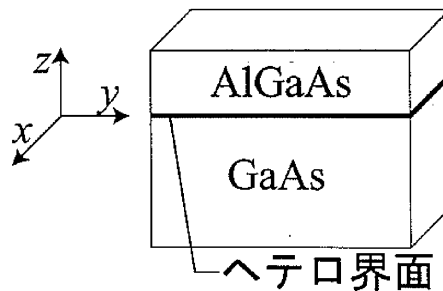


図 2.1: GaAs/AlGaAs ヘテロ結合

図 2.2 は結合前のバンドを模式的に書いたものであるが Si を添加し n 型にした AlGaAs は絶縁体でありワイドギャップになっている。また、真性半導体である GaAs は AlGaAs と比べてナローギャップである。

これらを結合するとフェルミエネルギーをそろえようと n-AlGaAs から GaAs へと電子が流れ出し、n-AlGaAs の界面近くにイオン化したドナーを残す。この影響により GaAs の界面近くに Z 軸方向に静電ポテンシャルが生じ電子を閉じこめる。ただし、X-Y 平面上

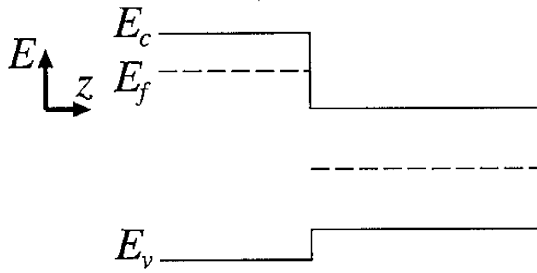


図 2.2: 結合前のバンド図

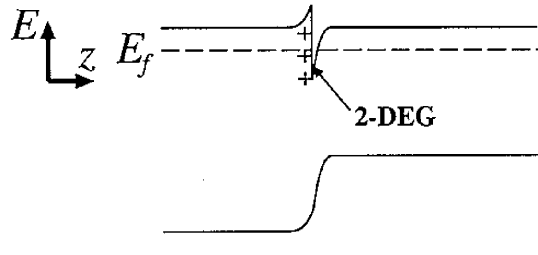


図 2.3: 結合後のバンド図

では電子は自由に動ける。この層が2次元電子ガスである。また、これを用いた FET は HEMT と呼ばれている。

この構造の特徴はチャネルが真性半導体上に形成されることであり、MOSFET のような不純物を添加した半導体にチャネルがある場合と比べて非常に高い移動度が得られる。

実際に平均自由行程は温度にもよるが金属では  $10 \sim 100 \text{ \AA}$ 、Si-MOSFET の界面電子系では  $400 \text{ \AA}$  以下、GaAs/AlGaAs 界面電子系では  $1 \sim 10 \mu\text{m}$  と4桁以上も大きな平均自由行程が得られる。

### 2.2.2 サブバンド

ポテンシャルを  $(x, y)$  の関数と  $z$  の関数とに分離できるとき、自由電子の Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = (V_{\perp}(x, y) + V_z(z)) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.2.1)$$

とかける。 $\psi(\mathbf{r})$  を変数分離し、 $\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\perp}(x, y) \psi_z(z)$  とすれば

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_{\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_{\perp} + V_{\perp} \right] + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_z + V_z \right] = E \quad (2.2.2)$$

である。ここで、(2.2.2) 式の左辺最初のカッコは  $(x, y)$  のみの関数であり2番目のカッコは  $z$  のみの関数である。また、右辺は定数であるので  $x, y, z$  が任意の変数であることを考えれば

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_{\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_{\perp} + V_{\perp} \right] = E_{\perp} \quad (2.2.3)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi_z + V_z \right] = E_z \quad (2.2.4)$$

と変数分離でき、また

$$E = E_{\perp} + E_z \quad (2.2.5)$$

である。

2次元電子界面において電子は  $xy$  平面では自由に動けるが  $z$  軸方向では閉じこめられている。

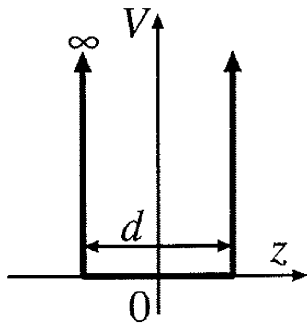


図 2.4: 井戸型ポテンシャル

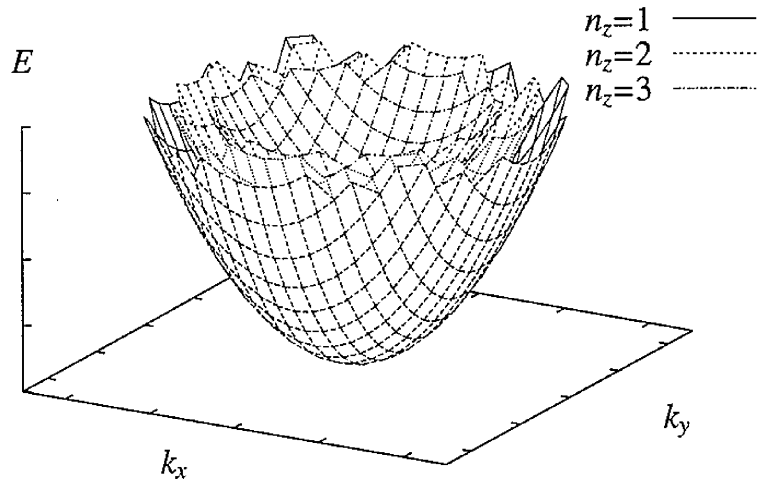


図 2.5: エネルギーサブバンド

つまり、 $V_x = 0$  で  $V_z$  は図 2.4 のような井戸型のポテンシャルであると考えられるので  $E_z$  が離散化され

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n_z \pi}{d} \right)^2 \quad (2.2.6)$$

となる (図 2.5)。ここで、 $k_x, k_y$  は  $x, y$  方向の波数で  $d$  は井戸の幅、 $n_z = 1, 2, 3, \dots$  である。

さらに、図 2.6 のように  $y$  軸方向にも井戸型の閉じこめポテンシャルを作れば電子は  $x$  軸方向のみ自由に動けることになる。この非常に細い導線を量子細線という。通常、 $z$  軸方向のポテンシャルはかなりシャープであり  $n_z = 1$  のモードのみをとる。このときのエネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n_y \pi}{w} \right)^2 + E_{z1} \quad (2.2.7)$$

$$E_{z1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{d} \right)^2$$

となる。 $w$  は  $y$  軸方向の細線の幅、 $n_y = 1, 2, 3, \dots$  である。また、 $y$  軸方向の閉じこめポテンシャルが調和振動子型ならば

$$V_y(y) = V_0 \left( \frac{y}{w/2} \right)^2 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2 \quad (2.2.8)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{8V_0}{m}} \frac{1}{w} \quad (2.2.9)$$

という形でありこのときのエネルギーは

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 + \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 + E_{z1} \quad (2.2.10)$$

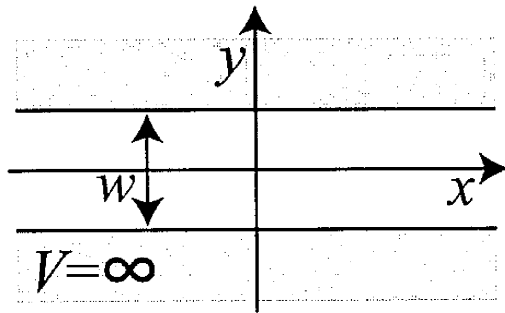


図 2.6: 量子細線

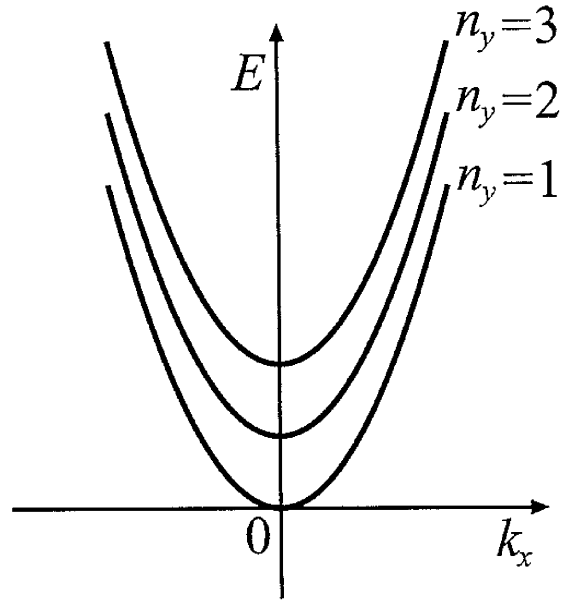


図 2.7: 量子細線のサブバンド

となり (図 2.7)、エネルギー間隔は一定間隔になる。

また、 $y$  軸方向のポテンシャルもシャープにし  $n_y = 1$  のみのモードをとるようにすれば 1 次元導体となる。それに対して  $n_y$  が 1 だけではなくいくつかのモードをとれる場合を擬 1 次元系という。

### 2.2.3 1 次元系の Landauer の公式

メゾスコピック系は位相干渉長よりも十分に小さいので電流の表式は 2.1.1 章のような平均効果を考えている場合とは全く違ったものになると考えられる。電流と電流の相関から系の conductivity を求める一般的な式として久保公式 [11] がある。久保公式は無限に大きい系を想定し電子間相互作用、電子格子相互作用等があっても成り立つ。しかしながら、メゾスコピック系は当然有限な系であるので左右につけたリザーバ (電子溜め) を無限に大きいものとしてそれを含めて考えればよい。さて、この久保公式に対して電子間相互作用や電子格子相互作用を考えない直感的な公式として Landauer の公式がある。それではこの Landauer の公式を図 2.8 のように試料 (conductor) の左右にリード線 (量子細線) をつけリザーバ (contact) を介して電流を流した場合を考え導出しよう。ここで、リザーバは十分に幅が広くエネルギーが連続的であり少しくらい電流が流れても熱平衡状態のままであるものとする。また、試料をエネルギー  $\epsilon$  の電子が透過する確率  $T(\epsilon)$  は左から右に透過しても、逆に右から左に透過した場合でも同じとする。すると、このときの試料を通り抜ける全電流  $I$  は右向きを正として電流が流れるためには透過した側の状態が空いていな

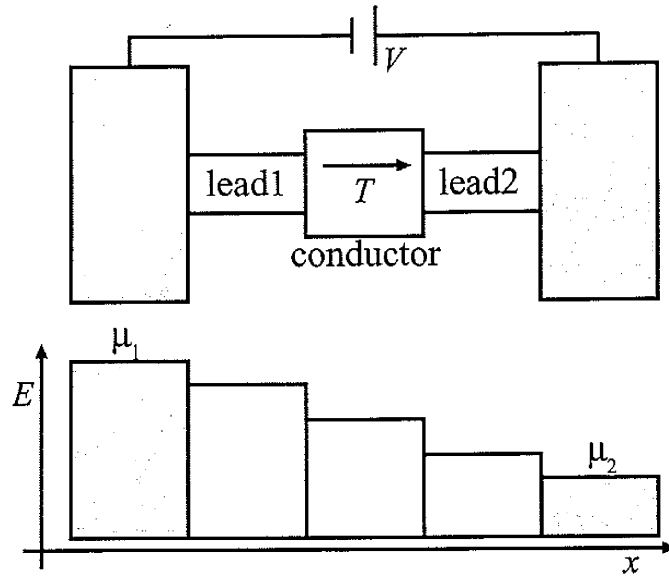


図 2.8: 1次元導体

ければならないので

$$I = \int_0^\infty T(\epsilon) f_0(\epsilon - \mu_1) (1 - f_0(\epsilon - \mu_2)) v(\epsilon) \frac{1}{2} N(\epsilon) d\epsilon - \int_0^\infty T(\epsilon) f_0(\epsilon - \mu_2) (1 - f_0(\epsilon - \mu_1)) v(\epsilon) \frac{1}{2} N(\epsilon) d\epsilon \quad (2.2.11)$$

となる。ここで、 $f_0(\epsilon)$  はフェルミ分布関数、 $v(\epsilon)$  は群速度であり  $N(\epsilon)$  は状態密度である。1次元の状態密度は

$$N_T(\epsilon) = \frac{1}{L} \frac{2k}{2\pi} = \frac{k}{\pi} \\ N(\epsilon) = \frac{\partial N_T}{\partial \epsilon} = \frac{\partial N_T}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial \epsilon} = \frac{1}{\pi} \frac{\partial k}{\partial \epsilon} \quad (2.2.12)$$

であるが、この場合  $k_x$  が正の向きのみをとっているため  $N(\epsilon)$  が半分となる。(2.2.11) 式の  $1/2$  はそのためにかけてある。また、 $v(\epsilon)$  は群速度であるので

$$v(\epsilon) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k} \quad (2.2.13)$$

であることから (2.2.11) 式は

$$I = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty T(\epsilon) (f_0(\epsilon - \mu_1) - f_0(\epsilon - \mu_2)) d\epsilon \quad (2.2.14)$$

となる。ここで、両端のポテンシャル差  $e\Delta V = \mu_1 - \mu_2$  が十分に小さいので

$$f_0(\epsilon - \mu_1) = f_0(\epsilon - \mu_2 - e\Delta V) \sim f_0(\epsilon - \mu_2) + \left. \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon = \epsilon - \mu_2} (-e\Delta V) + \dots \\ f_0(\epsilon - \mu_1) - f_0(\epsilon - \mu_2) \sim - \left. \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon = \epsilon - \mu_2} e\Delta V \quad (2.2.15)$$



と近似できる。これにより (2.2.14) 式は

$$I = \frac{e^2}{h} \Delta V \int_{\mu_2}^{\infty} T(\epsilon) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \quad (2.2.16)$$

となり、コンダクタンス  $g$  はスピンの自由度を考慮して 2 倍すれば

$$g = \frac{2e^2}{h} \int_{\mu_2}^{\infty} T(\epsilon) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \quad (2.2.17)$$

で表せる。極低温であれば (2.1.11) 式より

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = \delta(\epsilon - \epsilon_f) \quad (2.2.18)$$

であるのでコンダクタンスは

$$g = \frac{2e^2}{h} T(E_f) \quad (2.2.19)$$

となる。この式よりバリスティック領域においてコンダクタンスは透過率がわかれば求められることがわかる。

## 2.2.4 擬 1 次元系の Landauer の公式

それでは図 2.9 のように試料に擬 1 次元系を接続した系では Landauer の公式はどのようになるだろうか。

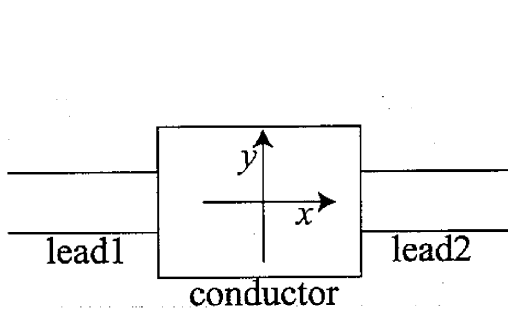


図 2.9: 擬 1 次元系の伝導

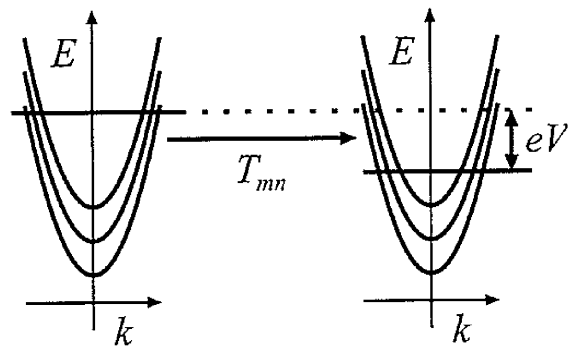


図 2.10: サブバンド  $n$  からサブバンド  $m$  へ透過確率  $T_{mn}$  で流れる

擬 1 次元系においてはリード線でエネルギーが離散化されるのでそれぞれのモードからそれぞれのモードへ伝導することが考えられる。このとき、左側のリード線での波動関数  $\Psi_1$  と右側のリード線の波動関数  $\Psi_2$  は左側から振幅 1 でモード  $n$  でそれぞれ入射したと

すれば

$$\Psi_1 = \sum_n \Psi_{1n} \quad (2.2.20)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{1n} = & e^{ik_n x} \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{n\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \sqrt{\frac{2}{l_z}} \sin\left(\frac{\pi}{l_z}\left(z + \frac{l_z}{2}\right)\right) \\ & + \sum_m r_{mn} e^{-ik_m x} \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{m\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \sqrt{\frac{2}{l_z}} \sin\left(\frac{\pi}{l_z}\left(z + \frac{l_z}{2}\right)\right) \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

$$\Psi_2 = \sum_n \Psi_{2n} \quad (2.2.22)$$

$$\Psi_{2n} = \sum_m t_{mn} e^{ik_m x} \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{m\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \sqrt{\frac{2}{l_z}} \sin\left(\frac{\pi}{l_z}\left(z + \frac{l_z}{2}\right)\right) \quad (2.2.23)$$

である。 $l_z$  は  $z$  軸方向の細線の幅である。ただし、 $l = n, m$  とすれば

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( k_l^2 + \left(\frac{l\pi}{d}\right)^2 \right) \quad (2.2.24)$$

である。このときの電流は確率の流れの式より

$$i_{1n} = \frac{i\hbar}{2m^*} \int_{-\frac{l_z}{2}}^{\frac{l_z}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \left( \Psi_{1n} \left( \frac{\partial \Psi_{1n}}{\partial x} \right)^* - \Psi_{1n}^* \left( \frac{\partial \Psi_{1n}}{\partial x} \right) \right) dy dz \quad (2.2.25)$$

$$i_{2n} = \frac{i\hbar}{2m^*} \int_{-\frac{l_z}{2}}^{\frac{l_z}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \left( \Psi_{2n} \left( \frac{\partial \Psi_{2n}}{\partial x} \right)^* - \Psi_{2n}^* \left( \frac{\partial \Psi_{2n}}{\partial x} \right) \right) dy dz$$

となる。これらは直交関係からきれいにまとめることができ

$$i_{1n} = \frac{\hbar}{m^*} \left( k_n - \sum_m |r_{mn}|^2 k_m \right) \quad (2.2.26)$$

$$i_{2n} = \frac{\hbar}{m^*} \left( \sum_m |t_{mn}|^2 k_m \right) \quad (2.2.27)$$

となる。ここで、電流保存則から  $i_{1n} - i_{2n} = 0$  が成り立たなくてはならないから

$$\sum_m |r_{mn}|^2 \frac{k_m}{k_n} + \sum_m |t_{mn}|^2 \frac{k_m}{k_n} = 1 \quad (2.2.28)$$

が成り立つ必要がある。このことから (2.2.28) 式は確率の保存を与えていてモード  $n$  からモード  $m$  への透過確率を  $T_{mn}$ 、反射確率を  $R_{mn}$  とすれば

$$T_{mn} = |t_{mn}|^2 \frac{k_m}{k_n} \quad (2.2.29)$$

$$R_{mn} = |r_{mn}|^2 \frac{k_m}{k_n} \quad (2.2.30)$$

$$T_n = \sum_m T_{mn} \quad (2.2.31)$$

$$R_n = \sum_m R_{mn} \quad (2.2.32)$$

$$T_n + R_n = 1 \quad (2.2.33)$$

と表すことができる。よって、(2.2.26) 式と (2.2.27) 式は

$$i_{1n} = i_{2n} = \frac{\hbar k_n}{m^*} T_n = \frac{\hbar k_n}{m^*} (1 - R_n) \quad (2.2.34)$$

となり、電流は群速度に透過確率をかけたもので表される。さて、この電流の式を使って擬1次元系を流れる電流を導こう。それぞれのチャネルでは電子は独立に流れていて1次元系と見なすことができるので  $n$  チャネルの状態密度、群速度は

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= \frac{(\hbar k_n)^2}{2m^*} \\ N_n(\epsilon) &= \frac{1}{\pi} \frac{\partial k_n}{\partial \epsilon_n} \\ v_n(\epsilon) &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial k_n} \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

となる。よって、トータルの電流  $I$  は

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty \sum_n e i_{2n}(\epsilon) f_0(\epsilon - \mu_1) (1 - f_0(\epsilon - \mu_2)) \frac{1}{2} N_n(\epsilon) d\epsilon \\ &\quad - \int_0^\infty \sum_n e i_{2n}(\epsilon) f_0(\epsilon - \mu_2) (1 - f_0(\epsilon - \mu_1)) \frac{1}{2} N_n(\epsilon) d\epsilon \\ &= \int_0^\infty \sum_n T_n(\epsilon) f_0(\epsilon - \mu_1) (1 - f_0(\epsilon - \mu_2)) e v_n(\epsilon) \frac{1}{2} N_n(\epsilon) d\epsilon \\ &\quad - \int_0^\infty \sum_n T_n(\epsilon) f_0(\epsilon - \mu_2) (1 - f_0(\epsilon - \mu_1)) e v_n(\epsilon) \frac{1}{2} N_n(\epsilon) d\epsilon \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

となる。これは、(2.2.11) 式と同じ形であるので同様にして変形することができ (2.2.17) 式に対応したコンダクタンスが

$$g = \frac{2e^2}{h} \int_{\mu_2}^\infty \sum_n T_n(\epsilon) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \quad (2.2.37)$$

となり、さらに極低温であれば

$$g = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(E_f) \quad (2.2.38)$$

が成り立つ。

## 2.2.5 コンダクタンスの量子化

さて、極低温であれば擬1次元系のコンダクタンスは (2.2.38) 式で与えられることがわかった。さらにバリスティック領域であれば散乱されることがないので反射確率が0になり  $T_n(E_f) = 1$  となる。すなわち、

$$g = \frac{2e^2}{h} N \quad (2.2.39)$$

となりモードの総数  $N$  に比例する。(2.2.10) 式や図 2.7 より  $\hbar\omega_0$  ごとにモードの総数が増えるのでコンダクタンスは量子化され図 2.11 のようになる。

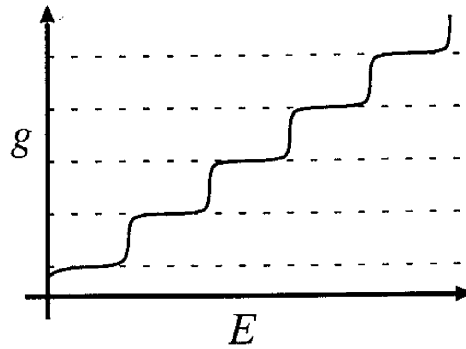


図 2.11: コンダクタンスの量子化 [12]

### 2.2.6 2端子測定と4端子測定の違い

ところで、(2.2.19) 式や (2.2.38) 式をみて違和感を感じないだろうか。直感的に考えると  $T(E_f) = 1$  もしくは  $T_n(E_f) = 1$  であれば透過確率が 1 であり抵抗がないと思われる。しかし、これらの式では  $1/g = h/2e^2$  となり有限の値である。この原因はどこで抵抗を測定しているかによる。もともとの Landauer が導いた公式 [13] は図 2.12 のような状況を想

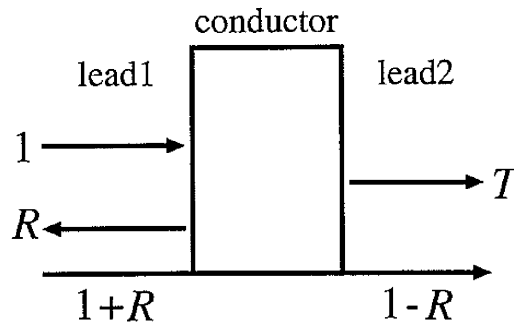


図 2.12: 2端子測定

定し、試料による反射確率を  $R$  とすれば試料の左側での電子密度が  $(1 + R)n$  で右側での電子密度が  $(1 - R)n$  となりそのときの拡散方程式は

$$j_{diff} = -eD\nabla n = -eDn \frac{(1 + R) - (1 - R)}{L} = -eDn \frac{2R}{L} \quad (2.2.40)$$

となる。また、ドリフト電流は試料を通り抜けた電子を考えればよいので

$$i_{drift} = n(1 - R)ev \quad (2.2.41)$$

となる。アインシュタインの関係式の時と同様にこれらが釣り合うことから拡散係数  $D$  は

$$D = \frac{vL(1 - R)}{2R} \quad (2.2.42)$$

となる。このときのコンダクタンス  $g$  は (2.1.20) 式と (2.1.16) 式より

$$g = \frac{e^2 DN_s}{L} = e^2 \frac{2}{\pi \hbar v} \frac{v(1-R)}{2R} = \frac{2e^2}{h} \frac{1-R}{R} \quad (2.2.43)$$

となる。

(2.2.19) 式と (2.2.43) 式は両方とも試料の抵抗を測ったものであるが異なった表式である。この原因はどこで抵抗を測定しているかということであり、(2.2.19) 式は図 2.8 での左右の contact に電流を流し左右のリード線での電圧を測定する 4 端子測定であるのに対して、(2.2.43) 式は左右のリード線で電流も電圧も測定する 2 端子測定なのである。このことから、もし  $R=0$  とすれば (2.2.43) 式は発散し直感と一致する。また、

$$g^{-1} = \frac{h}{2e^2} \frac{1}{T} = \frac{h}{2e^2} + \frac{h}{2e^2} \frac{1-T}{T} = G_c^{-1} + G_s^{-1} \quad (2.2.44)$$

とすれば  $G_s^{-1}$  が実際の試料の抵抗であり  $G_c^{-1}$  が残留抵抗であると理解できる。この残留抵抗は、連続な状態を持つリーザバから離散的な状態を持つリード線に入射する際に生じる接触抵抗であると考えられる。

## 2.2.7 複数の端子がある場合の S 行列

図 2.13 のような試料に複数の端子をつけた場合を S 行列を使って考える。ここで全端

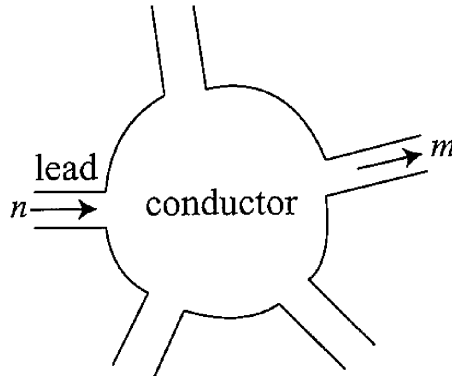


図 2.13: 多端子回路

子のそれぞれのモードを 1 つのチャネルとして考え、あるチャネル  $n$  からあるチャネル  $m$  への透過確率を  $T_{mn}$  とする。このとき、S 行列は

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_M \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_M \end{bmatrix}, \mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1M} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{M1} & s_{M2} & \cdots & s_{MM} \end{bmatrix} \quad (2.2.45)$$

とすれば

$$\mathbf{b} = \mathbf{S} \mathbf{a} \quad (2.2.46)$$

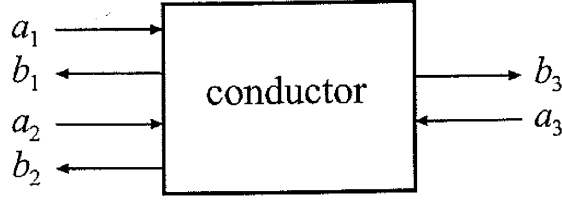


図 2.14: S 行列

となる。ただし  $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$  はある入射チャンネル、透過チャンネルでの振幅に波数の平方根をかけたものであり電流を表す。また、合計総チャンネル数を  $M$  とした。たとえば (2.2.21) 式、(2.2.23) 式を S 行列で表せば

$$\begin{bmatrix} t_{1n}\sqrt{k_1} \\ \vdots \\ t_{nn}\sqrt{k_n} \\ \vdots \\ t_{Mn}\sqrt{k_M} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11}\sqrt{\frac{k_1}{k_1}} & t_{12}\sqrt{\frac{k_1}{k_2}} & \cdots & t_{1M}\sqrt{\frac{k_1}{k_M}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1}\sqrt{\frac{k_n}{k_1}} & t_{n2}\sqrt{\frac{k_n}{k_2}} & \cdots & t_{nM}\sqrt{\frac{k_n}{k_M}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{M1}\sqrt{\frac{k_M}{k_1}} & t_{M2}\sqrt{\frac{k_M}{k_2}} & \cdots & t_{MM}\sqrt{\frac{k_M}{k_M}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \sqrt{k_n} \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.2.47)$$

と表せる。また透過確率は

$$T_{mn} = |s_{mn}|^2 \quad (2.2.48)$$

で表せ、さらに電流が保存する必要があるので

$$\sum_m |\mathbf{a}_m|^2 = \sum_m |\mathbf{b}_m|^2 \quad (2.2.49)$$

がなりたつから (2.2.46) 式を使って

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} = [\mathbf{S}\mathbf{a}]^\dagger [\mathbf{S}\mathbf{a}] = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} \mathbf{a} \quad (2.2.50)$$

となるので

$$\mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I} \quad (2.2.51)$$

である。これは S 行列のユニタリー性を表しており、また

$$\sum_m^M |s_{mn}|^2 = \sum_m^M |s_{nm}|^2 = \sum_m^M T_{mn} = \sum_m^M T_{nm} = 1 \quad (2.2.52)$$

であることがわかる。端子  $i$  から端子  $j$  への透過確率

$$T_{ji} = \sum_{n \in i, m \in j} T_{mn} \quad (2.2.53)$$

とし、 $M_i$  を  $i$  端子に属するチャンネルの総数とすれば

$$\sum_{n \in i} \sum_m^M T_{mn} = \sum_{n \in i} \sum_m^M T_{nm} = \sum_{n \in i} 1 = M_i \quad (2.2.54)$$

という総和則が成り立ち (2.2.53) 式を用いて表せば

$$\sum_j T_{ji} = \sum_j T_{ij} = M_i \quad (2.2.55)$$

である。

## 2.2.8 透過確率の時間反転対称性

端子  $i$  から端子  $j$  への透過確率  $T_{ji}$  は次のような関係が成り立つ。

$$[T_{ji}]_B = [T_{ij}]_{-B} \quad (2.2.56)$$

ここで  $B$  は系にかかっている磁場である。この関係はもちろん磁場がかかっていないときにも成り立つ。そこで、この関係を磁場がかかっている場合を含めて簡単に示す。時間を含む Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{A}) = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi(t, \mathbf{A}) \quad (2.2.57)$$

であり  $t$  と  $-t$  を入れ替えれば

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(-t, \mathbf{A}) = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi(-t, \mathbf{A}) \quad (2.2.58)$$

である。また (2.2.57) 式の複素共役をとると

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{A})^* = \left[ \frac{(i\hbar \nabla - e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi(t, \mathbf{A})^* \quad (2.2.59)$$

である。(2.2.58) 式と (2.2.59) 式を比較して (2.2.59) 式の  $\mathbf{A}$  を  $-\mathbf{A}$  に置き換えればそれが (2.2.57) 式の時間反転に対応していると考えられる。つまり、

$$\psi(-t, \mathbf{A}) = \psi(t, -\mathbf{A})^* \quad (2.2.60)$$

が成り立つ。また、 $S$  行列の時間反転も同様にして

$$\mathbf{b} = [S]_B \mathbf{a} \quad (2.2.61)$$

を時間反転すれば

$$\mathbf{a}^* = [S]_{-B} \mathbf{b}^* \quad (2.2.62)$$

であり、(2.2.61) の複素共役をとったものと (2.2.62) 式から

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^* &= [S^*]_B \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* &= [S^{-1}]_{-B} \mathbf{a}^* \end{aligned} \quad (2.2.63)$$

であるから

$$[S^*]_B = [S^{-1}]_{-B} \quad (2.2.64)$$

が成り立つ。

さらに、S行列のユニタリー性 (2.2.51) 式から

$$[S^{-1}]_{-B} = [S^\dagger]_{-B} \quad (2.2.65)$$

であり、(2.2.64) 式から

$$\begin{aligned} [S^*]_B &= [S^\dagger]_{-B} \\ [S]_B &= [S^t]_{-B} \end{aligned} \quad (2.2.66)$$

となる。これは、(2.2.48) 式より

$$[T_{mn}]_B = [T_{nm}]_{-B} \quad (2.2.67)$$

であるから (2.2.56) 式が成り立つ。

### 2.2.9 Landauer-Büttiker の公式

低温における多端子の Landauer の公式 (2.2.38) より端子  $i$  から端子  $j$  への電流  $I_{ji}$  は

$$I_{ji} = \frac{2e}{h} (T_{ji}\mu_i - T_{ij}\mu_j) \quad (2.2.68)$$

である。ただし、 $\mu_i$ 、 $\mu_j$  は端子  $i$  と  $j$  での化学ポテンシャルである。端子  $i$  での電流  $I_i$  は全ての端子について足しあわせればよいので

$$I_i = \sum_j I_{ji} = \frac{2e}{h} \sum_j (T_{ji}\mu_i - T_{ij}\mu_j) \quad (2.2.69)$$

となる。このとき、総和則 (2.2.55) 式より

$$I_i = \frac{2e}{h} \sum_j T_{ij} (\mu_i - \mu_j) \quad (2.2.70)$$

となる。この式を Landauer-Büttiker の公式 [14] といい、メゾスコピック系における多端子回路の解析によく用いられている。



## 第3章 スピンの性質

本研究ではメゾスコピック系の試料に磁性散乱体を導入した場合、またラシュバスピン軌道相互作用がある場合の伝導特性を解析している。メゾスコピック系の実験で用いられている試料の多くは基本的に非磁性半導体であり特に磁性的な性質を持たない。そのような試料では電子のスピン状態は縮退しており、スピンの依存した伝導は見られない。そこへ磁性体を導入、もしくはラシュバスピン軌道相互作用が生じることによって、初めて縮退が解けスピン状態に依存した伝導が現れる。そこで本章では、電子のスピンの一般的な性質と磁性体の性質 [16, 17] を説明する。

さらに電子の電荷だけではなくスピンの用いたデバイス工学であるスピントロニクスについても説明し、そのいくつかの例を紹介する。

### 3.1 電子のスピン

#### 3.1.1 スピン角運動量

電子は軌道角運動量のほかにスピン角運動量を持つ。スピンは古典的には電子の自転に相当するがその方向が離散化されており2つの状態のみをとることができる。軌道角運動量は  $2j + 1$  個の状態を持つがスピンの場合2つであるので  $j = \frac{1}{2}$  となる。

またスピン角運動量演算子を  $\mathbf{s}$  とすれば、軌道角運動量と同じ交換関係が成り立つので

$$\begin{aligned} [s_x, s_y] &= i\hbar s_z, & [s_y, s_z] &= i\hbar s_x, & [s_z, s_x] &= i\hbar s_y \\ [s_x, s^2] &= [s_y, s^2] = [s_z, s^2] = 0 \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

となる。これらの交換関係から  $s_x, s_y, s_z$  のどれか一つの固有値を決定すればほかの固有値が決まらないことがわかる。そこで通常は  $s_z$  の固有値を決定する。また、 $s_z$  と  $s^2$  の固有値は同時に決定できることがわかる。

このスピン角運動量演算子  $s_z$  は固有値  $\pm \frac{\hbar}{2}$  を持つのでその固有関数は

$$s_z \alpha = \frac{\hbar}{2} \alpha, \quad s_z \beta = -\frac{\hbar}{2} \beta \quad (3.1.2)$$

を満たす必要がある。これを行列で表せば、

$$s_z \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad s_z \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.1.3)$$

であるのでこれらから  $s_z$  を行列で表せば

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.1.4)$$

となる。

さらに、軌道角運動量と同様に

$$s_+ = s_x + is_y \quad (3.1.5)$$

$$s_- = s_x - is_y \quad (3.1.6)$$

を定義すれば

$$s_+\alpha = 0, \quad s_-\alpha = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)}\beta = \hbar\beta \quad (3.1.7)$$

$$s_+\beta = \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)}\alpha = \hbar\alpha, \quad s_-\beta = 0 \quad (3.1.8)$$

が成り立ち  $s_+, s_-$  を行列で表せば

$$s_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad s_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.1.9)$$

となる。よって  $s_x, s_y$  は

$$s_x = \frac{1}{2}(s_+ + s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2i}(s_+ - s_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (3.1.10)$$

となる。これらのスピン角運動量演算子を

$$s = \frac{\hbar}{2}\sigma \quad (3.1.11)$$

とおけば

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (3.1.12)$$

と表せ、この  $\sigma$  をパウリのスピン行列と呼ぶ。

また、 $s^2$  は (3.1.11) 式や (3.1.12) 式から

$$s^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.1.13)$$

となる。さらに、 $s^2$  の固有値は軌道角運動量の場合と同様に  $\hbar^2 j(j+1) = \hbar^2 \hat{j}^2$  であり上式からも確かめられる。ただし、 $\hat{j} = \sqrt{j(j+1)}$  である。

### 3.1.2 磁気モーメント

電子が角運動量を持つとそれにともない磁気モーメントが生じる。これを電子が円運動しているものとしてみてみよう。半径  $r$  の円電流  $i$  は磁気モーメント  $m$  を生じる。

$$m = \mu_0 i \pi r^2 \quad (3.1.14)$$

角速度を  $\omega$  とすれば

$$i = -e \frac{\omega}{2\pi} \quad (3.1.15)$$

であるから

$$m = -\frac{\mu_0 e \omega r^2}{2} \quad (3.1.16)$$

となる。

ここで角運動量の大きさは  $m_e$  を真空中での電子の質量とすれば

$$l = r(m_e v) = m_e \omega r^2 \quad (3.1.17)$$

であるから

$$m = -\frac{\mu_0 e}{2m_e} l \quad (3.1.18)$$

となる。

しかし、量子力学的には角運動量は離散化されており  $l^2$  の固有値が  $\hbar^2 l(l+1)$  であることから  $l$  の大きさは  $\hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar\hat{l}$  である。よって、

$$m = \frac{\mu_0 e \hbar}{2m_e} \hat{l} = \mu_B \hat{l} \quad (3.1.19)$$

となり、この  $\mu_B$  をボーア磁子といいおおよそ電子1個分の磁気モーメントを表す。また、(3.1.18) 式から磁気モーメントと角運動量は逆向きであり

$$m = -\mu_B \frac{l}{\hbar} \quad (3.1.20)$$

であることがわかる。

以上は軌道角運動量の場合であったがスピンの場合は

$$m = 2\mu_B \hat{s} \quad (3.1.21)$$

となる。これは実験的に確かめられており、さらにディラックによって理論的にも説明されている。

ここで、(3.1.19) 式と (3.1.21) 式を統合して

$$m = -g\mu_B \frac{l_{l,s}}{\hbar} \quad (3.1.22)$$

とする。ただし、 $g$  は軌道角運動量の場合は1でありスピンの場合は2である。

実際には電子はこのスピンと軌道角運動量の両方を持っており全角運動量は

$$j = l + s \quad (3.1.23)$$

で表せる。よって合計の磁気モーメントは

$$m = -\mu_B \frac{l}{\hbar} - 2\mu_B \frac{s}{\hbar} = -\mu_B \frac{(l+2s)}{\hbar} \quad (3.1.24)$$

であるができれば (3.1.22) 式のように表したい。

そこで (3.1.23) 式と (3.1.24) 式から

$$\begin{aligned} m \cdot j &= -\mu_B \frac{(l+2s)}{\hbar} \cdot (l+s) \\ &= \frac{-\mu_B}{\hbar} \left( \frac{3}{2}j^2 - \frac{1}{2}l^2 + \frac{1}{2}s^2 \right) \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

であり、さらに (3.1.22) 式から

$$\begin{aligned} g &= -\frac{m}{\mu_B j / \hbar} = -\frac{\hbar}{\mu_B} \frac{m \cdot j}{j^2} \\ &= \frac{3}{2} + \frac{s^2 - l^2}{2j^2} = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \end{aligned} \quad (3.1.26)$$

となる。これは  $s=0$  であれば  $g=1$  であるし、 $l=0$  であれば  $g=2$  であるので (3.1.22) 式と確かに一致している。

### 3.1.3 スピン間の交換相互作用

スピンとスピンとの間には平行もしくは反平行にしようとする交換相互作用が働いており、これが磁性の一つの要因となっている。そこで、ここでは簡単に2つの原子について考え交換相互作用を求める。図 3.1 のような2つの原子にそれぞれ1つの電子がある場合

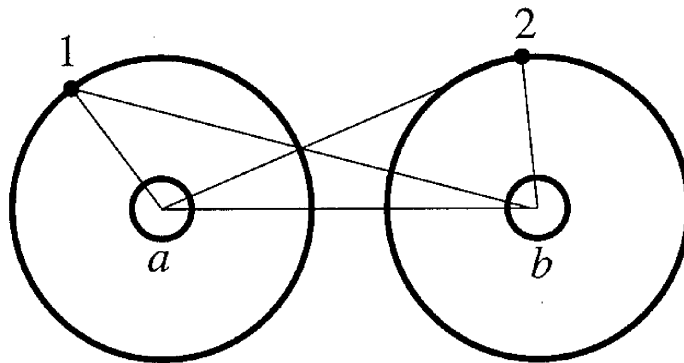


図 3.1: 2 電子間の交換相互作用

を想定し、それぞれの波動関数の軌道部分を  $\Psi_a(1), \Psi_b(2)$  とすれば 2 電子系の波動関数  $\Psi(1, 2)$  はその積で表せ

$$\Psi(1, 2) = \Psi_a(1)\Psi_b(2) \quad (3.1.27)$$

となる。また、この2つを交換した

$$\Psi(2, 1) = \Psi_a(2)\Psi_b(1) \quad (3.1.28)$$

もまたこの波動関数であるので、結局  $\Psi(1, 2)$  はこれらを1次結合した

$$\Psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_a(1)\Psi_b(2) + \Psi_a(2)\Psi_b(1)) \quad (3.1.29)$$

で与えられる。この波動関数は1と2の入れ替えについて対象である。

それに対して反対称の波動関数も定義できる。

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_a(1)\Psi_b(2) - \Psi_a(2)\Psi_b(1)) \quad (3.1.30)$$

また、スピンについても同様に

$$\chi_S(1,2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)) \\ \alpha(1)\alpha(2) \\ \beta(1)\beta(2) \end{cases} \quad (3.1.31)$$

$$\chi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)) \quad (3.1.32)$$

となる。

ここで1と2の合成スピン角運動量演算子を  $S = S_1 + S_2$  と定義すれば  $\chi_S$  に対しては  $S_z$  の固有値が  $-1, 0, 1$  であるから  $S = 1$  であり、 $\chi_A$  に対しては  $S_z$  の固有値が  $0$  のみであるので  $S = 0$  であることがわかる。

		$S_z$	$S$	
$\chi_S(1,2)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1))$	0	1	(3.1.33)
	$\alpha(1)\alpha(2)$	1	1	
	$\beta(1)\beta(2)$	-1	1	
$\chi_A(1,2)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1))$	0	0	

これらから3つの状態を持つ  $\chi_S$  をスピン3重項、1つの状態を持つ状態  $\chi_A$  をスピン1重項と呼ぶ。

さて2電子系の波動関数は(3.1.29)式、(3.1.30)式、(3.1.31)式、(3.1.32)式の積で与えられるが電子はフェルミオンであるのでその波動関数は交換に対して反対称でなければならない。よって、

$$\Phi_1 = \Psi_S \chi_A \quad (3.1.34)$$

$$\Phi_2 = \Psi_A \chi_S \quad (3.1.35)$$

の2つの反対称な波動関数となる。

また、図3.1からそのハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{-e^2}{r_{1a}} + \frac{-e^2}{r_{2b}} \right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{e^2}{r_{ab}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{-e^2}{r_{1b}} + \frac{-e^2}{r_{2a}} \right) \quad (3.1.36)$$

となる。

これらから  $\Phi_1, \Phi_2$  のエネルギー  $E_1, E_2$  は

$$E_1 = \int \Phi_1^* H \Phi_1 dr = \frac{1}{1+c^2} (Q+J) \quad (3.1.37)$$

$$E_2 = \int \Phi_2^* H \Phi_2 dr = \frac{1}{1-c^2} (Q-J) \quad (3.1.38)$$

と計算できる。ただし、

$$c = \int \Psi_a^*(1)\Psi_b(1)dr = \int \Psi_a^*(2)\Psi_b(2)dr \quad (3.1.39)$$

$$Q = \int \Psi_a^*(1)\Psi_b^*(2)H\Psi_a(1)\Psi_b(2)dr \quad (3.1.40)$$

$$J = \int \Psi_a^*(1)\Psi_b^*(2)H\Psi_a(2)\Psi_b(1)dr \quad (3.1.41)$$

とした。 $c$ は重なり積分、 $Q$ はクーロン積分、 $J$ は交換積分と呼ばれる。

1と2の波動関数の重なりが十分に小さく  $c^2$  を無視できるとすればこの二つのエネルギー差は

$$E_1 - E_2 = -2J \quad (3.1.42)$$

で与えられる。つまり、もし  $J > 0$  であればスピンの平行の方が安定であり、 $J < 0$  であれば反平行の方が安定であることがわかる。

また、スピンによる交換相互作用を

$$H_{ex} = -J \left( \frac{1}{2} + \frac{2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2}{\hbar^2} \right) \quad (3.1.43)$$

で与えられると仮定してみる。ここで、

$$2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S^2 - S_1^2 - S_2^2 \quad (3.1.44)$$

であるから平行であれば

$$2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = 1(1+1)\hbar^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) = \frac{1}{2}\hbar^2 \quad (3.1.45)$$

であり、反平行であれば

$$2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = 0(0+1)\hbar^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) = -\frac{3}{2}\hbar^2 \quad (3.1.46)$$

である。よって、平行の時のエネルギーが

$$E = -J \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = -J \quad (3.1.47)$$

であり、反平行の時のエネルギーが

$$E = -J \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \right) = J \quad (3.1.48)$$

で与えられる。この結果は (3.1.42) 式と一致しており (3.1.43) 式が成り立つ。通常は定数項を省いて

$$H_{ex} = -2J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (3.1.49)$$

とする。

### 3.2 スピノル場の回転

(3.1.2) 式ではスピン角運動量演算子  $s_z$  を決定し、その固有値として  $\pm\hbar/2$  をとった。この場合、 $s_x$  や  $s_y$  の固有値を同時に決めることは出来ない。一方、 $s_x$  や  $s_y$  を決定し、その固有値を  $\pm\hbar/2$  とすることもできる。この場合にも、他の固有値を決定することは出来ない。ここでは、 $s_z$  の固有値を決めた場合と  $s_x$  や  $s_y$  の固有値を決めた場合との関係を示し、さらにスピノル場の回転を議論する。

まず、最初に3次元ベクトルの回転を考える。ある座標  $x = (x_1, x_2, x_3)$  を回転軸  $e = (e_1, e_2, e_3)$  の周りに  $\theta$  回転させた座標  $x' = (x'_1, x'_2, x'_3)$  を考える。ここで、Levi-Civita の全反対称テンソル  $\epsilon_{ijk}$

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & i, j, k \text{ が } 1, 2, 3 \text{ の偶置換であるとき} \\ -1 & i, j, k \text{ が } 1, 2, 3 \text{ の奇置換であるとき} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (3.2.1)$$

を定義する。このとき、

$$\sum_k \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} \quad (3.2.2)$$

が成り立つ。

この記号を用いれば、単位ベクトル  $e$  まわりの  $\theta$  回転させた座標変換  $x'_i = \sum_j a_{ij} x_j$  は

$$a_{ij} = (\delta_{ij} - e_i e_j) \cos(\theta) + e_i e_j + \sum_k \epsilon_{ijk} e_k \sin(\theta) \quad (3.2.3)$$

と表せられる。実際に  $z$  軸まわりの回転の変換  $A = \sum_{ij} a_{ij}$  は

$$A = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) & 0 \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.2.4)$$

となり、成り立つことがわかる。

次に、スピノル場の回転を考える。[15] ここで、

$$\begin{aligned} \alpha &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + ie_3 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \beta &= i(e_1 - ie_2) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

を定義する。 $e$  は単位ベクトルなので、 $\alpha$  と  $\beta$  には

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (3.2.6)$$

なる関係がある。このとき、以下の行列を考える。

$$S = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{bmatrix} \quad (3.2.7)$$

この行列は

$$\mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{S}^\dagger\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha^* & -\beta \\ \beta^* & \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |\alpha|^2 + |\beta|^2 & 0 \\ 0 & |\alpha|^2 + |\beta|^2 \end{bmatrix} = I \quad (3.2.8)$$

よりユニタリ一行列である。また、

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) + ie_3 \sin(\frac{\theta}{2}) & i(e_1 - ie_2) \sin(\frac{\theta}{2}) \\ i(e_1 + ie_2) \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) - ie_3 \sin(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) + i \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} e_1 \sin(\frac{\theta}{2}) + i \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} e_2 \sin(\frac{\theta}{2}) + i \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} e_3 \sin(\frac{\theta}{2}) \\ &= I \cos(\frac{\theta}{2}) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e} \sin(\frac{\theta}{2}) \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

と表される。ここで、 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  はパウリのスピン行列である。また、逆行列は  $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^\dagger = I \cos(\frac{\theta}{2}) - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e} \sin(\frac{\theta}{2})$  である。

このユニタリ一行列  $\mathbf{S}$  を用いて、(3.2.3) 式を表す。パウリのスピン行列は、次の交換関係

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (3.2.10)$$

と反交換関係

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (3.2.11)$$

を満たす。よって、

$$\delta_i \delta_j = \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (3.2.12)$$

が成り立つ。これを使えば、 $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}$  より

$$\begin{aligned} [\sigma_i, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}] &= \sum_j \sigma_i \sigma_j e_j - \sum_j \sigma_j e_j \sigma_i \\ &= \sum_j \left( \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \right) e_j - \sum_j \left( \delta_{ji} + i \sum_k \epsilon_{jik} \right) e_j = 2i \sum_{jk} \epsilon_{ijk} e_j \sigma_k \end{aligned} \quad (3.2.13)$$



を得る。同様に、

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})\sigma_i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}) &= \sum_{jj'} \sigma_{j'} e_{j'} \left( \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \right) e_j \\
&= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})e_i + i \sum_{j,k,j'} \epsilon_{ijk} \sigma_{j'} \sigma_k e_{j'} e_j \\
&= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})e_i + i \sum_{j,k,j'} \epsilon_{ijk} \left( \delta_{j'k} + i \sum_{k'} \epsilon_{j'kk'} \sigma_{k'} \right) e_{j'} e_j \\
&= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})e_i + i \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} e_k e_j - \sum_{jkj'k'} \epsilon_{ijk} \epsilon_{j'kk'} \sigma_{k'} e_{j'} e_j \\
&= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})e_i + i(\mathbf{e} \times \mathbf{e}) \sum_{jk} \sigma_j e_i e_j - \sigma_i \\
&= 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}) - \sigma_i
\end{aligned} \tag{3.2.14}$$

を得る。ここで、 $S^{-1}\sigma_i S$  を計算すると

$$\begin{aligned}
S^{-1}\sigma_i S &= \left[ I \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \sigma_i \left[ I \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \\
&= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_i + i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) [\sigma_i, (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})] + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e})\sigma_i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}) \\
&= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_i - 2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sum_{jk} \epsilon_{ijk} e_j \sigma_k + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)(2e_i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e} - \sigma_i) \\
&= \cos \theta \sigma_i + (1 - \cos \theta) e_i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e} + \sum_{jk} \sin \theta \epsilon_{ijk} e_k \sigma_j \\
&= \sum_k \left( \cos \theta \delta_{ik} + (1 - \cos \theta) e_i e_k + \sum_l \sin \theta \epsilon_{ilk} e_l \right) \sigma_k \\
&= \sum_k a_{ik} \sigma_k
\end{aligned} \tag{3.2.15}$$

となり、ユニタリ行列  $S$  は 3 次元ベクトルの変換 (3.2.3) 式と結び付けられる。また、(3.2.15) 式の両辺に左から  $S$ 、右から  $S^{-1}$  をかければ

$$\sigma_i = \sum_k a_{ik} S \sigma_k S^{-1} \tag{3.2.16}$$

を得る。さらに、 $a_{ij}$  をかけ、 $i$  についての和をとると

$$\sum_i a_{ij} \sigma_i = \sum_{ik} a_{ij} a_{ik} S \sigma_k S^{-1} = \sum_k \delta_{jk} S \sigma_k S^{-1} = S \sigma_j S^{-1} \tag{3.2.17}$$

となる。ここで、 $a_{ij}$  の直交性  $\sum_{jk} a_{ij} a_{ik} = \delta_{jk}$  を用いた。

ある 3 次元ベクトルを  $\mathbf{x}$  とおく。このベクトルの  $\mathbf{e}$  まわりの  $\theta$  回転した座標  $\mathbf{x}'$  は (3.2.3) 式で表され、

$$\mathbf{x}'_i = \sum_j a_{ij} x_j \tag{3.2.18}$$

であった。

次に、2成分のスピンル場  $\psi = \sum_{\alpha}^2 \psi_{\alpha}$  の回転を考える。ここで、 $\mathbf{x} = \psi^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} \psi$  とすればこれは3次元のベクトルとなる。よって、これを (3.2.18) 式に代入し、(3.2.17) 式を用いれば

$$\psi^{\dagger} \sigma_i \psi' = \sum_j a_{ij} \psi^{\dagger} \sigma_j \psi = \psi^{\dagger} \mathbf{S} \sigma_i \mathbf{S}^{-1} \psi \quad (3.2.19)$$

となる。つまり、スピンル場の  $e$  軸周りの  $\theta$  回転は、

$$\psi' = \mathbf{S} \psi \quad (3.2.20)$$

で表される。

### 3.3 常磁性体

磁性体を大きく分類すると、自発磁化を持つ強磁性体、自発磁化を持たず磁界を印可するとわずかに磁化する常磁性体に分類することができる。本研究は非磁性な半導体に磁化を導入するものであり、また磁界がない場合を想定している。よって、導入する磁化は自発磁化であり、強磁性体を導入することとなる。しかしながら、強磁性体の性質は常磁性体の性質と密接な関わりがあるため、ここでは常磁性体の性質を簡単に2つのモデルで説明する。

#### 3.3.1 常磁性体のハイゼンベルグ模型

常磁性体とは磁場によってわずかに磁場方向に磁化するような磁性のことである。これは熱振動によって電子のスピンが振動しておりランダムな方向を向いているためである。(図 3.2) ここで磁界  $\mathbf{H}$  をかけるとスピンはわずかに  $\mathbf{H}$  軸方向に向きをそろえる。このと

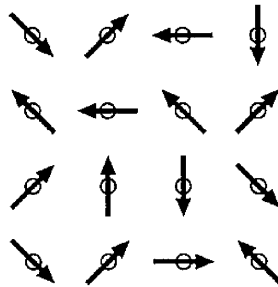


図 3.2: 常磁性体のスピン

きの1つのスピンの磁気エネルギーは

$$U = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{H} = -MH \cos(\theta) = \mu_B H \cos(\theta) \quad (3.3.1)$$

である。ただし、磁場は  $z$  軸方向とし磁気モーメント  $M$  が  $H$  とのなす角を  $\theta$  とした。このスピンの向きの分布はボルツマン分布で与えられ  $\theta$  の方向に向く確率は

$$\exp\left(-\frac{U}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{MH}{kT} \cos(\theta)\right) \quad (3.3.2)$$

に比例する。

よってスピンの  $\theta$  と  $\theta + d\theta$  の間に向く確率  $p(\theta)d\theta$  は球の表面で規格化することにより

$$p(\theta)d\theta = \frac{\exp\left(-\frac{MH}{kT} \cos(\theta)\right) 2\pi \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi \exp\left(-\frac{MH}{kT} \cos(\theta)\right) 2\pi \sin \theta d\theta} \quad (3.3.3)$$

で与えられる。よって、単位体積あたりのスピンの数を  $n$  とすれば観測方向の磁化  $I$  は

$$I = nM \int_0^\pi p(\theta) \cos \theta d\theta \quad (3.3.4)$$

となる。ここで  $\frac{MH}{kT} = \alpha$ 、 $\cos \theta = x$  とすれば

$$\frac{I}{nM} = \frac{\int_{-1}^1 e^{\alpha x} x dx}{\int_{-1}^1 e^{\alpha x} dx} = \coth \alpha - \frac{1}{\alpha} = L(\alpha) \quad (3.3.5)$$

と計算できる。この  $L(\alpha)$  をランジュヴァン関数といい図 3.3 のようになっている。  $L(\alpha)$

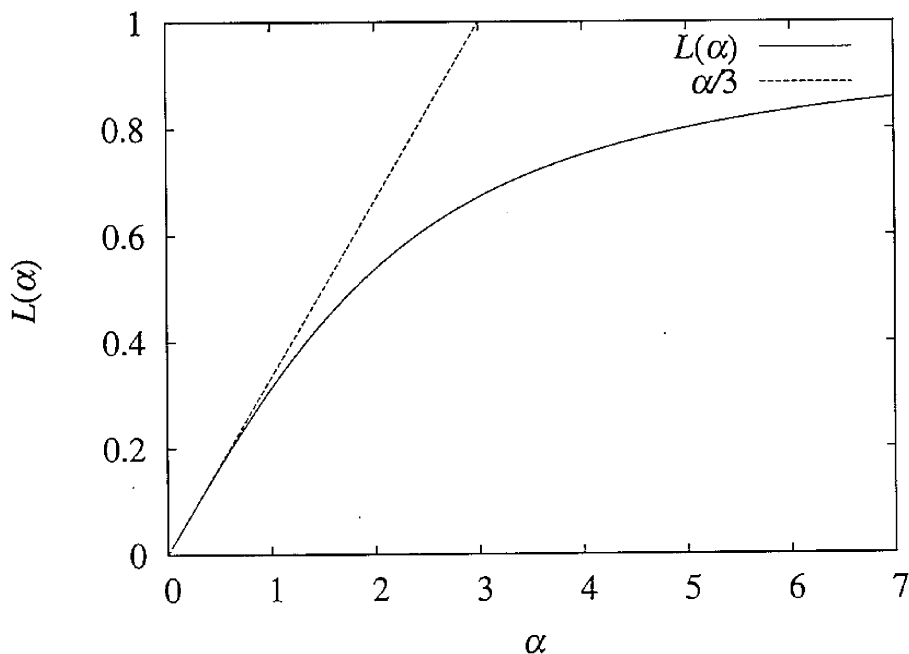


図 3.3: ランジュヴァン関数

は  $\alpha$  が十分に大きければ 1 に近づき  $I = nM$  となりスピンのすべてそろふ。しかし、通常ではそのような大きな磁界をかけることは難しい。逆に  $\alpha$  が十分に小さければ

$$L(\alpha) \sim \frac{\alpha}{3} - \frac{\alpha^2}{45} - \dots \quad (3.3.6)$$

と展開でき第1項のみを採用すれば

$$I = \frac{nM}{3} \alpha = \frac{nM^2}{3kT} H \quad (3.3.7)$$

となり磁化は磁界に比例する。よってその磁化率  $\chi$  は

$$\chi = \frac{I}{H} = \frac{nM^2}{3kT} \quad (3.3.8)$$

となる。この磁化率が温度に逆比例する法則をキュリーの法則という。

### 3.3.2 常磁性体のイジング模型

前節ではスピンはあらゆる方向を向くとしたが実際には前章でやったようにスピンの向きは量子化されている。軌道角運動量とスピン角運動量を足した全角運動量は  $M_j = j, j-1, \dots, -j+1, -j$  まで  $2j+1$  個の向きを持つ。このときの磁場が  $z$  軸方向であれば磁場中のポテンシャルエネルギーは

$$U = -g\mu_B M_j H = -g\mu_B \sqrt{j(j+1)} H \cos(\theta) \quad (3.3.9)$$

と表せる。ただし、

$$M_j = \hat{j} \cos(\theta) = \sqrt{j(j+1)} \cos(\theta) \quad (3.3.10)$$

である。

また  $\theta$  方向を向く原子の数  $n$  はボルツマン分布で与えられ

$$n = \sum_{-j}^j n_0 \exp(U) \quad (3.3.11)$$

であるから、磁化は (3.3.3) 式と (3.3.4) 式に対応して

$$I = \sum n M = \frac{n \sum (-g\mu_B M_j) \exp(U/kT)}{\sum \exp(U/kT)} \quad (3.3.12)$$

である。ここで

$$\frac{U}{kT} = by \quad (3.3.13)$$

とおく。ただし、

$$y = \frac{g\mu_B H}{kT}, \quad b = (-M_j) \quad (3.3.14)$$

とした。これらより

$$I = ng\mu_B \frac{\sum be^{by}}{\sum e^{by}} \quad (3.3.15)$$

となる。

ところで、 $\sum e^{by} = e^{-jy} + e^{-(j-1)y} + \dots + e^{jy}$  は等比級数であるので

$$\sum e^{by} = \frac{e^{-jy} - e^{jy} e^y}{1 - e^y} = \frac{e^{-(j+1/2)y} - e^{(j+1/2)y}}{e^{y/2} - e^{-y/2}} = \frac{\sinh(j+1/2)y}{\sinh(y/2)} \quad (3.3.16)$$

となる。

また、

$$\frac{\sum be^{by}}{\sum e^{by}} = \frac{d}{dy} \left( \ln \sum e^{by} \right) \quad (3.3.17)$$

であるので

$$\frac{1}{j} \frac{\sum be^{by}}{\sum e^{by}} = \left( \frac{2j+1}{2j} \right) \coth \left( \frac{2j+1}{2j} \right) \alpha - \frac{1}{2j} \coth \frac{\alpha}{2j} = B_j(\alpha) \quad (3.3.18)$$

となる。ただし、 $\alpha = jy$  である。この  $B_j(\alpha)$  はブリュアン関数と呼ばれている。また全て磁界方向に向きがそろったときの磁化  $I_0 = ng\mu_B j$  を使って磁化は

$$I = I_0 B_j(\alpha) \quad (3.3.19)$$

で表せる。

ここで  $j = 1/2$  を考える。これは軌道角運動量が  $l = 0$  でスピンの  $s = 1/2, -1/2$  のどちらかを持つ場合に相当する。このとき、 $g = 2$  であるので

$$\alpha = \frac{\mu_B H}{kT} \quad (3.3.20)$$

であり

$$B_{1/2}(\alpha) = \tanh(\alpha) \quad (3.3.21)$$

となるので磁化は

$$I = ng\mu_B \tanh(\alpha) \quad (3.3.22)$$

でありその磁化率は  $\alpha$  が十分小さければ

$$\chi = \frac{n\mu_B^2}{kT} \quad (3.3.23)$$

となる。これはさきほどのハイゼンベルグ模型と比べて3倍大きな値になっている。また、このときのブリュアン関数  $B_{1/2}(\alpha)$  は図 3.4 のような形になっている。この  $j = 1/2$  の場合のモデルをイジング模型という。

## 3.4 強磁性体

### 3.4.1 強磁性体の自発磁化

常磁性体ではスピンはランダムな方向に向いていたが、強磁性体ではスピンの集団はある特定の方向を向く。これは磁界をかけていなくても成り立ちそのような磁化を自発磁化という。これにはスピン間の交換相互作用が大きく影響していると考えられる。交換相互作用は (3.1.49) 式より

$$H_{ex} = -2JS_i \cdot S_j \quad (3.4.1)$$

で表される。これから  $J > 0$  ならば平行が安定であり図 3.5 のような強磁性体になり、 $J < 0$  であれば反平行が安定であるから図 3.6 のような反強磁性体になることがわかる。

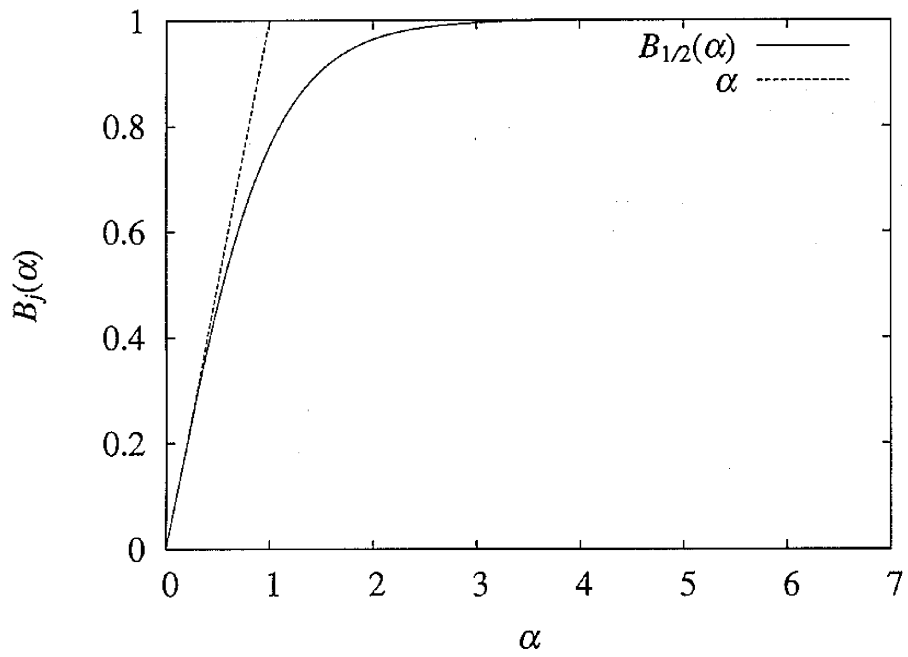


図 3.4: ブリュアン関数

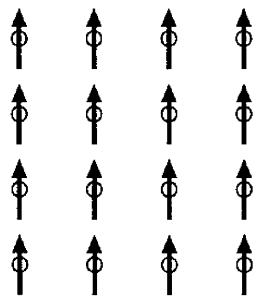


図 3.5: 強磁性体

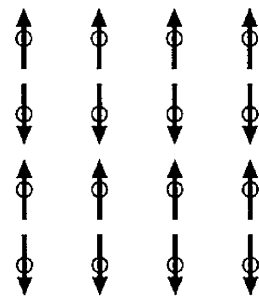


図 3.6: 反強磁性体

さて、この強磁性体の磁化率をブリュアン関数をつかって求めてみよう。先ほどの交換相互作用に外部磁界による項を加えて全体のエネルギーは

$$U = - \sum_{i,j} 2JS_i \cdot S_j - g\mu_B \sum_i S_i \cdot H \quad (3.4.2)$$

である。

ここであるスピン  $S_i$  に注目し相互作用する相手のスピンをその平均  $\langle S_j \rangle$  で置き換える。さらに単純化するため最隣接のスピンのみを考慮し向きがすべて同じ方向を向いているものとするれば

$$\begin{aligned} U &= - \sum_i 2JS_i z \langle S_j \rangle - g\mu_B \sum_i S_i H = -g\mu_B \sum_i S_i \left( H + \frac{2Jz \langle S_j \rangle}{g\mu_B} \right) \\ &= -g\mu_B \sum_i S_i (H + H_m) \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

となる。つまり、相互作用の効果を仮想的な磁界に見立てて計算すればよい。この仮想的な磁界をワイスの分子磁界という。この分子磁界は磁化  $I = Ng\mu_B \langle S_j \rangle$  を使って

$$H_m = \frac{2Jz \langle S_j \rangle}{g\mu_B} = \frac{2Jz \langle S_j \rangle}{ng^2\mu_B^2} I = \omega I \quad (3.4.4)$$

となり磁界に比例する。ただし、 $n$  は単位体積あたりのスピンの数である。

よって磁化は  $\alpha$  を

$$\alpha = \frac{g\mu_B j (H + H_m)}{kT} \quad (3.4.5)$$

とすれば常磁性の場合と同様に考えることができ (3.3.19) 式より

$$I = I_0 B_j(\alpha) \quad (3.4.6)$$

で与えられる。ただし、 $H_m$  は  $I$  を含んでいるからこの2式が成り立つように求める必要がある。(3.4.4) 式、(3.4.5) 式から

$$\frac{I}{I_0} = \frac{nkT}{\omega I_0^2} \alpha - \frac{H}{\omega I_0} \quad (3.4.7)$$

であるから  $B_j(\alpha)$  と (3.4.7) 式を図に表せば図 3.7 となる。ただし外部磁界  $H = 0$  とした。この図から温度が低いうちは自発磁化が存在するが温度が上がるにつれて大きさが小さくなっていきある温度  $\Theta$  に達した後は自発磁化がなくなってしまうことがわかる。この温度をキュリー温度といい  $\alpha$  が十分小さければ

$$B_j(\alpha) \sim \frac{j+1}{3j} \alpha \quad (3.4.8)$$

であることを使って (3.4.6) 式と (3.4.7) 式より

$$\Theta = \frac{\omega I_0^2}{nk} \frac{j+1}{3j} = \frac{ng^2\mu_B^2 j(j+1)\omega}{3k} = \frac{nm^2}{3k} \omega \quad (3.4.9)$$

となる。ただし、 $m = g\mu_B \sqrt{j(j+1)}$  である。

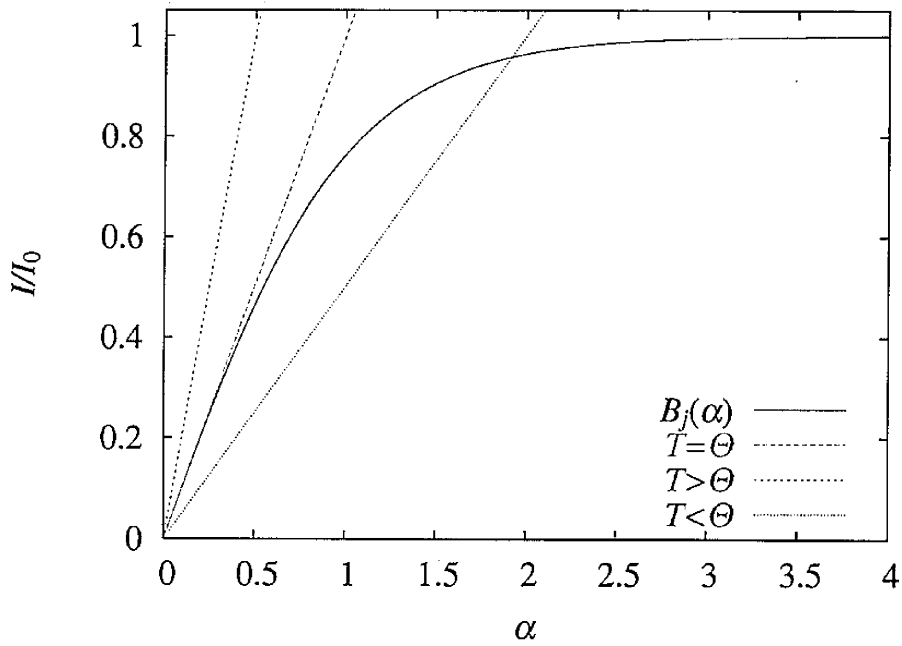


図 3.7: 磁化の温度依存性

### 3.4.2 磁区構造

このように強磁性体は磁界がかかっていなくても自発磁化を持つ。さらにその磁化は図 3.8 のようにいくつかの磁区に分かれている。磁区はその中ではスピンの向きがそろって

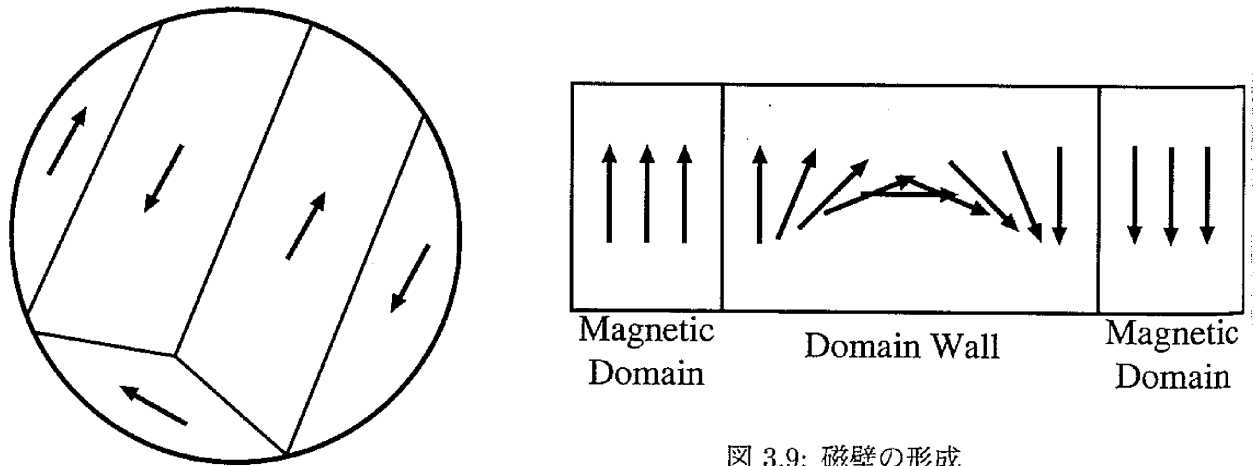


図 3.8: 強磁性体の磁区構造

いるが隣り合う磁区同士では異なっている。隣り合う磁区間でのスピン間の相互作用は

$$U = -2JS_i \cdot S_j \quad (3.4.10)$$



で表せるから急激にスピンの向きを変えるよりも少しずつ向きを変えた方がエネルギー的に得である。よって、磁区と磁区との間にはスピンの向きが徐々に変える磁壁が存在する。(図 3.9)

メソスコピックな試料に磁区を導入した場合もこの磁壁が形成され、その存在が伝導に影響を与えることが考えられる。

### 3.5 スピントロニクス

現在、半導体デバイスの多くは電子の電荷のみを利用したデバイスである。他方、HDD等の記憶素子の多くは磁気モーメントつまりは電子のスピンを利用したデバイスである。これまで、これらは独立に研究が行われてきたがお互いに相反するものではなく、むしろ同じ電子を用いたデバイスである。スピントロニクス [18] とは電子の持つ電荷とスピン両方に着目し、今までにない新しいデバイスを作成しようとするものである。

このスピントロニクスは異方性磁気抵抗効果 (AMR) や特に金属人工格子の巨大磁気抵抗効果 (GMR) の発見以来盛んに研究が行われている。これらの現象は金属のみであるが、トンネル磁気抵抗効果 (TMR) は強磁性半導体においても確認されている。

また、スピントロニクスは遠い未来の技術でなく GMR はすでに HDD のヘッドに使われ広く世間に広まっている。そこで本研究では、メソスコピック系に磁化、もしくはラッシュバースピン軌道相互作用を導入し、電子のスピン状態を考慮した伝導特性の解析を行う。これにより、メソスコピック系でのスピンを利用した新たなデバイスの基礎となることが期待できる。

そこで以下ではこれら 3 つの磁気抵抗効果 [19] と、メソスコピック系でのスピントロニクスデバイスについて説明する。

#### 3.5.1 異方性磁気抵抗効果

異方性磁気抵抗効果 (AMR) とは強磁性体のような自発磁化を持つ物質に磁界を印可しその磁化状態によって抵抗が変化する現象である。これは以下のように理解できる。通常、常磁性体ではアップスピン、ダウンスピンが対をなしてフェルミエネルギーまでの状態を占有していく。ところが強磁性体はスピン間に相互作用が働いており特定の方向に磁化していて、磁化した方向のスピンが多く占有される。よって、そのバンド図は図 3.10 のようにアップスピンとダウンスピンとで異なる。

ここで電子が散乱され上の準位から入ってくる場合を考えてみよう。上の図ではアップスピンの状態はほぼ埋まっており散乱された電子がアップスピンに入ることは考えにくい。一方、ダウンスピンでの状態は空いているのでダウンスピンが入ることは出来る。その結果、アップスピンとダウンスピンでの抵抗が異なっており電流を流したときにアップスピンの電子はダウンスピンに反転しなければ流れられないことになる。これが異方性磁気抵抗効果のおおまかな原因であると考えられる。

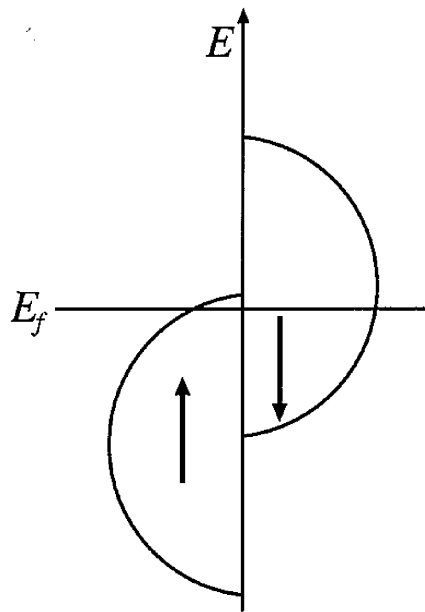


図 3.10: 強磁性体のバンド構造

### 3.5.2 巨大磁気抵抗効果

巨大磁気抵抗効果 (GMR) は強磁性体の薄膜を何十にも重ねた人工金属格子において確認されている。それぞれの層間では反強磁性体の場合と同様に  $J < 0$  の時の交換相互作用によって磁化が反平行となっている。そこに磁界を印可することにより反平行から平行となりそれによって抵抗が変わる現象である。抵抗は平行なときの方が小さく反平行の時は非常に大きくなる。

これは次のような 2 流体モデル [20] を用いて現象論的に説明できる。電子が散乱され

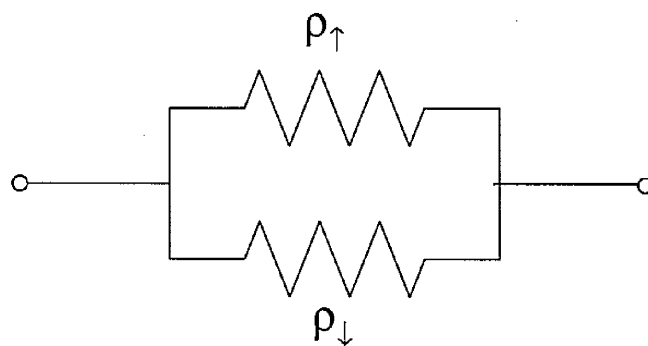


図 3.11: 2 流体モデル

アップスピン、ダウンスピンそれぞれでの抵抗が違えばそれは図 3.11 のような並列

回路と見なすことができる。よって合成した抵抗は

$$\rho = \frac{\rho_{\uparrow}\rho_{\downarrow}}{\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}} \quad (3.5.1)$$

である。

次にこの2流体モデルを用いて何層もの磁性体があるときの抵抗を計算する。図3.12の

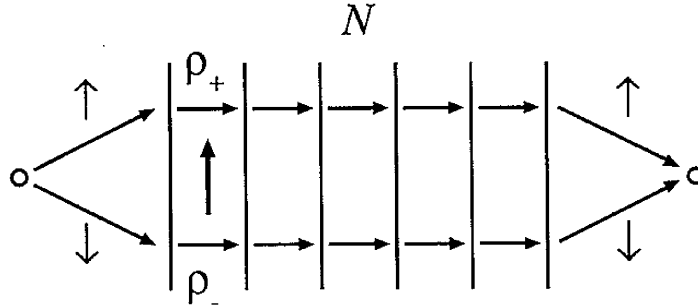


図 3.12: 強磁性体の多層膜中の伝導

ようにアップスピンとダウンスピンが独立に伝導すると考える。このとき、スピンの磁化が平行なときの抵抗を  $\rho_+$ 、反平行なときの抵抗を  $\rho_-$  とする。磁化が平行なときの抵抗はそれぞれのスピンでの抵抗が層の総数を  $N$  とすれば

$$\rho_{\uparrow} = N\rho_+ \quad (3.5.2)$$

$$\rho_{\downarrow} = N\rho_- \quad (3.5.3)$$

であるから、その合成抵抗は

$$\rho_F = \frac{\rho_{\uparrow}\rho_{\downarrow}}{\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}} = \frac{N\rho_+\rho_-}{\rho_+ + \rho_-} \quad (3.5.4)$$

となる。また、反平行であれば2つの反平行な磁化での抵抗を平均した  $(\rho_+ + \rho_-)/2$  を用いて

$$\rho_{\uparrow} = \rho_{\downarrow} = N\frac{\rho_+ + \rho_-}{2} \quad (3.5.5)$$

であるから反平行なときの合成抵抗は

$$\rho_{AF} = N\frac{\rho_+ + \rho_-}{4} \quad (3.5.6)$$

で与えられる。

このとき磁気抵抗比を

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\rho_{AF} - \rho_F}{\rho_F} \quad (3.5.7)$$

と定義すれば

$$\frac{\rho_{AF} - \rho_F}{\rho_F} = \frac{(\alpha - 1)^2}{4\alpha} \quad (3.5.8)$$

となる。ただし、 $\alpha = \rho_+\rho_-$  である。

この式より  $\alpha = 1$ 、つまり  $\rho_+ = \rho_-$  であれば磁気抵抗比は0であり磁気抵抗効果がないが  $\alpha \neq 1$  であれば磁気抵抗が存在することが確かめられる。

### 3.5.3 トンネル磁気抵抗効果

トンネル磁気抵抗効果 (TMR) は非磁性な絶縁体を強磁性体で挟んだ構造となっている。このとき、非磁性な絶縁体ではスピントリプルなしでトンネルすると考えられる。よって

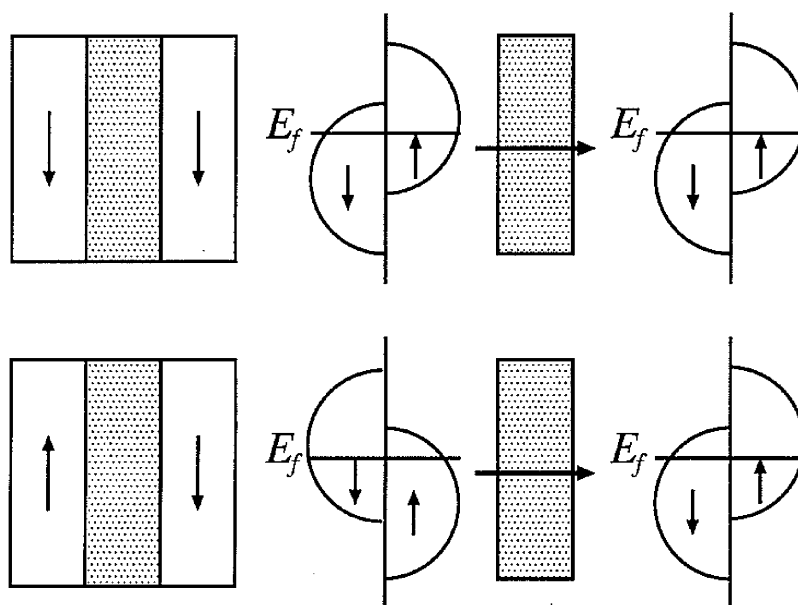


図 3.13: トンネル磁気抵抗効果

左右の磁化が平行であれば両方のスピンの状態が空いているのでほぼ抵抗なしに伝導することができる。ところが、反平行であるとどちらかの空いている状態が少なくなり大きな抵抗を生じる。これが TMR の原因である。

この TMR は次世代のメモリといわれている MRAM にも用いられており、左右の磁化を平行か反平行にすることにより抵抗が変わりそれが 0 と 1 に対応する。

### 3.5.4 メゾスコピック系でのスピントロニクス

メゾスコピック系は系全体がコヒーレントであり、スピンの情報が失われる時間であるスピン緩和時間も長い。そのため、電子のスピン状態を操作し観測できれば、電子 1 つで動作するデバイスが実現される可能性も十分に考えられる。メゾスコピック系でのスピントロニクスデバイスは大きく分けて 3 つに分類される。まず、その一つが Spin Filter である。(図 3.14) Spin Filter はスピン分極していない、つまりアップスピンかダウンスピンか分からない電子を入力し、スピンの向きを特定の方向にそろえ、どちらかの向きに分極したスピンを出力するデバイスである。Spin Filter として最も単純な構造のものは図 3.13 のように強磁性体を導入したものである。ただし、TMR では間に絶縁体を挟んでいたが、メゾスコピック系では 2 次元電子系など半導体を挟むことになる。この場合、強磁性体と半導体との界面で散乱が生じ、透過確率が低くなったり、界面でせっかく揃えたスピンの

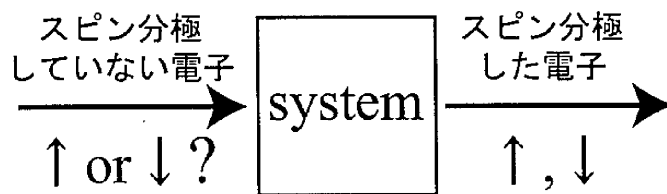


図 3.14: Spin Filter

向きが変わってしまったりする。そのため、より効率よく半導体にスピンド注入できる機構が望まれている。

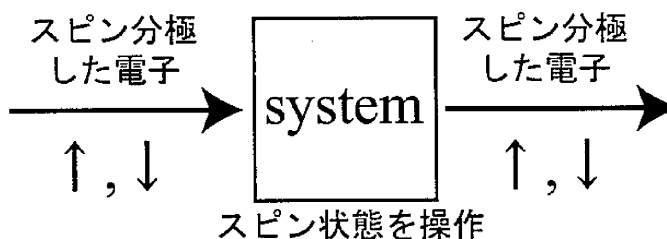


図 3.15: Spin Device

次の1つが Spin Device である。(図 3.15) Spin Device は、Spin Filter によってスピンド分極させた電子をスピンド注入し、そのスピンド状態を電場や磁場、磁化などにより操作するデバイスである。

そして、最後の1つが Spin Analyzer である。Spin Analyzer では Spin Device によって操作したスピンドを観測するためのデバイスである。これにはさまざまな機構が考えられており、例えば垂直磁場を印可し、そのサイクロトロン半径がゼーマンエネルギーによってスピンドで異なることを利用した磁気フォーカシングによる測定 [2, 3] や、量子ドットにスピンド状態の分かっている電子を閉じこめ、近くを流れる電流とのクーロン相互作用を利用した測定 [4] などがある。

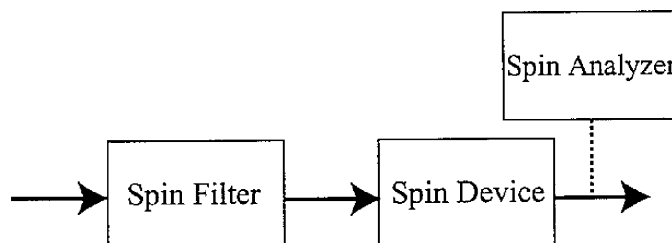


図 3.16: メゾスコピック系でのスピントロニクスデバイスの構成

メゾスコピック系でのスピントロニクスデバイスの多くはこれら3つのデバイスによって構成されている。(図 3.16) 本研究では、磁化やラッシュバスピンド軌道相互作用を利用した新たな Spin Filter と Spin Device を提案する。その性能の指標として、ここで2つのスピ

ン分極率を定義する。まず、Spin Device の性能を評価するための指標として、透過確率に対するスピン分極率を以下のように定義する。

$$P_{\uparrow,\downarrow} = \left| \frac{T_{\uparrow} - T_{\downarrow}}{T_{\uparrow} + T_{\downarrow}} \right| T_{\uparrow,\downarrow} \quad (3.5.9)$$

ここで、 $T_{\uparrow,\downarrow}$  はスピン分極した電子を入射させたときのアップ、もしくはダウンスピンでの透過確率である。

一方、Spin Filter の性能を評価するための指標として、コンダクタンスに対するスピン分極率を以下のように定義する。

$$P = \left| \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}} \right| \quad (3.5.10)$$

ここで、 $G_{\uparrow} = G_{\uparrow,\uparrow} + G_{\downarrow,\uparrow}$ 、 $G_{\downarrow} = G_{\uparrow,\downarrow} + G_{\downarrow,\downarrow}$  であり、それぞれスピン分極させていない電子を入射させたときのアップ、もしくはダウンスピンで透過するコンダクタンスである。

## 第4章 磁壁の影響

3.4.2 節でみたように磁区には磁壁と呼ばれるなだらかに磁化が変化する場所が存在する。[23] そのような場所の解析には後で述べるが境界要素法は不向きである。

そこでこの磁壁の影響を1次元において転送行列法を用いて調べる。転送行列法を適用するに当たって磁区がある場合の Schrödinger 方程式を導きそれをヘルムホルツ方程式に変換する方法を示す。

### 4.1 磁区がある場合の Schrödinger 方程式

#### 4.1.1 磁化中でのスピンのエネルギー

スピンの磁気モーメントは (3.1.11) 式や (3.1.12) 式、(3.1.22) 式から

$$m = 2\mu_B \frac{s}{\hbar} = \mu_B \sigma \quad (4.1.1)$$

と表せる。この磁気モーメントをある磁化  $M(\mathbf{r})$  中においた場合そのエネルギーは

$$E = -m \cdot M = -\mu_B \sigma \cdot M \quad (4.1.2)$$

と表せる。

ところでスピンを考慮した場合、電子はアップスピンもしくはダウンスピンのどちらかを持ちその波動関数はそれぞれ

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (4.1.3)$$

とかける。ここで、一般的なポテンシャルがある場合の Schrödinger 方程式は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.1.4)$$

である。この場合は  $\psi_{\uparrow}$  も  $\psi_{\downarrow}$  も同様な式を満たしている。

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} = E \psi_{\uparrow, \downarrow} \quad (4.1.5)$$

つまり、この場合はアップスピンとダウンスピンはお互いに独立でありスピンフリップは起こらない。

ところが磁化がある場合の Schrödinger 方程式は (4.1.2) 式より

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_B \sigma \cdot M(\mathbf{r}) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.1.6)$$

となる。ここで重要なことはパウリのスピン行列  $\sigma$  の成分がそれぞれ  $2 \times 2$  の行列であることである。つまり、アップスピンとダウンスピンが混ざり合うことが考えられる。まず、上式を展開する前にスケーリングを行う。

#### 4.1.2 スケーリング

(4.1.6) 式のスケーリングを行う。長さの次元を  $d$  とする。すると、

$$\left( -\tilde{\nabla}^2 - \frac{2m\mu_B|M|}{\hbar^2} d^2 \sigma \cdot \hat{M}(r) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{2mE}{\hbar^2} d^2 \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.1.7)$$

$$\left( -\tilde{\nabla}^2 - \bar{M} \sigma \cdot \hat{M}(r) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = (kd)^2 \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.1.8)$$

と無次元化できる。ここで、 $\tilde{\nabla}$  は無次元の  $\nabla$  であり  $\hat{M}$  は  $M$  の単位ベクトルである。よってパラメーターとしては

$$\frac{2mE}{\hbar^2} d^2 = (kd)^2 \quad (4.1.9)$$

$$\frac{2m\mu_B|M|}{\hbar^2} d^2 = \bar{M} \quad (4.1.10)$$

の2つとなる。

なお、これ以降においては簡略化のために (4.1.8) 式を次のように書くことにする。

$$\left( -\nabla^2 - \sigma \cdot M(r) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = (kd)^2 \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.1.11)$$

#### 4.1.3 スピントリップ

次に、(4.1.11) 式を展開していく。まず

$$\sigma \cdot M = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} M_x + \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} M_y + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} M_z \quad (4.1.12)$$

であるから

$$\sigma \cdot M \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{\downarrow} M_x - i\psi_{\downarrow} M_y + \psi_{\uparrow} M_z \\ \psi_{\uparrow} M_x + i\psi_{\uparrow} M_y - \psi_{\downarrow} M_z \end{pmatrix} \quad (4.1.13)$$

となり結局 (4.1.11) 式はアップスピン、ダウンスピンそれぞれに対して

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_{\uparrow} = ((kd)^2 + M_z) \psi_{\uparrow} + (M_x - iM_y) \psi_{\downarrow} \\ -\nabla^2 \psi_{\downarrow} = ((kd)^2 - M_z) \psi_{\downarrow} + (M_x + iM_y) \psi_{\uparrow} \end{cases} \quad (4.1.14)$$

となる。

これをみると、磁化ベクトルを導入することによって、それぞれのスピンに対して Schrödinger 方程式が独立ではなくなっている。しかしながらこの式を元に計算を行う場合、グリーン関数が知られているヘルムホルツ型の式ではなく扱いづらい。そこでこの式をヘルムホルツ方程式に変換する方法を考える。



#### 4.1.4 ヘルムホルツ方程式への変換

磁化ベクトル  $M$  が一定であるとみなせる領域に分割する。その  $j$  番目の領域において次のように新たな波動関数を定義する。

$$\psi_{\pm}^{(j)} = (M^{(j)} \pm M_z^{(j)})\psi_{\uparrow}^{(j)} \pm (M_x^{(j)} - iM_y^{(j)})\psi_{\downarrow}^{(j)} \quad (4.1.15)$$

この式に (4.1.14) 式を代入すれば、 $\psi_{\pm}^{(j)}$  はそれぞれヘルムホルツ方程式

$$-\nabla^2 \psi_{\pm}^{(j)} = ((kd)^2 \pm M^{(j)})\psi_{\pm}^{(j)} \quad (4.1.16)$$

に従う。ただし、 $M^{(j)} = |M^{(j)}|$  である。式 (4.1.16) を使えば、 $\psi_{+}^{(j)}$  と  $\psi_{-}^{(j)}$  に対して通常のポテンシャルのように解くことができる。

さらに  $\psi_{+}^{(j)}$  と  $\psi_{-}^{(j)}$  がわかれば  $\psi_{\uparrow}^{(j)}$  と  $\psi_{\downarrow}^{(j)}$  は逆変換

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{(j)} \\ \psi_{\downarrow}^{(j)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2M^{(j)}} \begin{pmatrix} \psi_{+}^{(j)} + \psi_{-}^{(j)} \\ \frac{M^{(j)} - M_z^{(j)}}{M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}} \psi_{+}^{(j)} - \frac{M^{(j)} + M_z^{(j)}}{M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}} \psi_{-}^{(j)} \end{pmatrix} \quad (4.1.17)$$

により求めることができる。つまり、この新しく定義した波動関数を用いればヘルムホルツ方程式が得られ、そのグリーン関数が分かっているので境界要素法を適用できる。しかしその際、磁化が一定の領域に分割する必要があり、磁壁のように磁気モーメントが連続的に変化する場合は扱いにくい。

そこでまず 1 次元系においてこの磁壁の影響を議論する。[25]

## 4.2 1次元系における磁壁の影響

### 4.2.1 磁区と磁壁の形状

3.4.2 節で述べたように磁区にはその周りに磁壁が形成される。磁化のない非磁性の試料に磁化した領域を導入した場合もその境界近傍に磁壁が形成される。そこで磁区の磁気モーメントを  $M = (0, M_y, 0)$  とし、 $M_y$  を図 4.1 のように幅  $L$  の磁区の両端に  $\lambda_w$  の磁壁がある場合を考える。 $x$  軸正の向きに振幅 1 でアップスピンの電子波が入射し、振幅  $r_{\uparrow, \downarrow}$  でアップスピン、ダウンスピンそれぞれで反射され、振幅  $t_{\uparrow, \downarrow}$  で透過するものとする。また、長さの次元  $d$  はこの幅  $L$  にとる。磁気モーメントが一定の領域に分割するので図 4.2 のように磁壁を短冊状に分割する。ここでは計算の都合上磁区も同様の幅で分割してある。次に、(4.1.16) 式を用いて転送行列法で計算を行う。

### 4.2.2 転送行列法

転送行列法ではそれぞれの領域での転送行列を求め全体の転送行列をそれぞれの領域での転送行列を次々と掛け合わせるによって求める。ここで注意しなければならないのは (4.1.11) 式は連続でなめらかであるが (4.1.16) 式はその逆変換 (4.1.17) 式からわかるように重みがかかるために連続ではない。よって、 $\psi_{\pm}$  を一度  $\psi_{\uparrow, \downarrow}$  に変換してから境界条件により転送行列を求める必要がある。

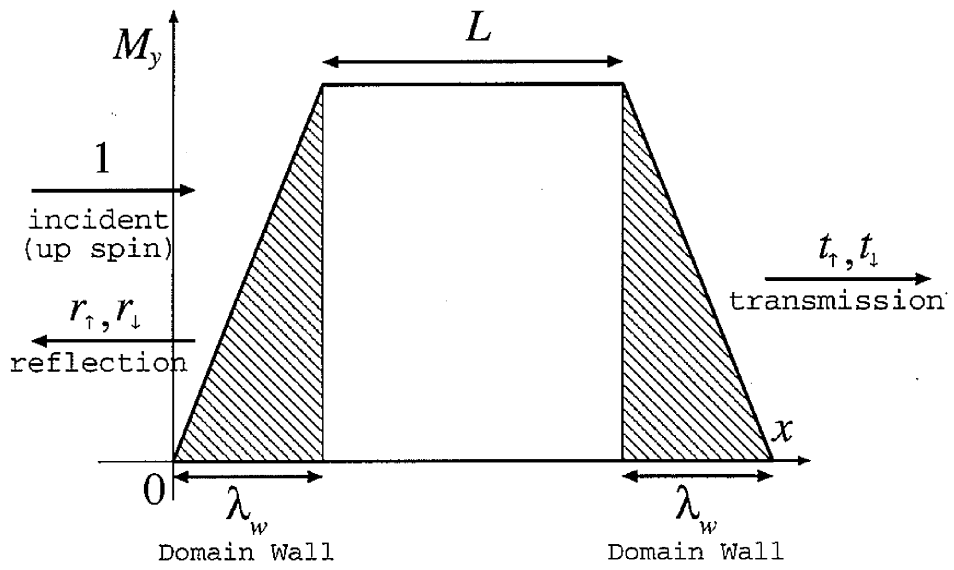


図 4.1: 磁区と磁壁

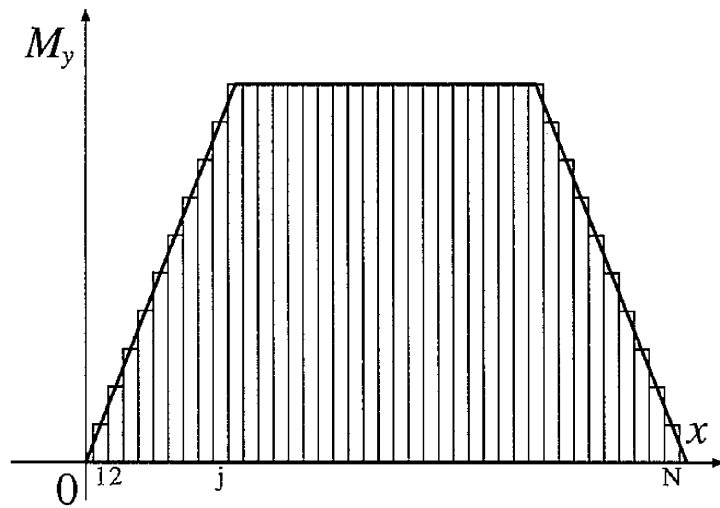


図 4.2: 磁区と磁壁の分割

まず、図 4.2 のように磁壁を幅  $a$  の領域に分割しある領域  $j$  に注目すれば領域  $j$  の左側での波動関数は

$$\psi_{l,\uparrow}^{(j)} = C_u e^{ikdx} + D_u e^{-ikdx} \quad (4.2.1)$$

$$\psi_{l,\downarrow}^{(j)} = C_d e^{ikdx} + D_d e^{-ikdx} \quad (4.2.2)$$

であり領域  $j$  の右側では

$$\psi_{r,\uparrow}^{(j)} = E_u e^{ikd(x-a)} + F_u e^{-ikd(x-a)} \quad (4.2.3)$$

$$\psi_{r,\downarrow}^{(j)} = E_d e^{ikd(x-a)} + F_d e^{-ikd(x-a)} \quad (4.2.4)$$

$$(4.2.5)$$

である。

領域  $j$  での波動関数は (4.1.16) 式から

$$\psi_{\pm}^{(j)} = A_{\pm}^{(j)} e^{ik_{\pm}^{(j)}x} + B_{\pm}^{(j)} e^{-ik_{\pm}^{(j)}x} \quad (4.2.6)$$

で表せる。ここで  $k_p m^{(j)} = \sqrt{(kd)^2 \pm M^{(j)}}$  とした。いま、 $M = (0, M_y, 0)$  としたので逆変換 (4.1.17) 式より

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{(j)} \\ \psi_{\downarrow}^{(j)} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2M_y^{(j)}} \begin{pmatrix} \psi_{+}^{(j)} + \psi_{-}^{(j)} \\ i(\psi_{+}^{(j)} - \psi_{-}^{(j)}) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2M_y^{(j)}} \begin{pmatrix} A_{+}^{(j)} e^{ik_{+}^{(j)}x} + B_{+}^{(j)} e^{-ik_{+}^{(j)}x} + A_{-}^{(j)} e^{ik_{-}^{(j)}x} + B_{-}^{(j)} e^{-ik_{-}^{(j)}x} \\ i(A_{+}^{(j)} e^{ik_{+}^{(j)}x} + B_{+}^{(j)} e^{-ik_{+}^{(j)}x} - A_{-}^{(j)} e^{ik_{-}^{(j)}x} + B_{-}^{(j)} e^{-ik_{-}^{(j)}x}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

である。

これらの式に境界条件

$$\begin{aligned} \psi_{l,\pm}^{(j)}(0) &= \psi_{\pm}^{(j)}(0) \\ \left. \frac{\partial \psi_{l,\pm}^{(j)}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} &= \left. \frac{\partial \psi_{\pm}^{(j)}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} \\ \psi_{\pm}^{(j)}(a) &= \psi_{r,\pm}^{(j)}(a) \\ \left. \frac{\partial \psi_{\pm}^{(j)}(x)}{\partial x} \right|_{x=a} &= \left. \frac{\partial \psi_{r,\pm}^{(j)}(x)}{\partial x} \right|_{x=a} \end{aligned}$$

を適用すれば転送行列  $T^{(j)}$  が決まる。さらに全体の転送行列は  $T = T^{(N)}T^{(N-1)} \dots T^{(1)}$  から求まる。

また領域 1 の左側の入射電子の波動関数は

$$\psi_{l,\uparrow}^{(1)} = e^{ikdx} + r_{\uparrow} e^{-ikdx} \quad (4.2.8)$$

$$\psi_{l,\downarrow}^{(1)} = r_{\downarrow} e^{-ikdx} \quad (4.2.9)$$

であり、領域  $N$  の右側の透過電子の波動関数は

$$\psi_{r,\uparrow}^{(N)} = t_{\uparrow} e^{ikd(x-Na)} \quad (4.2.10)$$

$$\psi_{r,\downarrow}^{(N)} = t_{\downarrow} e^{ikd(x-Na)} \quad (4.2.11)$$

である。よって先ほどの全体の転送行列とこれらの式からそれぞれのスピンの透過反射係数が得られる。

### 4.2.3 計算結果

まず最初に磁壁がある場合の結果を示す。なお、全て全体の要素数  $N = 60$  で  $|M| = M_y = 8$  として計算を行った。図 4.3 は磁壁の幅  $\lambda_w = 1/2$  としたときの各スピン状態の

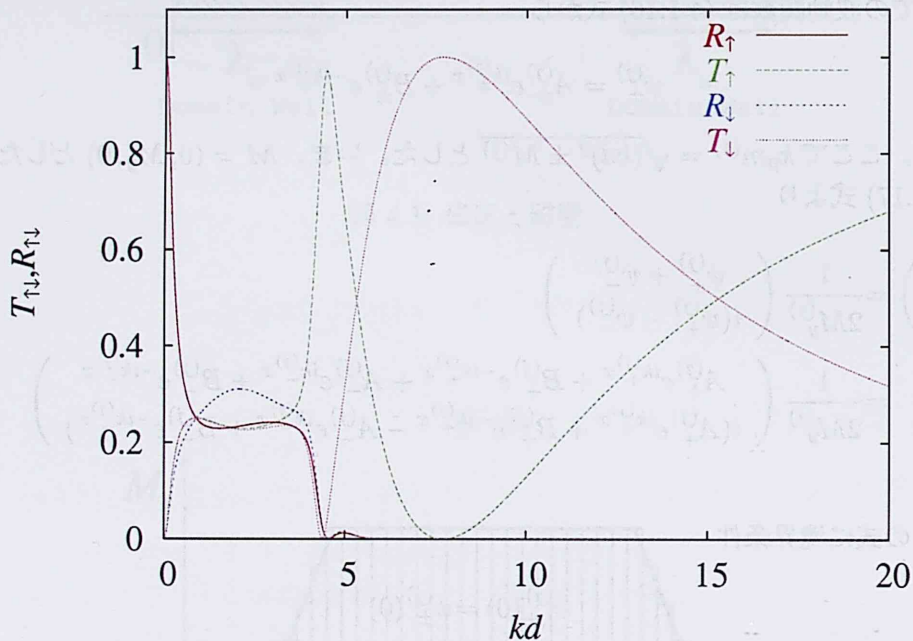


図 4.3:  $\lambda_w = 1/2$ 、 $L = 1$  での透過反射スペクトル

透過、反射スペクトルである。磁性散乱体によりスピントリップが起こりアップスピンだけではなくダウンスピンでも透過、反射していることがわかる。また、波数が低いときはアップスピンのままほとんど反射しており、高くなるとスピントリップが起こり始め、ダウンスピンでの透過、反射が起こる。さらに高くなるとアップスピンでそのまま透過していくようになる。

つぎに磁壁がない場合の結果を示す。図 4.3 と図 4.4 を比べるとスピントリップ自体は同様に起こっているがスペクトルが大きく異なっており、磁区の両側に磁壁がある場合とない場合とではその結果は異なる。

そこで磁区と磁壁を適当な幅に調整する。図 4.5 は磁壁がない場合の図 4.4 にかなり近

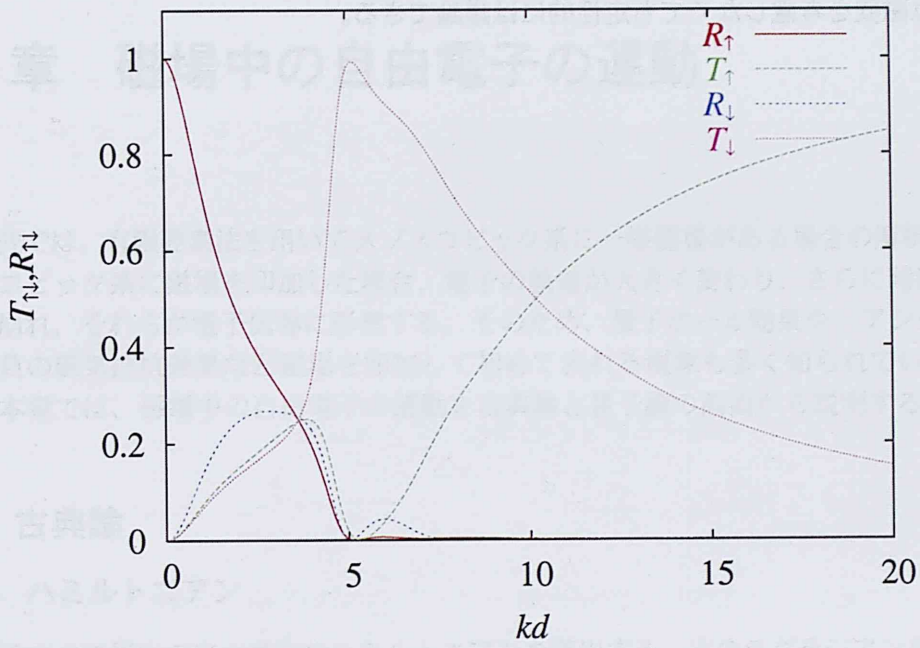


図 4.4:  $\lambda_w = 0$ ,  $L = 1$  での透過反射スペクトル

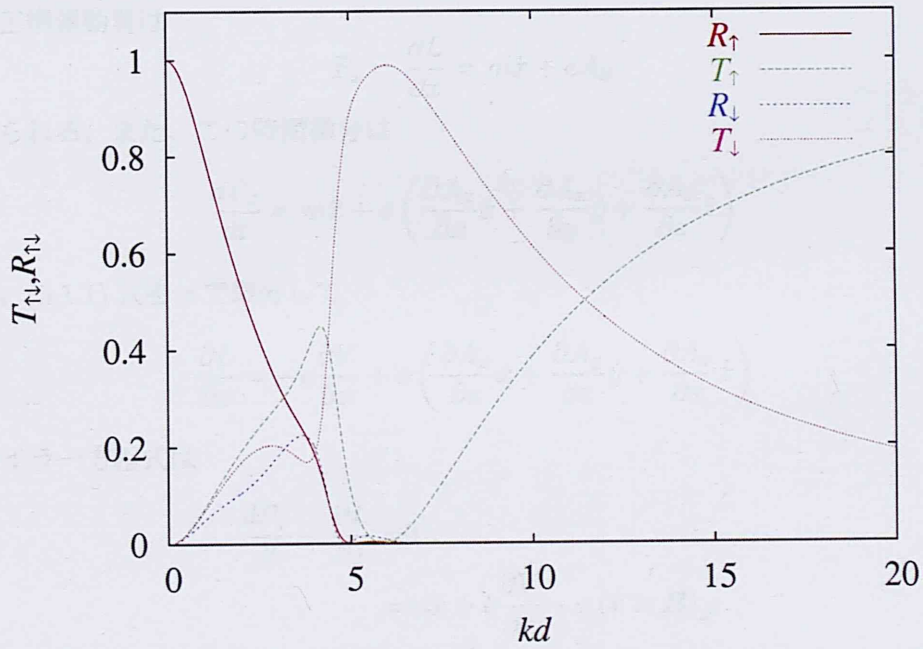


図 4.5:  $\lambda_w = 3/4$ ,  $L = 3/8$  での透過反射スペクトル

い。これは逆に言えば、磁壁がない場合でも有効な磁区幅を考えれば磁壁があるときと同じようなスペクトルが得られるということである。したがって、2次元系での磁性散乱体の影響は磁壁を考慮しなくても定性的には議論できる。

## 第5章 磁場中の自由電子の運動

本研究では、有限要素法を用いてメゾスコピック系に一様磁場がある場合の解析を行う。メゾスコピック系に磁場を印加した場合、電子の軌道が大きく変わり、さらに時間反転対称性も崩れ、それらが電子伝導に影響する。そのため、量子ホール効果や、アンダーソン局在や負の磁気抵抗効果など磁場を印加して初めて表れる現象も多く知られている。[21]そこで本章では、磁場中の自由電子の運動を古典論と量子論の両面から説明する。

### 5.1 古典論

#### 5.1.1 ハミルトニアン

古典論での磁場中の自由電子のハミルトニアンを導出する。次のラグランジアンを考える。

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 - eV + e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} \quad (5.1.1)$$

ここで、 $m$  は電子の質量、 $e$  は電子の電荷、 $V$  はスカラーポテンシャル、 $\mathbf{A}$  はベクトルポテンシャルである。また、 $V$  と  $\mathbf{A}$  は時間によらないものとする。この  $x$  成分を考える。 $x$  方向の正準運動量は

$$P_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + eA_x \quad (5.1.2)$$

で与えられる。また、この時間微分は

$$\frac{dP_x}{dt} = m\ddot{x} + e \left( \frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \dot{z} \right) \quad (5.1.3)$$

であり、(5.1.1) 式を  $x$  で微分して

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -e \frac{\partial V}{\partial x} + e \left( \frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_y}{\partial x} \dot{y} + \frac{\partial A_z}{\partial x} \dot{z} \right) \quad (5.1.4)$$

よりオイラー方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dP_x}{dt} - \frac{\partial L}{\partial x} &= 0 \\ &= m\ddot{x} + e \frac{\partial V}{\partial x} - e(\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B})_x \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

となる。 $y$  や  $z$  成分についても同様にとけば、電子の運動方程式として

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -e\mathbf{E} + e(\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}) \quad (5.1.6)$$

が得られる。これは、ローレンツ力を受けている場合の電子の運動方程式を示しており、この場合のラグランジアンとして (5.1.1) 式を用いればよいことがわかる。次に、このラグランジアンを用いてハミルトニアンを求める。

$$\begin{aligned} H &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - L \\ &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 + eV - e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

ここで、一般化運動量  $\mathbf{p}$  は

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + e\mathbf{A} \quad (5.1.8)$$

であるので、(5.1.7) 式は

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + eV \quad (5.1.9)$$

となる。(5.1.9) 式が、磁場中の電子のハミルトニアンとなる。

### 5.1.2 電子の運動

次に、2次元系に  $z$  方向の一様磁場  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  がある場合の電子の運動を考える。(5.1.9) 式より、ポテンシャルがない場合のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 \quad (5.1.10)$$

である。この正準方程式は

$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p} - e\mathbf{A}}{m} \\ -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = \dot{\mathbf{p}} \end{cases} \quad (5.1.11)$$

で与えられる。ここで、

$$\boldsymbol{\pi} = m\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{p} - e\mathbf{A} \quad (5.1.12)$$

を定義する。この時間微分はポアソン括弧  $(\ , \ )$  を用いて

$$\begin{aligned} \frac{d\boldsymbol{\pi}}{dt} &= (\boldsymbol{\pi}, H) \\ &= \frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \boldsymbol{\pi}}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (5.1.13)$$

となる。 $x, y$  成分で表すと

$$\begin{cases} 2m \frac{d\pi_x}{dt} = (\pi_x, \pi_x^2 + \pi_y^2) \\ 2m \frac{d\pi_y}{dt} = (\pi_y, \pi_x^2 + \pi_y^2) \end{cases} \quad (5.1.14)$$

である。ここで、

$$(\pi_x, \pi_x^2) = (\pi_y, \pi_y^2) = 0 \quad (5.1.15)$$

$$(\pi_x, \pi_y^2) = 2eB\pi_y \quad (5.1.16)$$

$$(\pi_y, \pi_x^2) = -2eB\pi_x \quad (5.1.17)$$



という関係が成り立つので、(5.1.14) 式に代入して

$$\begin{cases} \dot{\pi}_x - \omega\pi_y = 0 \\ \dot{\pi}_y + \omega\pi_x = 0 \end{cases} \quad (5.1.18)$$

を得る。ここで、 $\omega = \frac{eB}{m}$  はサイクロトロン振動数である。さらに、(5.1.12) 式を用いて

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \pi_x - m\omega y \\ \pi_y + m\omega x \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (5.1.19)$$

となる。

次に中心座標  $X$ 、 $Y$  を導入する。

$$X = x + \frac{\pi_y}{m\omega}, \quad Y = y - \frac{\pi_x}{m\omega} \quad (5.1.20)$$

$X$  と  $Y$  は、(5.1.19) 式より

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} -Y \\ X \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (5.1.21)$$

なので、時間によらず保存する。つまり、後で見るように回転運動の中心の座標となる。そして、相対座標として

$$x - X = -\frac{\pi_y}{m\omega} = \xi, \quad y - Y = \frac{\pi_x}{m\omega} = \eta \quad (5.1.22)$$

を定義する。 $t$  で微分し、(5.1.18) 式を用いれば

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} \eta \\ -\xi \end{pmatrix} \quad (5.1.23)$$

となる。これを行列で表すと、

$$\begin{bmatrix} \dot{\xi} \\ \dot{\eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \omega \\ -\omega & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \eta \end{bmatrix} \quad (5.1.24)$$

となる。より簡単に記述するため、(5.1.24) 式を

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{A}\mathbf{v} \quad (5.1.25)$$

と書くことにする。(5.1.25) 式を解くと

$$\mathbf{v}(t) = e^{\mathbf{A}t}\mathbf{v}(0) \quad (5.1.26)$$

となる。つぎに、 $\mathbf{A}^n$  を求めるために  $\mathbf{A}$  を対角化する。ここで、ユニタリ一行列  $\mathbf{P}$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{bmatrix} \quad (5.1.27)$$

を用いて、 $A^n$  は

$$A^n = P(P^{-1}AP)^n P^{-1} = P \begin{bmatrix} (i\omega)^n & 0 \\ 0 & (-i\omega)^n \end{bmatrix} P^{-1} \quad (5.1.28)$$

で表せる。よって、 $e^{At}$  は

$$\begin{aligned} e^{At} &= I + At + \cdots + \frac{A^n t^n}{n!} + \cdots \\ &= P \begin{bmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} (i\omega t)^n & 0 \\ 0 & \sum_{n=0}^{\infty} (-i\omega t)^n \end{bmatrix} P^{-1} \\ &= P \begin{bmatrix} e^{i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t} \end{bmatrix} P^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ -\sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.1.29)$$

となる。結局、相対座標  $\xi$ 、 $\eta$  は

$$\begin{bmatrix} \xi(t) \\ \eta(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ -\sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi(0) \\ \eta(0) \end{bmatrix} \quad (5.1.30)$$

となる。つまり、 $\xi$ 、 $\eta$  は角速度  $\omega$  での回転を表している。 $x = X + \xi$ 、 $y = Y + \eta$  なので、 $(x, y)$  は  $(X, Y)$  を中心とするサイクロトロン運動となる。

ここまでは、ポテンシャルがない場合を考えてきた。ポテンシャルがない場合は、中心座標  $(X, Y)$  は (5.1.21) 式より時間によらず保存する。では、ポテンシャルがある場合はどうなるだろうか。ポテンシャルがある場合のハミルトニアンは (5.1.9) 式で与えられる。 $(X, Y)$  の時間微分は

$$\begin{aligned} \dot{X} &= (X, H) = -\frac{E_y}{B} \\ \dot{Y} &= (Y, H) = \frac{E_x}{B} \end{aligned} \quad (5.1.31)$$

となる。ここで、 $E$  は電場である。 $R = (X, Y)$  として、ベクトルで表すと

$$\dot{R} = -\frac{E \times B}{B^2} \quad (5.1.32)$$

となる。つまり、中心座標  $R$  は電場  $E$  と磁場  $B$  に垂直な向きに速度  $-E/B$  で移動する。2次元系で  $z$  軸方向のみ磁場が印加されている場合には、図 5.1 のように  $xy$  面内で電場と垂直な向きに移動することがわかる。

## 5.2 量子論

ここまでは、古典論により磁場中の自由電子の運動を見てきた。つぎに、量子論で古典論との対応を見ながら議論する。

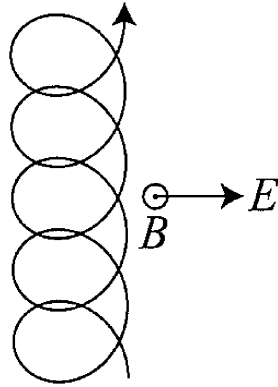


図 5.1: 電場と磁場がある場合の電子のサイクロトロン運動

### 5.2.1 交換関係

古典論との対応により、運動量、中心座標、相対座標を

$$\begin{cases} \pi_x = p_x - eA_x \\ \pi_y = p_y - eA_y \end{cases}, \quad \begin{cases} X = x + \frac{\pi_y}{m\omega} \\ Y = y - \frac{\pi_x}{m\omega} \end{cases}, \quad \begin{cases} \xi = -\frac{\pi_y}{m\omega} \\ \eta = \frac{\pi_x}{m\omega} \end{cases} \quad (5.2.1)$$

とおく。これらの交換関係を見ていく。まず、磁場は  $z$  軸方向のみ  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  とすれば

$$[x, \pi_x] = [y, \pi_y] = i\hbar, \quad [\pi_x, \pi_y] = i\hbar eB = i\frac{\hbar^2}{l^2} \quad (5.2.2)$$

が成り立つ。ここで、 $l = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$  は磁気長である。これを用いて、

$$[X, Y] = -il^2, \quad [\xi, \eta] = il^2 \quad (5.2.3)$$

を得る。つまり、量子論においては中心座標  $(X, Y)$  と相対座標  $(\xi, \eta)$  は交換せず、これらはそのどちらかのみしか決めることが出来ない。

つぎに、ハミルトニアン  $H$

$$H = \frac{\pi_x^2 + \pi_y^2}{2m} \quad (5.2.4)$$

を用いて、中心座標  $(X, Y)$  との交換関係を見ると、

$$[H, X] = [H, Y] = 0 \quad (5.2.5)$$

となる。つまり、古典論と同様にポテンシャルがない場合には  $(X, Y)$  は保存量である。

### 5.2.2 ランダウゲージ

前で見たとように、中心座標  $(X, Y)$  は保存するが、交換しないためそのどちらかのみしか決めることが出来ない。そこで  $X$  を固定して考えるために、ベクトルポテンシャルとして次のランダウゲージを用いる。

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0) \quad (5.2.6)$$

すると、

$$X = -il^2 \frac{\partial}{\partial y} \quad (5.2.7)$$

となる。波動関数を変数分離して、 $\psi(x, y) = \psi(x)\psi(y)$  とおき、 $X$  を固定すれば、

$$\begin{aligned} X\psi(x, y) &= -il^2 \frac{\partial}{\partial y} \psi(x, y) \\ \frac{\partial \psi(y)}{\partial y} &= i \frac{X}{l^2} \psi(y) \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

となるので、解けば

$$\psi(y) = C e^{i \frac{X}{l^2} y} \quad (5.2.9)$$

を得る。つまり、波動関数の  $y$  成分は平面波となる。よって、 $\psi(x, y) = e^{i \frac{X}{l^2} y} \psi(x)$  を Schrödinger 方程式に代入すれば

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{m\omega^2}{2} (x - X) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.2.10)$$

が得られる。これは、 $x = X$  を中心とした調和振動子とまったく同じ形式となっている。よって、エネルギーは

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (5.2.11)$$

と離散化される。この  $n$  はランダウ準位である。また、 $\psi(x)$  はエルミート多項式  $H_n$  を用いて

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/4} \sqrt{l}}} H_n \left( \frac{x - X}{l} \right) e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x - X}{l} \right)^2} \quad (5.2.12)$$

で与えられる。

$Y$  を固定する場合には次の形のランダウゲージを用いると良い。

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) \quad (5.2.13)$$

すると、

$$Y = il^2 \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.2.14)$$

であるので、 $\psi(x, y) = e^{-i \frac{Y}{l^2} x} \psi(x)$  として同様に解くことができる。

### 5.2.3 対称ゲージ

これまでは  $X$  や  $Y$  を固定してランダウゲージを用いて解いたが、 $X^2 + Y^2$  を固定することも出来る。この交換関係は

$$[X, X^2 + Y^2] = -2il^2 Y, \quad [Y, X^2 + Y^2] = 2il^2 X, \quad [H, X^2 + Y^2] = 0 \quad (5.2.15)$$

であり、 $X$  や  $Y$  とは交換しないが、保存量である。ベクトルポテンシャルとしては、次の対称ゲージを用いる。

$$\mathbf{A} = \left( -\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0 \right) \quad (5.2.16)$$

すると、 $X^2 + Y^2$  は

$$X^2 + Y^2 = \frac{l^4}{\hbar^2} (\pi_x^2 + \pi_y^2) + \frac{2l^2}{\hbar} (xP_y - yP_x) \quad (5.2.17)$$

となる。(5.2.11) 式より

$$\frac{(\pi_x^2 + \pi_y^2)}{2m} \psi(x, y) = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \psi(x, y) \quad (5.2.18)$$

なので、(5.2.17) 式は

$$X^2 + Y^2 = 2l^2 \left( n + M_z + \frac{1}{2} \right) \quad (5.2.19)$$

となる。ここで、 $M_z$  は角運動量で、 $\hbar M_z = xp_y - yp_x$  である。つまり、 $X^2 + Y^2$  を固定した場合は角運動量を固定した場合と同等である。よって、 $M_z$  の固有値を  $-m_z$  とおき、波動関数を極座標で表し  $\psi(r, \theta) = \psi(r)\psi(\theta)$  とすれば

$$M_z \psi(\theta) = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(\theta) = -i \frac{\partial}{\partial \theta} \psi(\theta) \quad (5.2.20)$$

より

$$\psi(\theta) = C e^{-im_z \theta} \quad (5.2.21)$$

となる。 $m_z$  は  $X^2 + Y^2 > 0$  より、 $m_z = n, n-1, \dots, -\infty$  である。 $\psi(r, \theta) = e^{-im_z \theta} \psi(r)$  を Schrödinger 方程式に代入して、極座標で表示すれば

$$\left( r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \left( \frac{r^2}{2l^2} - m \right)^2 + \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{2r^2}{l^2} \right) \psi(r) = 0 \quad (5.2.22)$$

となる。この微分方程式の解は、ラゲール多項式  $L_n^{m_z}$  を用いて、

$$\psi(r) = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{N!}{(N+m_z)!}} e^{-\frac{r^2}{4l^2}} \left( \frac{r}{\sqrt{2}l} \right)_z^m L_n^{m_z} \left( \frac{r^2}{2l^2} \right) \quad (5.2.23)$$

となる。

#### 5.2.4 ゲージ変換

これまで、ベクトルポテンシャルとしていくつかのゲージを用いて議論してきた。あるベクトルポテンシャルのゲージ  $\mathbf{A}$  から別のゲージ  $\mathbf{A}'$  への変換を考える。ここで、

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi, \quad V' = V - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad (5.2.24)$$

とする。これらを

$$\mathbf{E} = -\nabla V - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (5.2.25)$$

に代入すれば、 $\mathbf{A}$  と  $\mathbf{A}'$ 、 $V$  と  $V'$  は同一の式を満し、電場  $\mathbf{E}$  と磁場  $\mathbf{B}$  を変えない変換であることがわかる。つまり、古典的にはこのようなゲージ変換に対して不変である。

つぎに、 $\mathbf{A}'$  と  $V'$  を Schrödinger 方程式に代入すれば、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{A}') = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla + e\mathbf{A} + e\nabla\chi)^2 \psi(t, \mathbf{A}') - e \left( V - \frac{\partial\chi}{\partial t} \right) \psi(t, \mathbf{A}') \quad (5.2.26)$$

となる。さらに、波動関数を  $\psi(t, \mathbf{A}') = e^{-\frac{i}{\hbar}e\chi} \psi'(t, \mathbf{A}')$  と変換すれば、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t, \mathbf{A}') = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla + e\mathbf{A} + e)^2 \psi'(t, \mathbf{A}') - eV \psi'(t, \mathbf{A}') \quad (5.2.27)$$

を得る。つまり、波動関数の位相を変えれば、ゲージ変換に対して不変となる。

例えば、ランダウゲージ  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$  から  $\mathbf{A}' = (-By, 0, 0)$  への変換は  $\nabla\chi = (-By, -Bx, 0)$  より、

$$\chi = -Bxy \quad (5.2.28)$$

となるので、位相  $e^{i\frac{e\chi}{\hbar}}$  を波動関数にかければ変換できる。

### 5.2.5 ランダウ準位の縮退

無限系における磁場中の電子の状態数を求める。 $X$  を固定した場合、波動関数の  $y$  成分は平面波となり、

$$\psi(y) = e^{-i\frac{X}{l^2}y} = e^{-ik_X y} \quad (5.2.29)$$

であった。ここに周期的境界条件を課す。 $L_x \times L_y$  の長方形が無限に並んでいる系を考え、そのひとつに収まっている電子の数を求める。 $\psi(-L_y/2) = \psi(L_y/2)$  より、 $X$  は

$$\frac{X}{l^2} = k_X = \frac{2\pi n}{L_y}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (5.2.30)$$

となる必要がある。さらに、 $-L_x/2 \leq X \leq L_x/2$  でなければならないので、

$$|k_X| \leq \frac{L_x}{2l^2} \quad (5.2.31)$$

を満たす。よって、 $L_x \times L_y$  の中に納まっている電子の数は  $k_X$  が長さ  $L_x/l^2$  の中に  $2\pi/L_y$  の間隔で電子が存在するので、ひとつのランダウ準位に対して

$$\frac{L_x L_y}{2\pi l^2} \quad (5.2.32)$$

の電子数がある。すべての可能なランダウ準位で足しあわせば、単位面積当たり

$$\Gamma(E) = \frac{1}{L_x L_y} \sum_n \frac{L_x L_y}{2\pi l^2} \theta(E - E_n) = \sum_n \frac{1}{2\pi l^2} \theta(E - E_n) = \sum_n \frac{m}{2\pi \hbar^2} \hbar\omega \theta(E - E_n) \quad (5.2.33)$$

である。ここで、 $\theta$  はステップ関数である。よって、状態密度  $N(E)$  は単位エネルギー中の電子数なので

$$N(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} = \sum_n \frac{1}{2\pi l^2} \delta(E - E_n) = \sum_n \frac{m\omega}{2\pi \hbar} \delta(E - E_n) \quad (5.2.34)$$

で与えられる。

また、磁場がない場合の単位体積あたりの電子数は

$$\Gamma(E) = \frac{mE}{2\pi\hbar^2} \quad (5.2.35)$$

であるので、(5.2.33) 式と比べるとひとつのフェルミ準位に対して  $1/(2\pi l^2)$  だけ縮退しており、磁場がない場合の電子数を  $\hbar\omega$  の幅で量子化した形になっている。

### 5.3 AB 効果と AAS 効果

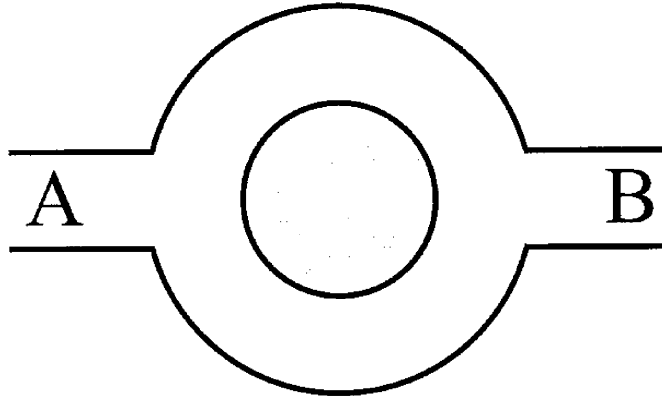


図 5.2: AB リング

図 5.2 のようなリングに磁場を印加したときの伝導率を考える。[24] A から B への遷移は、パスインテグラルにより

$$\begin{aligned} \langle B|A \rangle &= \int_A^B D\mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})} \\ &= \int_A^B D\mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_A^B dt L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})} \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

で与えられる。ここで、 $\int D\mathbf{r}$  は可能なすべてのパスに対してとるものとし、 $S$  は作用、 $L$  はラグランジアンで (5.1.1) 式で与えられる。

まず図 5.3 のように、リングを 1 周するようなパスを考える。ここで、

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - eV + e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} \\ &= L_0(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) + e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

とおく。よって、(5.3.1) 式は

$$\begin{aligned} \langle B|A \rangle &= \int_A^B D\mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_A^B dt e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_A^B dt L_0(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})} \\ &= \int_A^B D\mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_A^B dt e\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}} F_0 \end{aligned} \quad (5.3.3)$$

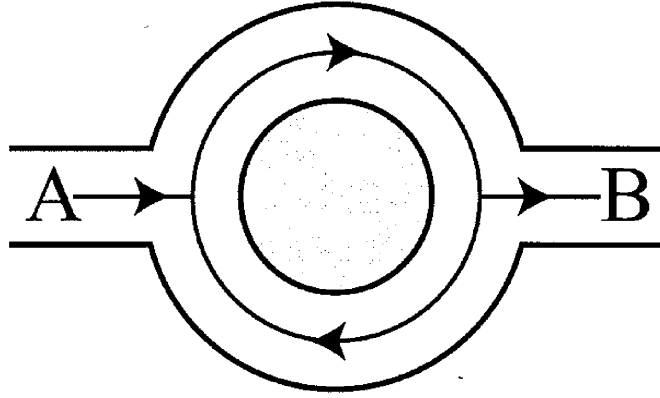


図 5.3: リングを周回する軌道

となる。ここで、 $F_0 = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} dt L_0(r, \dot{r})}$  とした。また、リングを1周するので

$$\frac{ie}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} dt \dot{r} \cdot \mathbf{A} = \frac{ie}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} dt \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \mathbf{A} = \frac{ie}{\hbar} \left( \pm \oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} \right) = \pm \frac{ie}{\hbar} \int d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{A} = \pm \frac{ie}{\hbar} \Phi \quad (5.3.4)$$

となる。よって、このパスでの遷移は

$$\langle B|A \rangle_0 = \left( e^{\frac{ie}{\hbar} \Phi} + e^{-\frac{ie}{\hbar} \Phi} \right) F_0 \quad (5.3.5)$$

となる。これ以外のパスでの遷移を  $\langle B|A \rangle'$  とすれば、 $\langle B|A \rangle = \langle B|A \rangle_0 + \langle B|A \rangle'$  であるので、この遷移確率は

$$|\langle B|A \rangle|^2 = |\langle B|A \rangle_0|^2 + |\langle B|A \rangle'|^2 + 2\Re[\langle B|A \rangle_0 \langle B|A \rangle'^*] \quad (5.3.6)$$

となる。ここで  $|\langle B|A \rangle'|^2$  は磁束  $\Phi$  によらないので、無視する。 $\Re[\langle B|A \rangle_0 \langle B|A \rangle'^*]$  は、お互いに相関がないためすべての可能なパスを取ったときに、位相がランダムなので消えてしまう。よって、 $|\langle B|A \rangle_0|^2$  のみを考える。

$$|\langle B|A \rangle_0|^2 = 4|F_0|^2 \cos^2\left(\frac{e}{\hbar} \Phi\right) = 2|F_0|^2 \left(1 + \cos\left(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right) \quad (5.3.7)$$

となる。 $\Phi_0 = h/e$  は磁束量子である。つまり、このときコンダクタンスは  $\Phi_0/2$  の周期で振動する。これが AAS 振動である。

次に、図 5.4 のようなリングの上部分と下部分を通る場合を考える。それぞれのパスを 1 と 2 とし、これらのパスはほかのパスとの相関はないためこの 2 つのパスのみを考える。この遷移確率は、

$$|\langle B|A \rangle_1 + \langle B|A \rangle_2|^2 = |\langle B|A \rangle_1|^2 + |\langle B|A \rangle_2|^2 + 2\Re[\langle B|A \rangle_1 \langle B|A \rangle_2^*] \quad (5.3.8)$$

で与えられる。 $|\langle B|A \rangle_1|^2$  と  $|\langle B|A \rangle_2|^2$  は磁束  $\Phi$  には依存しないので無視する。よって、

$$2\Re[\langle B|A \rangle_1 \langle B|A \rangle_2^*] = 2\Re\left[e^{\frac{ie}{\hbar} \left(\int_1 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \int_2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right)} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\int_1 dt L(r, \dot{r}) - \int_2 dt L(r, \dot{r})\right)}\right] \quad (5.3.9)$$



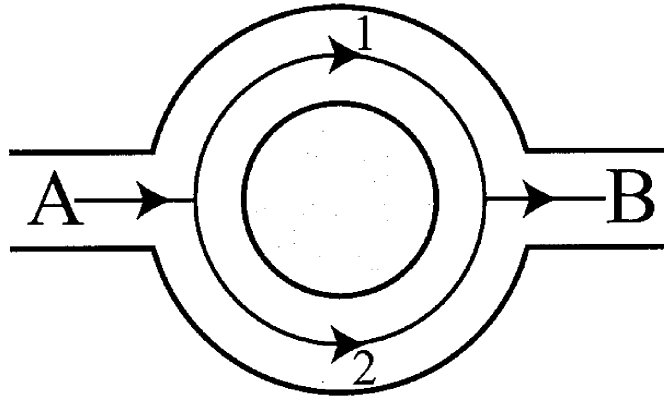


図 5.4: リングの上を通る軌道 (1) と下を通る軌道 (2)

であるので、 $i\chi_{12} = \frac{i}{\hbar} \int_1 dt L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) - \int_2 dt L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})$  とおけば、

$$2\Re[\langle B|A \rangle_1 \langle B|A \rangle_2^*] = 2\Re[e^{\frac{ie}{\hbar} \oint dr \cdot \mathbf{A}} e^{i\chi_{12}}] = 2\Re[e^{i\frac{e}{\hbar} \Phi + \chi_{12}}] = 2\cos(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} + \chi_{12}) \quad (5.3.10)$$

となる。つまり、この場合にはコンダクタンスに  $\Phi_0$  の振動が現れる。これが AB 振動である。

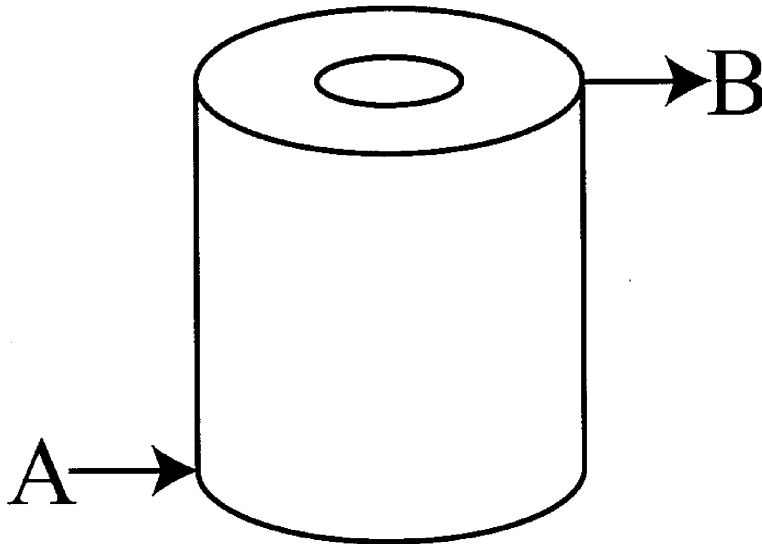


図 5.5: 円筒状の導体

図 5.2 に示す AB リングにおいては、AAS 効果と AB 効果の両方が観測されている。しかし、図 5.5 のような円筒状の導体の場合には、AAS 効果のみで AB 効果は消えてしまう。これは (5.3.10) 式では、 $\Phi_0$  に加え  $\chi_{12}$  によるランダムな位相が加わるが、これが可能なパスが増えるとそのランダムな成分の影響が大きくなり消えてしまうためである。

これらの効果は磁場がない場合も存在する。例えば、次のベクトルポテンシャルを想定

する。

$$\mathbf{A} = \left( \frac{\Phi}{2\pi r} \cos \theta, \frac{\Phi}{2\pi r} \sin \theta, 0 \right) \quad (5.3.11)$$

このとき、 $r \neq 0$ であれば

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} = 0 \quad (5.3.12)$$

となり、リングに磁場は存在しない。しかしながら、

$$\oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \int_0^{2\pi} \sqrt{A_x^2 + A_y^2} r d\theta = \Phi \quad (5.3.13)$$

であるため、磁束  $\Phi$  がリングを貫いている。これまで見てきたように AB 効果や AAS 効果では磁場ではなく磁束で振動するので、貫く磁束があればこれらの効果が現れる。この AB 効果は、超伝導体を用いてリングの中心に完全に磁束を閉じ込めリング状には磁場がない実験でも現れることがわかっており、それによって電子は磁場ではなくベクトルポテンシャルを感じているということが証明されている。

## 第6章 境界要素法

境界要素法は系の支配方程式とそれに対応したグリーン関数を用いて系の内部の波動関数を境界上の積分で表す計算方法である。考えている空間全体を離散化する必要のある有限要素法と比べて境界を離散化するのみでよいのでメモリが少なくすむという利点がある。さらに内部の波動関数を求めることなく透過確率、反射確率を得ることができる。本研究では2次元の境界要素法を磁性散乱体がある場合にも適用できる手法を開発し、メゾスコピック系の解析を行う。

そこで、本章ではまず磁性散乱体がない場合で境界要素法 [26, 27, 28] を説明する。

### 6.1 境界要素法とは

#### 6.1.1 グリーン関数

ポテンシャルがない場合の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) \quad (6.1.1)$$

は  $\phi(\mathbf{r}, t) = T(t)\psi(\mathbf{r})$  と変数分離すれば

$$i\hbar \frac{dT}{dt} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} T(t) = 0 \quad (6.1.2)$$

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + k^2 \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (6.1.3)$$

となる。ここで、 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  である。(6.1.3) 式はヘルムホルツ方程式である。実は、波動方程式や拡散方程式も変数分離することによヘルムホルツ方程式となる。つまり、これらの問題における支配方程式はヘルムホルツ方程式である。より一般的にポテンシャルがある場合も含めて

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + k^2 \psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \quad (6.1.4)$$

とかける。ここで

$$(\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6.1.5)$$

を満たすグリーン関数  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  を定義する。 $F(\mathbf{r}')$  に (6.1.5) 式をかけて積分すれば、

$$(\nabla^2 + k^2) \int F(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = F(\mathbf{r}) \quad (6.1.6)$$

を得る。これを (6.1.5) 式と比べれば

$$\psi(\mathbf{r}) = \int F(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (6.1.7)$$

となる。したがってグリーン関数  $G(r, r')$  がわかれば  $\psi(r)$  を知ることができる。

そこで、ここでは1次元のグリーン関数を求める。(6.1.5) 式の  $x - x' \rightarrow x$  と置き換えれば

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2\right) G(x) = \delta(x) \quad (6.1.8)$$

となる。ここで  $G(x)$  をフーリエ変換した

$$H(q) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x) e^{-iqx} dx \quad (6.1.9)$$

とすれば (6.1.8) 式のフーリエ変換は

$$(-q^2 + k^2) H(q) = 1 \quad (6.1.10)$$

$$H(q) = \frac{-1}{q^2 - k^2} \quad (6.1.11)$$

である。よってグリーン関数  $G(x)$  は

$$G(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} H(q) e^{iqx} dq = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-1}{q^2 - k^2} e^{iqx} dq = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-1}{(q+k)(q-k)} e^{iqx} dq \quad (6.1.12)$$

となる。ここで、 $k$  を少しだけずらして  $k \rightarrow k\sqrt{1+i\Delta} \sim k(1+i\Delta/2)$  とすれば

$$G(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(q+k(1+i\Delta/2))(q-k(1+i\Delta/2))} e^{iqx} dq \quad (6.1.13)$$

であるから、留数を使って積分すれば

$$G(x) = \begin{cases} \frac{-1}{2\pi} 2\pi i \frac{1}{2k(1+i\Delta/2)} e^{ik(1+i\Delta/2)x} \stackrel{\Delta \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2ki} e^{ikx} & x \geq 0 \\ \frac{1}{2\pi} 2\pi i \frac{1}{-2k(1+i\Delta/2)} e^{ik(1+i\Delta/2)x} \stackrel{\Delta \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{2ki} e^{-ikx} & x < 0 \end{cases} \\ = \frac{1}{2ki} e^{ik|x|} \quad (6.1.14)$$

となる。これが1次元のグリーン関数である。

2次元のグリーン関数も (6.1.5) 式から求められるが導出が難解であるのでここでは省略する。2次元のグリーン関数は0次第1種のハンケル関数  $H_0^{(1)}$  で表すことができ

$$G(r, r') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|r - r'|) \quad (6.1.15)$$

である。

## 6.1.2 境界積分方程式

2次元の Schrödinger 方程式は

$$-\nabla'^2 \psi(r') = k^2 \psi(r') \quad (6.1.16)$$

である。この  $\psi$  をグリーン関数を用いて境界条件を内包した積分方程式で表すことができる。

上式に対応したグリーン関数が満たす式は

$$-\nabla'^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6.1.17)$$

である。これら 2 式から波動関数  $\psi$  は

$$\begin{aligned} & \int (G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla'^2 \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla'^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) d\mathbf{r}' \\ &= \int (-G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') k^2 \psi(\mathbf{r}') + \psi(\mathbf{r}') k^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \psi(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) d\mathbf{r}' \\ &= \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (6.1.18)$$

で表すことができる。

さらにガウスの定理を使えば

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \int (G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla'^2 \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla'^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) d\mathbf{r}' \\ &= \int \nabla' \cdot (G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) d\mathbf{r}' \\ &= \oint (G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \cdot \mathbf{n} dS' \\ &= \oint \left( G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \cdot \mathbf{n} dS' \end{aligned} \quad (6.1.19)$$

と境界積分表示することができる。ここで、積分は境界上での線積分とし  $\mathbf{n}$  は境界からみて外向きの単位法線ベクトルである。

つまり、境界上の波動関数とその法線方向の微係数がわかっているならばこの (6.1.19) 式から内部の波動関数を計算できる。

### 6.1.3 境界条件

前節より境界上の波動関数とその法線方向の微係数がわかっているならば内部の波動関数を求めることができることがわかった。しかしながら、多くの場合そのどちらかが未知変数となっており解析的に解くことはほとんど不可能である。そこで数値計算で計算する場合、まず  $\mathbf{r}$  を境界上のすべての離散点において境界上の未知変数に対する連立方程式をたてそれを解くことにより未知変数を求める必要がある。

この境界条件を分類すると 3 つに分類することができる。

	境界条件	未知変数
第 1 種	波動関数の値 (Dirichlet 境界条件)	波動関数の法線方向の微係数
第 2 種	波動関数の法線方向の微係数 (Neumann 境界条件)	波動関数の値
第 3 種	波動関数の値とその微係数の線形結合	その結合の定数

第 3 種はわかりにくいたとえば後で述べるような透過、反射係数がそれにあたる。

## 6.2 境界要素法の適用

### 6.2.1 未知変数の連立方程式とグリーン関数の特異性

境界上の未知変数を求める場合、(6.1.19) 式において一つ問題となる事がある。2次元のグリーン関数は(6.1.15) 式より

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (6.2.1)$$

であるがハンケル関数  $H_0^{(1)}(z)$  は第1種と第2種のベッセル関数  $J_0(z)$  と  $Y_0(z)$  を使って次のように定義される。[22]

$$H_0^{(1)}(z) = J_0(z) + iY_0(z) \quad (6.2.2)$$

さらに、ベッセル関数は次のように展開できる。

$$\begin{aligned} J_0(z) &= 1 - \frac{\frac{1}{4}z^2}{(1!)^2} + \frac{(\frac{1}{4}z^2)^2}{(2!)^2} + \dots \\ Y_0(z) &= \frac{2}{\pi} \{ \ln(z/2) + \gamma \} J_0(z) + \dots \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

ただし、 $\gamma$  はオイラ一定数である。よって、 $z$  が十分に小さければハンケル関数は

$$H_0^{(1)}(z) \approx 1 + i\frac{2}{\pi} (\ln(z) + \gamma - \ln(2)) \quad (6.2.4)$$

と近似できる。つまり、グリーン関数は  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  となる点で  $\log$  で発散する。

ここで、(6.1.19) 式にもどったとき  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  を含む項は積分により収束してしまうので問題ないが  $\nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  を含む項は発散してしまう。そこで、

$$\oint (\psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \cdot n dS' \quad (6.2.5)$$

を図6.1のように  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  近傍で、主値積分と  $\mathbf{r}$  を内部に含む半径  $\rho$  の微少な円弧に分離し積分を評価した後に  $\rho \rightarrow 0$  とする。つまり、(6.2.5) 式を主値積分と微少な円弧部分に分けて表すと

$$\text{P.V.} \int (\psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \cdot n dS' + \lim_{\rho \rightarrow 0} \int_0^{2\pi - \beta} (\psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \cdot n \rho d\alpha \quad (6.2.6)$$

となる。ただし、P.V. はコーシーの主値積分を表す。

ところで  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  近傍で  $\nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  は

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial x'} &\sim -\frac{1}{2\pi} \frac{x' - x}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \\ \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial y'} &\sim -\frac{1}{2\pi} \frac{y' - y}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \end{aligned} \quad (6.2.7)$$

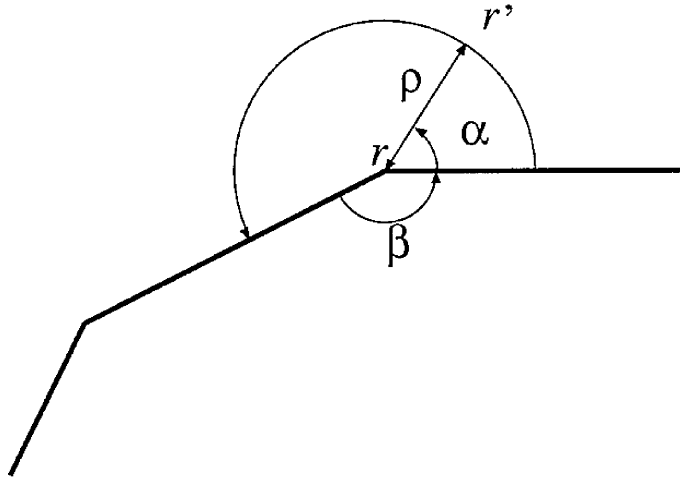


図 6.1:  $r = r'$  の時の取り扱い

である。また、円弧部分の外向き法線方向の単位ベクトルは  $(\cos \alpha, \sin \alpha)$  であり、 $x'$  と  $y'$  は  $x' = x + \rho \cos \alpha$ 、 $y' = y + \rho \sin \alpha$  であるから (6.2.6) 式の第 2 項は

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2\pi} \lim_{\rho \rightarrow 0} \int_0^{2\pi-\beta} \psi(x + \rho \cos \alpha, y + \rho \sin \alpha) \frac{1}{\rho^2} (\rho \cos \alpha, \rho \sin \alpha) \cdot (\cos \alpha, \sin \alpha) \rho d\alpha \\
 & = -\lim_{\rho \rightarrow 0} \int_0^{2\pi-\beta} \psi(x + \rho \cos \alpha, y + \rho \sin \alpha) \frac{d\alpha}{2\pi} \\
 & = -\psi(x, y) \int_0^{2\pi-\beta} \frac{d\alpha}{2\pi} \\
 & = -\left(1 - \frac{\beta}{2\pi}\right) \psi(x, y) \tag{6.2.8}
 \end{aligned}$$

となる。

よって、 $r = r'$  を含むときの境界積分方程式は主値積分を使って

$$\frac{\beta}{2\pi} \psi(x, y) = \text{P.V.} \oint \left( G(r, r') \frac{\partial}{\partial n'} \psi(r') - \psi(r') \frac{\partial}{\partial n'} G(r, r') \right) dS' \tag{6.2.9}$$

で表せる。

## 6.2.2 未知変数の決定

次に (6.2.9) 式を用いて連立方程式をたて、未知変数を求める。

数値計算を行うに当たって境界を離散化し境界条件を与えなければならない。通常、境界条件として節点における値が与えられるので要素の始点と終点の間の値を補完する必要がある。代表的な補完法としては要素内で一定とする一定要素、線形に補完する 1 次要素、2 次補完する 2 次要素があるが本研究では 1 次要素を用いて計算を行っている。

そこで、1 次要素による離散化を説明する。図 6.2 のように境界を  $N$  個の節点に分割し、

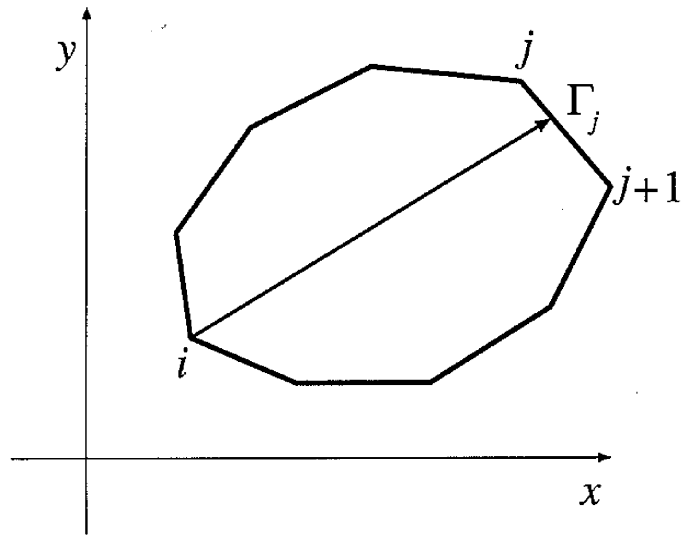


図 6.2: 境界の分割

それぞれでの座標を  $r_j$  とすれば  $j$  番目の要素  $\Gamma_j$  は

$$\Gamma_j = N_1(\xi)r_j + N_2(\xi)r_{j+1} \quad (6.2.10)$$

と線形補完できる。ここで  $N_1, N_2$  は

$$N_1 = \frac{1-\xi}{2}, \quad N_2 = \frac{1+\xi}{2}, \quad -1 \leq \xi < 1 \quad (6.2.11)$$

であり図 6.3 のような形になっている。

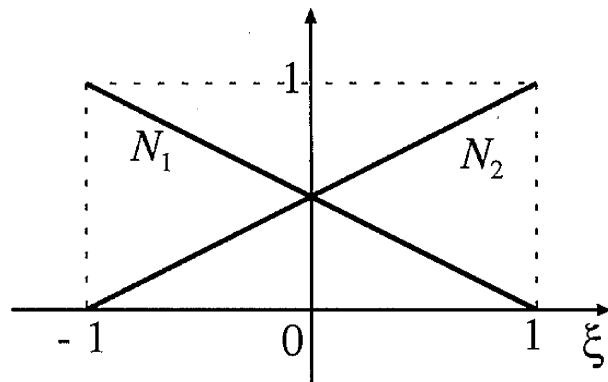


図 6.3: 形状関数

これらを使って、要素  $\Gamma_j$  での波動関数の値とその法線方向の微係数の値は

$$\begin{aligned} \psi(\Gamma_j(\xi)) &= N_1(\xi)\psi_j + N_2(\xi)\psi_{j+1} \\ \frac{\partial \psi(\Gamma_j(\xi))}{\partial n} &= N_1(\xi) \frac{\partial \psi_j}{\partial n} + N_2(\xi) \frac{\partial \psi_{j+1}}{\partial n} \end{aligned} \quad (6.2.12)$$



と補完できる。

よって、これらを使って (6.2.9) 式の右辺の第 1 項と第 2 項は

$$\int_{\Gamma_j} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \psi(\mathbf{r}') dS' = A_{1,i,j} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_j)}{\partial n_j} + A_{2,i,j+1} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_{j+1})}{\partial n_{j+1}} \quad (6.2.13)$$

$$\int_{\Gamma_j} \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dS' = B_{1,i,j} \psi(\mathbf{r}_j) + B_{2,i,j+1} \psi(\mathbf{r}_{j+1}) \quad (6.2.14)$$

と表せる。ただし、

$$A_{1,i,j} = \int_{\Gamma_j} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') N_1 dS' \quad A_{2,i,j+1} = \int_{\Gamma_j} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') N_2 dS' \quad (6.2.15)$$

$$B_{1,i,j} = \int_{\Gamma_j} \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} N_1 dS' \quad B_{2,i,j+1} = \int_{\Gamma_j} \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} N_2 dS' \quad (6.2.16)$$

である。

ここで  $j$  番目の内角を  $\beta_j$  として

$$B_{ij} = B_{1,i,j} + B_{2,i,j}, \quad i \neq j \quad (6.2.17)$$

$$B_{ii} = B_{1,i,i} + B_{2,i,i} + \frac{\beta_i}{2\pi}, \quad i = j \quad (6.2.18)$$

$$A_{ij} = A_{1,i,j} + A_{2,i,j} \quad (6.2.19)$$

と定義すれば、(6.2.9) 式は行列を使って

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & \cdots & A_{2N} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial \psi_1 / \partial n \\ \partial \psi_2 / \partial n \\ \cdots \\ \cdots \\ \partial \psi_N / \partial n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & \cdots & B_{1N} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & \cdots & B_{2N} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ B_{N1} & B_{N2} & \cdots & \cdots & B_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \cdots \\ \cdots \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (6.2.20)$$

と表すことができる。ただし、簡単にするため  $\psi(\mathbf{r}_j)$  を  $\psi_j$  と書いた。あとはこの解を求めれば未知変数を求めることができる。

### 6.2.3 ダブルポイント

前節の方法を実際に適用するには一つ注意しなければならない点がある。1 次要素ではそれぞれの節点での波動関数やその法線方向微分を与える。ここで図 6.4 のように角度が鋭くなっている場合、波動関数は問題ないが法線方向微分は図のどちらの法線方向微分を与えるかで大きく結果が異なってしまう。そこで、節点  $j$  の近くを拡大した図 6.5 のように内角もしくは外角が鋭くなっている場合はその節点を取り除きその両側の要素を少しだけ短くし 2 つの新たな節点を作る。そうすることにより法線方向をきちんと決定することができる。ただし、図の破線となっている部分の積分は行わない。このように 1 次要素は 0 次要素と比べて節点を少なくしても精度が下がりにくいといった利点があるが、0 次要素でダブルポイントをとるようなことはする必要がなく 1 次要素の方がプログラムが複雑になるといった欠点もある。

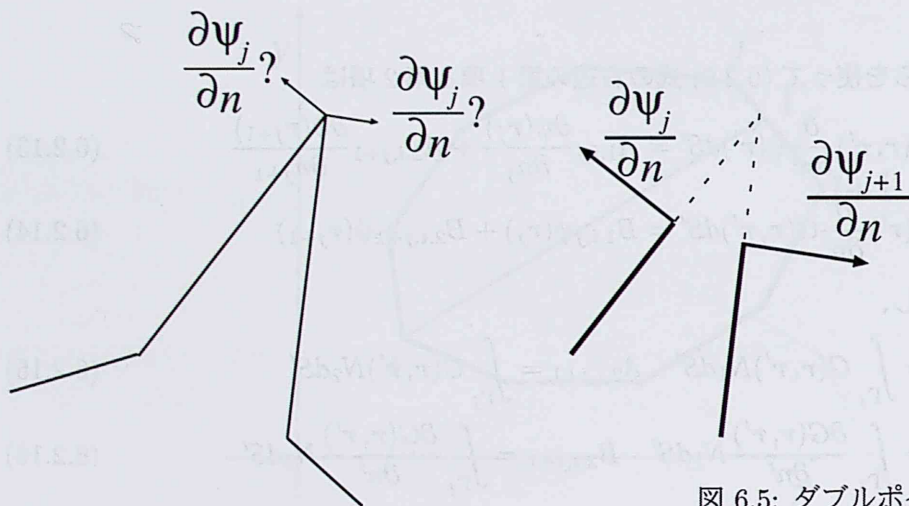


図 6.5: ダブルポイント

図 6.4: 角度が鋭くなっている場合

### 6.2.4 リード線の接続

前節までの方法を使えば第1種と第2種の境界条件に囲まれた任意の形状の領域の解析が行えることがわかった。次に任意の形状の試料にリード線(量子細線)をつなげた場合どのようなようになるか考えてみる。たとえば、図 6.6 のようなひょうたん型の試料の左右にリー

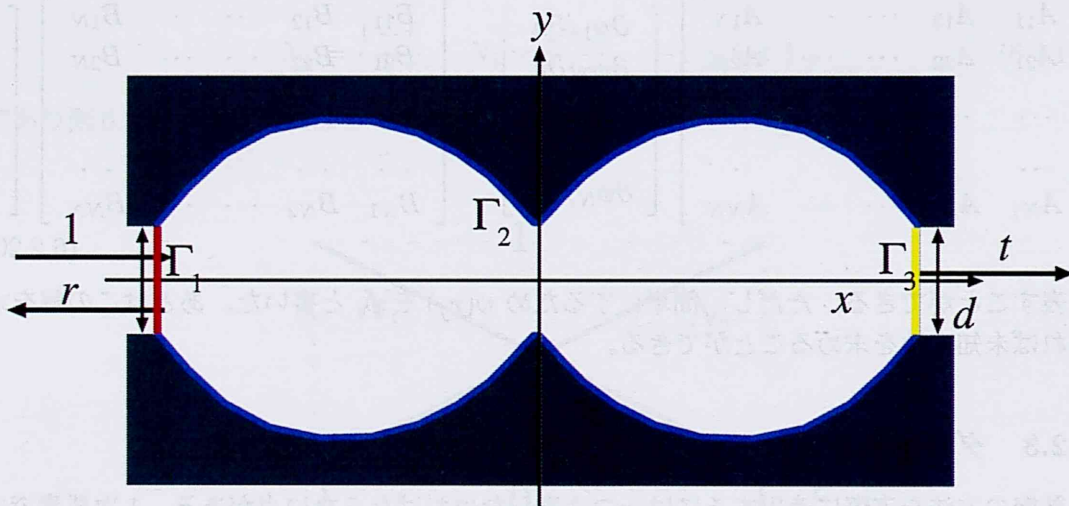


図 6.6: リード線の接続

ド線をつける。ここで、図のネズミ色の部分はポテンシャルの壁であり無限に高いものとする。また左右のリード線の幅は  $d$  とする。ここで境界を分類すると左側の赤い線は入射するリード線との接続部分であり  $\Gamma_1$  とする。また、右側の黄色い線は出ていくリード線との接続部分で  $\Gamma_3$  とする。青い線は系と壁との境界部分でこれを  $\Gamma_2$  とする。 $\Gamma_2$  での境界条件は無限に高いポテンシャルであるから  $\psi = 0$  である。また未知変数は法線方向の微

分  $\partial\psi/\partial n$  である。リード線との接続部分  $\Gamma_1, \Gamma_3$  では波動関数がリード線の固有関数で展開することになる。つまり、第  $\alpha$  モードで入射する場合の  $\Gamma_1$  での波動関数は

$$\psi(r) = \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)e^{ik_\alpha x} + \sum_{\beta} r_{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)e^{-ik_\beta x} \quad (6.2.21)$$

である。ただし、

$$k_\alpha = \sqrt{k^2 - \left(\frac{\alpha\pi}{d}\right)^2} \quad (6.2.22)$$

である。 $\beta$  に関しても同様である。同様に  $\Gamma_3$  では

$$\psi(r) = \sum_{\beta} t_{\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)e^{ik_\gamma x} \quad (6.2.23)$$

と書ける。これらは第3種の境界条件であり、それぞれでの未知変数は反射係数  $r_{\alpha\beta}$  であり透過係数  $t_{\alpha\gamma}$  である。

また、このときの和をとるモードの数であるが伝導に寄与するのは基本モードから (6.2.22) 式が実数となるモードまでである。つまり、

$$\alpha < \frac{kd}{\pi} \quad (6.2.24)$$

までの範囲である。しかしながら、この伝導モードのみで  $\Gamma_1, \Gamma_3$  を離散化した場合節点の数が少なく十分に精度がでないことが考えられる。よって、実際には  $\alpha < \frac{kd}{\pi}$  となるエバネッセンスモードまでとり十分に分割してやる必要がある。ただし、それらのモードでの反射係数、透過係数はもちろん0となる。

それではこれらのことをふまえて境界積分方程式を立ててみよう。まず簡単のために

$$u_\alpha = e^{ik_\alpha x} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \quad (6.2.25)$$

を定義すればそれぞれでの波動関数とその法線方向微分は

$$\Gamma_1 : \quad \begin{aligned} \psi &= u_\alpha^* + \sum_{\beta} r_{\alpha\beta} u_\beta \\ \frac{\partial\psi}{\partial n} &= -\frac{\partial\psi}{\partial x} = -ik_\alpha u_\alpha^* + \sum_{\beta} ik_\beta r_{\alpha\beta} u_\beta \end{aligned} \quad (6.2.26)$$

$$\Gamma_2 : \quad \begin{aligned} \psi &= 0 \\ \frac{\partial\psi}{\partial n} & \end{aligned} \quad (6.2.27)$$

$$\Gamma_3 : \quad \begin{aligned} \psi &= \sum_{\gamma} r_{\alpha\gamma} u_\gamma^* \\ \frac{\partial\psi}{\partial n} &= \frac{\partial\psi}{\partial x} = \sum_{\gamma} ik_\gamma t_{\alpha\gamma} u_\gamma^* \end{aligned} \quad (6.2.28)$$

である。

よってその境界積分方程式は

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Gamma_1} G \left( -ik_\alpha u_\alpha^* + \sum_{\beta} ik_\beta r_{\alpha\beta} u_\beta \right) dS' - \int_{\Gamma_1} G \left( u_\alpha^* + \sum_{\beta} r_{\alpha\beta} u_\beta \right) dS' \\
 & + \int_{\Gamma_2} G \frac{\partial \psi}{\partial n} dS' - \int_{\Gamma_2} \psi \frac{\partial G}{\partial n} dS' \\
 & + \int_{\Gamma_3} G \left( \sum_{\beta} ik_\gamma t_{\alpha\gamma} u_\gamma \right) dS' - \int_{\Gamma_3} G \left( \sum_{\gamma} t_{\alpha\gamma} u_\gamma \right) dS' \\
 & = \frac{\theta_i}{2\pi} \psi(\mathbf{r}_i)
 \end{aligned} \tag{6.2.29}$$

となる。 $r_{\alpha\beta}, t_{\alpha\gamma}$  は積分から出せるので先ほどと同様にこれらを行列の形に直すことができ未知変数を求めることができる。透過、反射係数が決まれば (2.2.29) 式と (2.2.30) 式から透過、反射確率が導ける。

$$R_{\alpha\beta} = \frac{k_\beta}{k_\alpha} |r_{\alpha\beta}|^2 \tag{6.2.30}$$

$$T_{\alpha\gamma} = \frac{k_\gamma}{k_\alpha} |t_{\alpha\gamma}|^2 \tag{6.2.31}$$

このように、境界要素法の大きな特徴はその内部の波動関数を計算することなく透過、反射確率を求めることができるということである。

実際に計算した結果を下に示す。なお、計算は長さの次元をリード線の幅  $d$  でとり Schrödinger 方程式を

$$-\nabla^2 \psi = (kd)^2 \psi \tag{6.2.32}$$

と無次元化した上で行った。また、数値積分はガウス積分の 20 点公式を用いている。

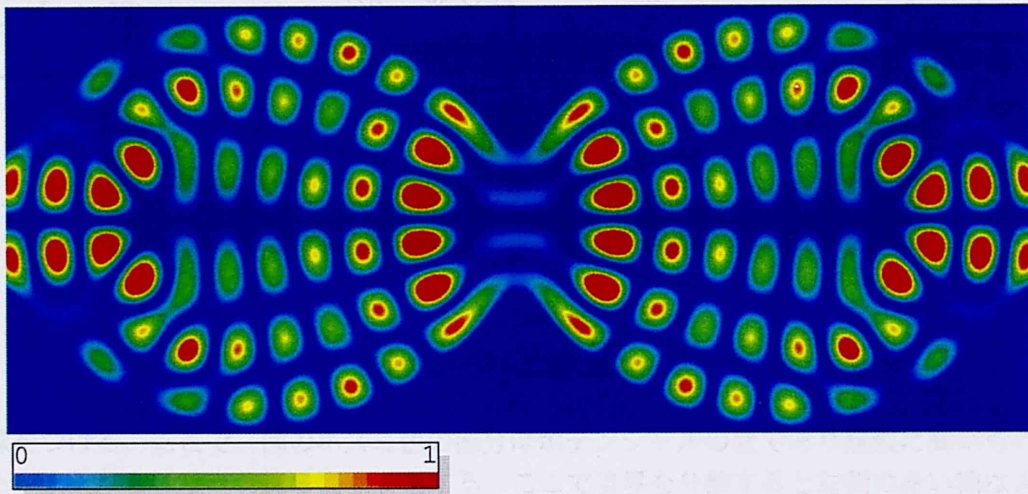


図 6.7:  $kd = 10$  でのひょうたん型試料における確率密度

図 6.7 は左側から  $kd = 10$  で基本モードで入射した場合であり内部の形状に応じて波が伝達していく様子が分かる。

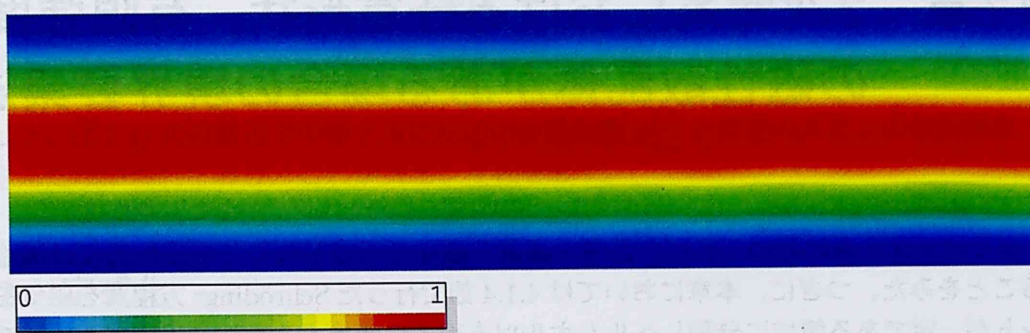


図 6.8:  $kd = 6$  での細線中の確率密度

また、図 6.8 は試料自体も同じ幅のリード線とした場合であり左側から基本モードで  $kd = 6$  で入射している。当たり前ではあるがそのまま全て抜けており計算が正しいことを確認できる。

このときの計算の誤差は確率の保存  $\sum_{\beta} R_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} T_{\alpha\gamma} = 1$  からある程度見積もることができ、これらの計算における誤差は小数点第 3 位以下であった。また、要素数は両方とも 500 程度である。

## 第7章 2次元系における任意形状、有限強度の磁性散乱体がある場合の境界要素法

4章では1次元系において磁壁の影響を議論し磁壁を考慮しなくても定性的には議論できることをみた。つぎに、本章においては4.1.4節で行った Schrödinger 方程式を磁気モーメントが一定である領域に分割しヘルムホルツ方程式に変換する手法を用いて2次元系で任意形状の有限強度の磁性散乱体が存在する場合にも境界要素法を適用できるようにする手法を提案する。[30] ただし、以降の計算においては磁壁の影響は考えないこととする。

### 7.1 境界積分方程式

(4.1.16) 式に対応したグリーン関数が満たす式は

$$-\nabla' G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left( (kd)^2 \pm M^{(j)} \right) G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (7.1.1)$$

である。ただし、 $G^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; (kd)^2 \pm M^{(j)}) = G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  とした。

よって、 $\psi_{\pm}^{(j)}$  に関する領域  $j$  での境界積分方程式は

$$\psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}) = \oint \left( G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}') - \psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \cdot n dS' \quad (7.1.2)$$

となる。

しかしながら  $\psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r})$  は連続ではないので境界要素法を適用するに当たってセルフコンシステントな積分方程式を得るには  $\psi_{\uparrow, \downarrow}$  を境界積分表示の方がよい。(7.1.2) 式と (4.1.15) 式から

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}) = \oint & \left( (M^{(j)} \pm M_z^{(j)}) \left( G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \psi_{\uparrow}^{(j)} - \psi_{\uparrow}^{(j)} \frac{\partial}{\partial n'} G_{\pm}^{(j)} \right) \right. \\ & \left. \pm (M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}) \left( G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \psi_{\downarrow}^{(j)} - \psi_{\downarrow}^{(j)} \frac{\partial}{\partial n'} G_{\pm}^{(j)} \right) \right) \cdot n dS' \end{aligned} \quad (7.1.3)$$

を得る。これを逆変換 (4.1.17) 式の右辺に代入して

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}) = \oint & \left[ \nabla' \psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}') \left( M_{\pm}^{(j)} G_{+}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + M_{\mp}^{(j)} G_{-}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \right. \\ & \left. - \psi_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}') \left( M_{\pm}^{(j)} \nabla' G_{+}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + M_{\mp}^{(j)} \nabla' G_{-}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \right] \cdot n dS' \\ & + \oint \left[ \nabla' \psi_{\mp}^{(j)}(\mathbf{r}') m_{\pm}^{(j)} \left( G_{+}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_{-}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \right. \\ & \left. - \psi_{\mp}^{(j)}(\mathbf{r}') m_{\pm}^{(j)} \left( \nabla' G_{+}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \nabla' G_{-}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \right] \cdot n dS' \end{aligned} \quad (7.1.4)$$

を得る。ここで

$$M_{\pm}^{(j)} = \frac{1}{2M^{(j)}} (M^{(j)} \pm M_z^{(j)}), \quad (7.1.5)$$

$$m_{\pm}^{(j)} = \frac{1}{2M^{(j)}} (M_x^{(j)} \mp iM_y^{(j)}) \quad (7.1.6)$$

とした。(7.1.4) 式の右辺での第 2 項に左辺の波動関数  $\psi_{\uparrow,\downarrow}^{(j)}$  とは逆のスピンの波動関数  $\psi_{\downarrow,\uparrow}^{(j)}$  を含んだ項が現れており、これがスピン反転を表す。

## 7.2 定式化

図 7.1 のように任意形状の系の左右にリード線となる導波路を取り付け、その系の内部に任意形状、有限強度の磁気モーメントを導入したモデルを考える。また、リード線の幅を  $d$  とする。ここで、リード線との接続部分である境界 1 と 3 では波動関数は導波路の固有

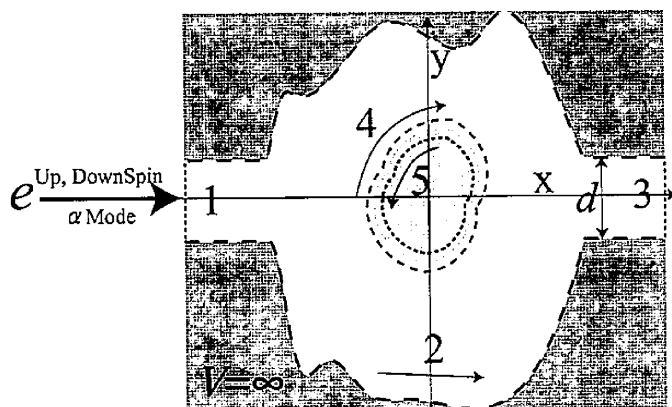


図 7.1: 任意形状の系に磁性散乱体がある場合の境界条件

関数で展開できる。また、境界 2 では電子は入り込めない無限に高いポテンシャルの壁を想定し、波動関数を 0 とする。磁気モーメントの直外の境界 4 と直内の境界 5 では、積分の向きが逆になっている。また、境界 4 と境界 5 における方程式を連立して解くため節点の数は同じにする必要がある。次に磁化  $M$  が一定な領域に分割すると、境界 1, 2, 3, 4 に囲まれた領域 0 では  $M^{(0)} = 0$  であり、境界 5 に囲まれた領域 1 では  $M^{(1)} (\neq 0)$  である。領域 0 では磁化は 0 であるから、波動関数は、アップスピンで第  $\alpha$  番目のモードのみが入

射する場合、

$$\begin{aligned}
1: \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &= \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(ik_{\alpha}x) \\
&\quad + \sum_{\beta} r_{+\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(-ik_{\beta}x) \\
\psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) &= \sum_{\beta} r_{-\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(-ik_{\beta}x) \\
2: \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}) &= 0 \\
3: \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}) &= \sum_{\gamma} t_{\pm\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(ik_{\gamma}x) \tag{7.2.1}
\end{aligned}$$

となる。ここで、 $k_{\alpha,\beta,\gamma}$  は  $k_{\alpha} = \sqrt{k^2 - (\alpha\pi/d)^2}$  である。未知変数は境界 1 では  $r_{\pm\alpha\beta}$ 、境界 2 では法線方向の波動関数の微係数  $\partial\psi_{\pm}/\partial n$ 、境界 3 では  $t_{\pm\alpha\gamma}$  となる。また、境界 4, 5 では波動関数とその法線方向の微係数の両方が未知変数となるが、法線方向が散乱体の外側に向いた (境界 4 についての) 式と内側に向いた (境界 5 についての) 式の両方について未知変数と同じ数だけ連立方程式を立てられることになり、解を得る。領域 1 では (7.1.3) 式に基づいて積分を行う必要がある。このようにアップスピンとダウンスピン両方の式を連立して自己無撞着に解くことにより全ての未知係数を求めることができる。また、このときのアップスピンでの反射率  $R_{\uparrow}$ 、透過率  $T_{\uparrow}$ 、ダウンスピンでの反射率  $R_{\downarrow}$ 、透過率  $T_{\downarrow}$  は

$$R_{\uparrow,\downarrow} = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |r_{\pm\alpha\beta}|^2, \tag{7.2.2}$$

$$T_{\uparrow,\downarrow} = \sum_{\gamma} \frac{k_{\gamma}}{k_{\alpha}} |t_{\pm\alpha\gamma}|^2 \tag{7.2.3}$$

で与えられる。

### 7.3 磁化の大きさの検討

磁性散乱体に電子が散乱されスピントリップが起きたときに入射電子のみならず、その相互作用により磁性散乱体自身にも影響がある。その場合、磁性体の局在スピンと伝導電子との相互作用により、近藤効果が起こることも考えられる。[31] そこで、計算を行う前に磁気モーメントの大きさを見積もる。(4.1.10) 式より

$$\frac{2m^* \mu_B |M|}{\hbar^2} d^2 = \bar{M} \tag{7.3.1}$$

である。ただし、 $m^*$  は電子の有効質量である。

また、(3.1.19) 式よりボーア磁子  $\mu_B$  は

$$\mu_B = \frac{\mu_0 e \hbar}{2m_e} \tag{7.3.2}$$

である。 $m_e$  は電子の質量である。



よって磁化の大きさ  $|M|$  は

$$|M| = \mu_B \frac{\hbar^2}{2m^* \mu_B^2 d^2} \bar{M} = \frac{2m_e^2}{\mu_0 e^2 m^*} \frac{\mu_B \bar{M}}{d^2} \approx 9.00 \times 10^{20} \frac{\mu_B \bar{M}}{d^2} \quad (7.3.3)$$

である。ここで有効質量  $m^* = 0.05m_e$  とした。

磁化の大きさは単位体積中の磁気モーメントであり、一つのスピンの磁気モーメント  $\mu_B$  を持っている。ここで量子細線の  $z$  方向の幅を  $0.1d$  とし、 $y$  方向の幅  $d = 10\text{nm}$  とすれば磁化中に存在するスピンの数はだいたい

$$\frac{|M|(0.4d)^2(0.1d)}{\mu_B} \approx 9.0 \times 10^{20} (0.4)^2 (0.1) d \bar{M} \approx 1.44 \times 10^{11} \bar{M} \quad (7.3.4)$$

である。よって、 $\bar{M} = 10$  の時はだいたい  $1.44 \times 10^{12}$  個となり十分に大きな数のスピンの存在していることになる。つまり、電子が1つぐらい入射したところで磁化自体にはほぼ影響がないものと考えられる。

## 7.4 計算結果

### 7.4.1 磁性散乱体の形状依存性

最初に透過、反射スペクトルにおける磁性散乱体の形状による依存性を調べる。特にそれぞれのスピンの透過、反射率にどのような影響があるか興味深い。ここで計算を行っ

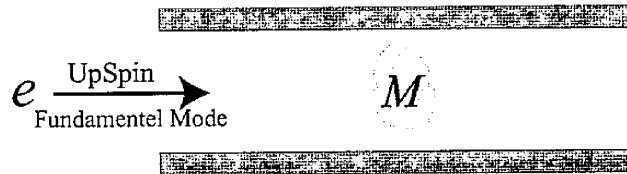


図 7.2: 任意形状の磁性散乱体がある場合の量子細線

た系は図 7.2 のように、散乱体による電子波の散乱の影響を見やすくするため系自体も導波路となっている量子細線に任意形状の散乱体を導入したものである。散乱体の形状として、円、正方形そして正三角形の三つの場合の比較を行う。散乱体の面積は全て等しくなっており、磁化も  $M = (0, 10, 0)$  で全て同じである。以降の全ての計算で電子波は振幅 1 で基本モード、アップスピンで入射するものとする。図 7.3 はそれぞれの形状での透過、反射スペクトルを示す。透過、反射スペクトルはほとんど形状に依存していないことがわかる。これは波数が小さい領域では電子波が散乱体の波長程度以下の構造を感じないためその形状によらず、また波数が高い領域ではエネルギーが高くなるためほとんど散乱体の影響を受けることなく透過してしまうためであると考えられる。図 7.4 と図 7.5 は  $kd = 5$  と  $kd = 10$  でのそれぞれの形状における電子の確率密度を示す。左図がアップスピン、右図がダウンスピンとなっている。これを見ると確率密度もいずれの形状についてもほぼ同様で、特に  $kd = 10$  ではほとんど散乱されることなく通過することが分かる。この計算では散乱体の数が 1 つだったが、複数導入すれば共鳴が起こりやすくなり、散乱体の形状の影響が大きくなるものと思われる。

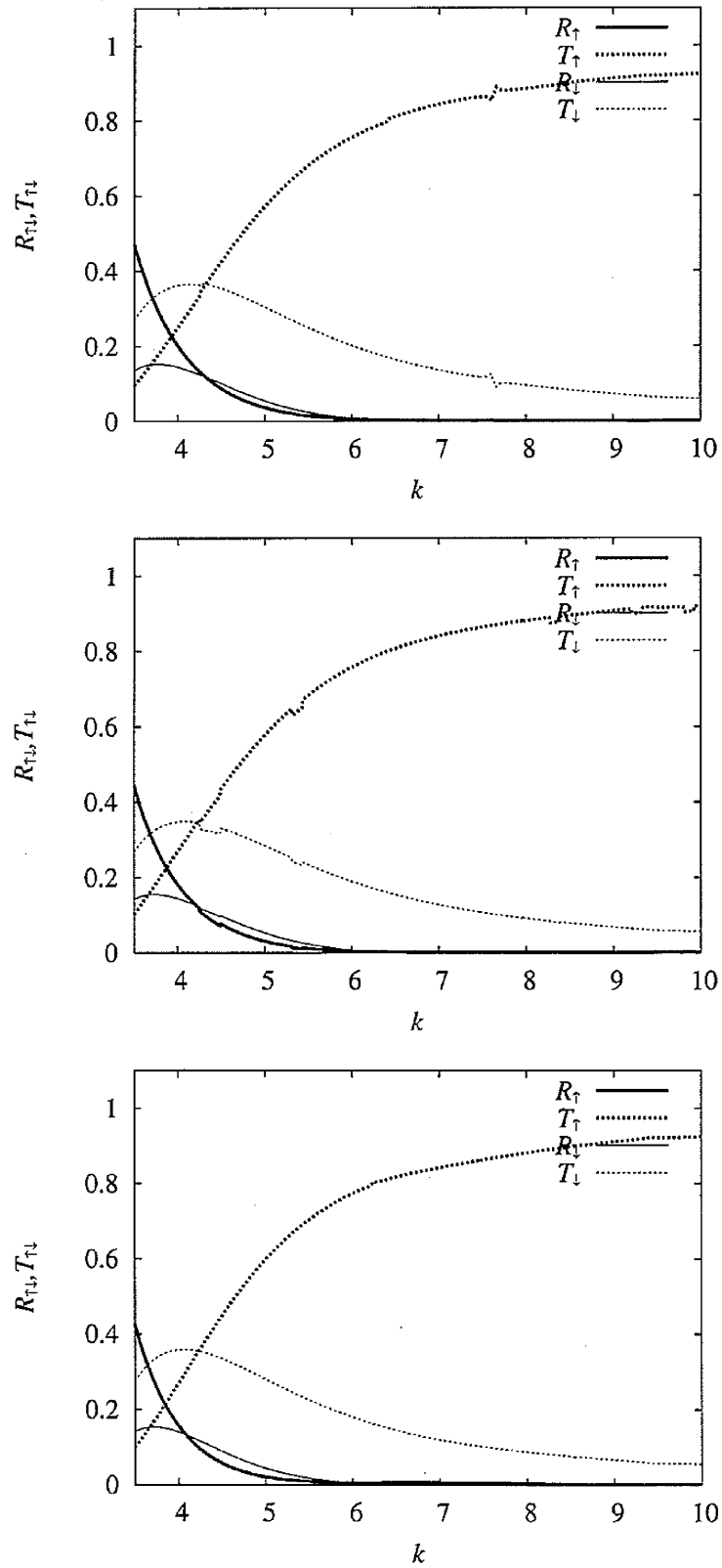


図 7.3:  $M = (0, 10, 0)$  の時の透過反射スペクトル。  $kd$  は無次元の波数、  $R_{\uparrow}$  と  $T_{\uparrow}$  はアップスピンでの透過反射確率、  $R_{\downarrow}$  と  $T_{\downarrow}$  はダウンスピンでの透過反射確率。

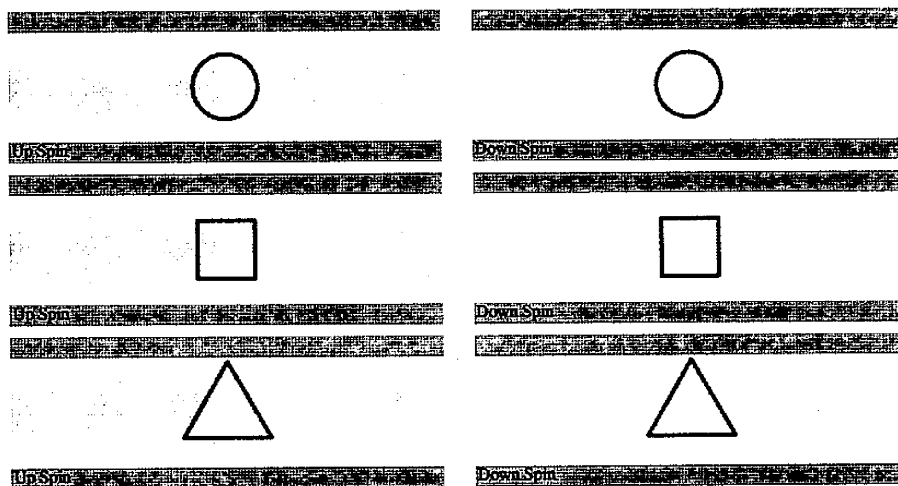


図 7.4:  $kd = 5$ ,  $M = (0, 10, 0)$  での確率密度。左図はアップスピン、右図はダウンスピン。

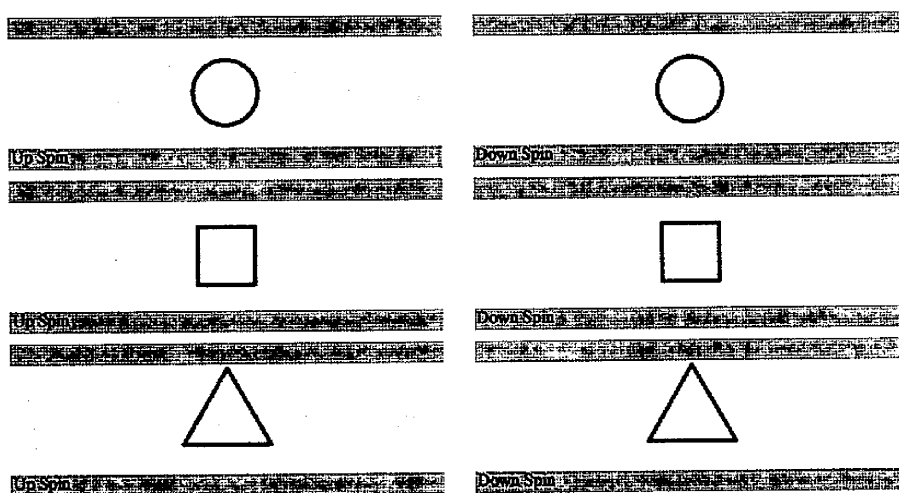


図 7.5:  $kd = 10$ ,  $M = (0, 10, 0)$  での確率密度。

### 7.4.2 ポテンシャルと磁区との比較

次に、散乱体がポテンシャルの場合と磁気モーメントの場合との比較を行う。量子細線中に図 7.2 に示す形状の磁化  $M$  もしくはポテンシャル  $V$  が散乱体として存在する場合の計算を行う。磁化の場合は  $M = (0, 10, 0)$  で、ポテンシャルの場合は  $V = 10$  とした。また、散乱体の面積は先ほどの 3 つのモデルと等しくしてある。

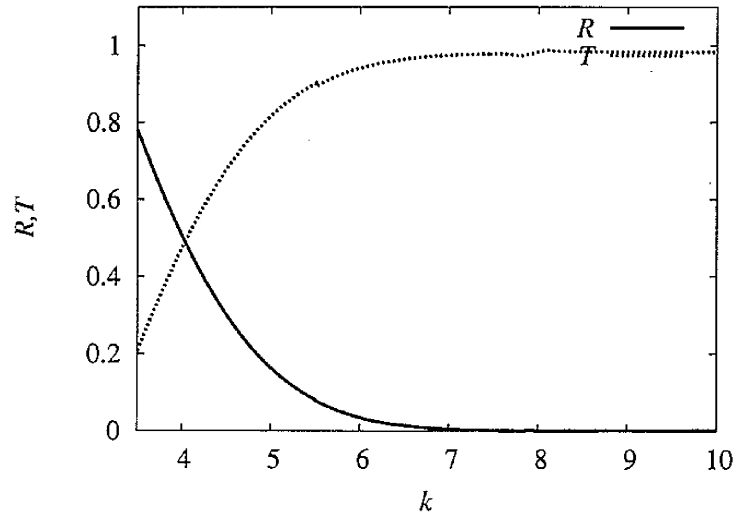


図 7.6: 散乱体がポテンシャル  $V = 10$  の場合の透過反射スペクトル。

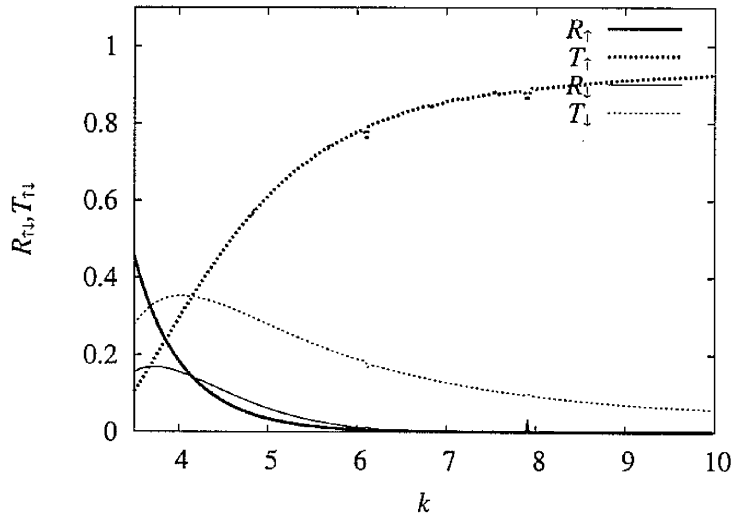


図 7.7: 散乱体が磁化  $M = (0, 10, 0)$  の場合の透過反射スペクトル。

図 7.6 と図 7.7 はそれぞれ散乱体がポテンシャルの場合と磁化の場合の透過、反射スペクトルである。まず、図 7.7 を見ると先ほどの 3 つのモデルと比較すると、ほぼ同じ曲線を描

いており、形に依存していないことが確認できる。ポテンシャルの場合、図 7.6 では、波数が大きくなるにつれ透過率が高くなり  $kd > 8$  ではほぼ透過率は 1 となっている。これに対して図 7.7 は各スピンの透過率と反射率それぞれを足せば、ポテンシャルの場合の透過率と反射率にほぼ同じである。図 7.7 では、アップスピンで入射した電子波は磁気モーメントに散乱されることによりスピン反転が起こりアップ、ダウン両方のスピンで透過、反射している。ダウンスピンに注目してみると、波数が小さい方がスピン反転が起こりやすく、大きくなると逆に起こりにくくなる。これは (7.1.4) 式を見れば明らかで、スピントリフリップを示す第 2 項にグリーン関数が  $(G_+^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_-^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))$  もしくは  $(\nabla' G_+^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \nabla' G_-^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))$  という形で含まれており、グリーン関数は  $G_{\pm}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k^2 \pm M^{(j)})$  で与えられるから  $M^{(j)}$  が  $(kd)^2$  に比べて小さくなるとほぼ  $G_+$  と  $G_-$  が等しくなってしまうため第 2 項が非常に小さくなってしまうためである。つまり、電子は波数が大きくなると磁気モーメントを感じなくなってしまうことがわかる。しかし、より強くスピン反転を起こすために波数に対して磁化の大きさ  $M^{(j)}$  を大きくすればよいわけではない。それは図 7.7 において波数  $kd$  が一番低いところがダウンスピンの確率が高いわけではないことから確認できる。これも (7.1.4) 式から次のように理解できる。波数の差に対して磁化の大きさ  $M^{(j)}$  が十分大きい場合、グリーン関数  $G_{\pm}$  の差、もしくはその微係数の差が大きくなる。しかし、(7.1.4) 式において波動関数、もしくはその微係数を自己無撞着に決める必要があるため、左辺の波動関数が大きくなりすぎてはいけぬ。したがって、右辺第 2 項が大きすぎてもいけない。そのためには、右辺第 2 項に含まれる左辺の波動関数のスピンと逆のスピンの波動関数の値が小さくなければならない。つまり、波数と比べて磁化の大きさが大きい場合、電子は磁気モーメントの内部に入り込むことなく反射されてしまい、磁気モーメントと相互作用しないため、スピン反転が起こりにくいと考えられる。スピン反転を利用したデバイスを作るためには、より効率よくスピン反転を起こす必要がある。そのためには、波数と磁化の大きさ  $M^{(j)}$  を大きすぎず、小さすぎず適切な大きさに最適化する必要がある。

### 7.4.3 ランダムな形状による影響

次に、図 7.8 のように量子ドットに円形の磁気モーメントがある場合とそれをランダムに変形させた場合との比較を行う。実際にこのようなデバイスを作成するには、整った理想的な形状を作成するのは難しく、ある程度その形状が荒れてしまう。そこで、理想的な形状の場合とドットと磁区両方とも面積は一定のままランダムに形状を変化させた場合との比較を行う。

図 7.9 と図 7.10 は、それぞれ系が理想的な形状をしている場合とランダムに変形させた場合での透過、反射スペクトルである。両図とも激しく振動しているが、その振る舞いは明らかに異なる。また、今回のモデルでは一部に確率の保存が保たれていない箇所がある。ただ、もともと激しく振動しており特定の波数での値よりも全体の傾向が重要であると考えられるため、その全体的な挙動を考察する。まず、図 7.9 を見るとその振動のピークの高さが波数が大きくなっても大きく、ほぼ 1 近く達している。これに対して、図 7.10 では波数が低いときは、ピークが 0.7 を越えているが波数が大きくなってくると振幅が小さくなり、全ての透過率、反射率が 0.25 付近へと収束している。これは系の形状が理想的な場

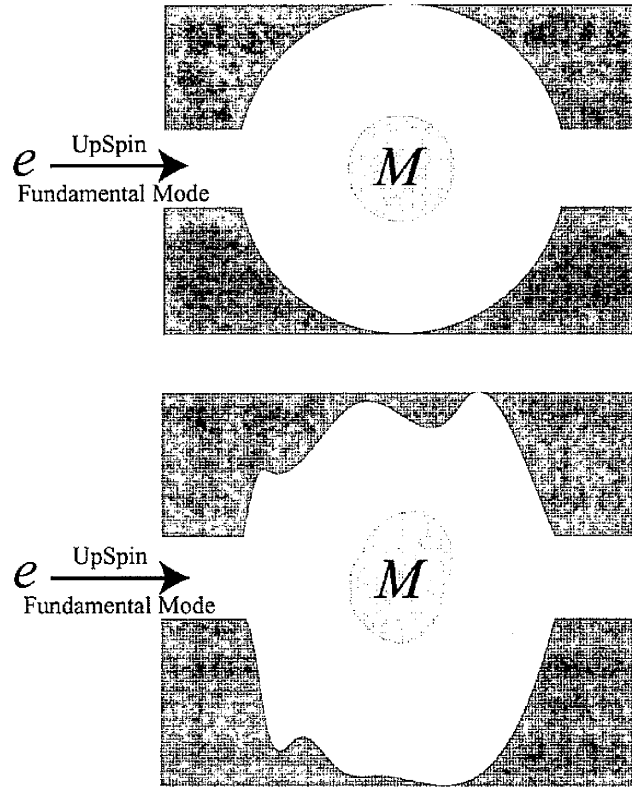


図 7.8: 円の量子ドットとランダムに生成した量子ドット。

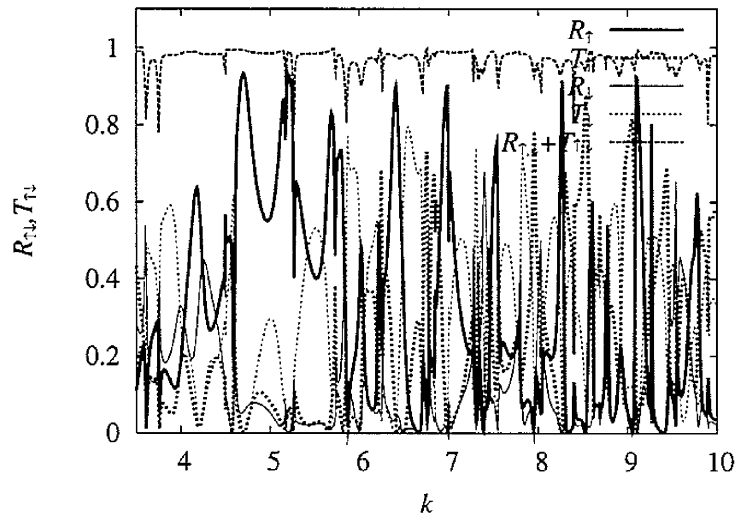


図 7.9: 図 7.8 の上図の透過反射スペクトル。  $M = (0, 10, 0)$ 。

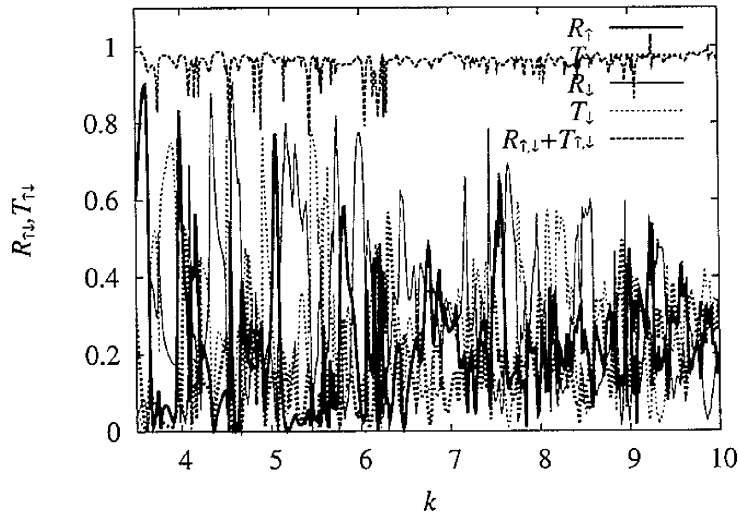


図 7.10: 図 7.8 の下図の透過反射スペクトル。  $M = (0, 10, 0)$ 。

合には電子波は系の形状に対応して全体として特定の波数で共鳴が起こりやすく、それが最大値が 1 近くもあるピークとなって現れる。また、ピークの形状も鋭いものが多いが、幅の広いピークも見られspinを利用したデバイスを作成することも十分可能であると考えられる。一方、ランダムに変形している場合はその複雑な形状に対応して電子波は局所的には共鳴を起こすが系全体の共鳴は起こりにくく、そのピークも鋭くなる。つまり波数が小さい間は電子波は波として系の細かな形状の変化をあまり感じないので、まだ系全体の共鳴を起こしやすい。しかし、波数が大きくなるにつれて、波長程度の細かな構造を感じるようになるため、複雑な形状により局所的な共鳴が起こりやすくなる。そのため、磁性散乱体付近にも局在し何度も散乱されspinが混ざり合い、それぞれのspinでの透過率、反射率がほぼ等しくなる。

図 7.11 は理想的な形状の場合の  $kd = 5$  と  $kd = 10$  での電子の確率密度である。どちらの波数においても系の形状と波長に対応して系全体に対称的な形の干渉パターンができており、それが先ほどの振幅の大きなピークへとつながる。また、図 7.12 はそれをランダムに変形させた場合の  $kd = 5$  と  $kd = 10$  における電子の確率密度である。波数が小さいときは図 7.11 の上図に近い形の干渉パターンができており、これは電子波が系の変形にあまり影響されていないことがわかる。他方、波数が大きくなると磁性散乱体の内部にも電子波が入りやすくなるため、spin反転が頻繁に起こり、ほぼ等確率でspinおよび反射波、透過波が混ざり合っていることが分かる。これらの結果から共鳴を利用すれば図 7.9 のように、一定の周期でピークが見られるスペクトルが得られ、それを用いたspinフィルターのようなspintロニクスデバイスを作成することも可能かもしれない。ただし、そのためには境界を整った形状で作成し特定の波数で共鳴を起こさせる必要がある。

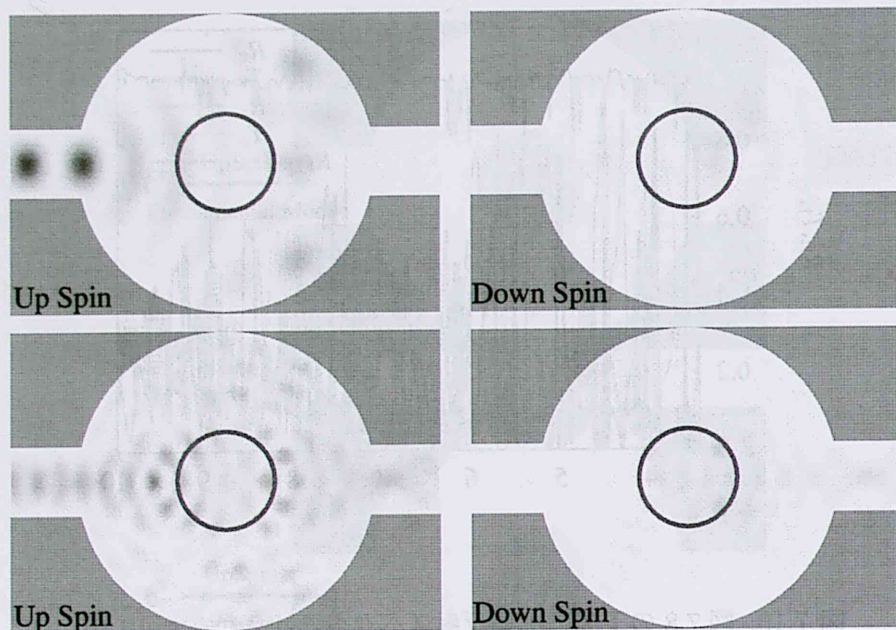


図 7.11: 図 7.8 の上図の確率密度。  $M = (0, 10, 0)$  で、上図が  $kd = 5$ 、下図が  $kd = 10$ 。

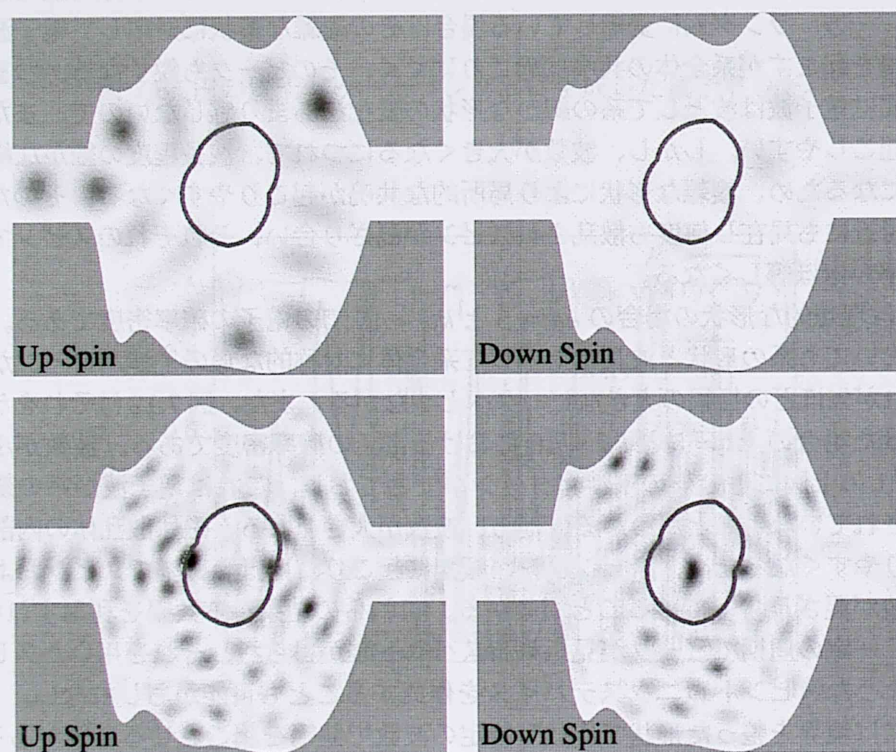


図 7.12: 図 7.8 の下図の確率密度。  $M = (0, 10, 0)$  で、上図が  $kd = 5$ 、下図が  $kd = 10$ 。



#### 7.4.4 計算精度

これまでの計算において、図 7.8 のモデルを除けば、確率の保存の精度はおおむね 1 パーセント以下の誤差であった。ただ、図 7.8 のモデルを含めて、局所的に精度が落ちることがあった。これはポテンシャルが異なる境界上で物理上は意味のない固有モードを励起している可能性があり、それが解に影響していることが考えられる。[29] ただし局所的なものであり、全体の傾向を議論することは十分に可能である。また、計算時間は Pentium4、3.0GHz、Linux OS、Intel 社製 Fortran コンパイラのハードウェアとソフトウェアの組み合わせの計算機を用いて計算を行ったが、確率密度の計算は波数によるが要素数 1000、5000 点のプロットで約 6 時間、スペクトルの計算は 2 週間程度かかった。これは複数の CPU を利用すれば十分に実用的な時間だと考えられる。

### 7.5 議論

2次元電子系に磁気モーメントがある場合を定式化し、磁気モーメントによる散乱の効果を取り込んだ境界積分方程式を導出し、モデル計算を実行した。結果として、効率よくスピン反転を起こすためには磁化の大きさ  $M^{(j)}$  を大きすぎず、小さすぎず適切に決定し、共鳴を利用して磁気モーメント内部での電子の存在確率を高くする必要があることがわかった。それには一定間隔ごとに複数の磁気モーメントを導入すれば強い共鳴が起こることが予想される。ここでは、磁気モーメントを1つのみ導入した場合のみの計算を行ったが、ここで提案した境界積分方程式は磁気モーメントが多数存在する場合も計算可能である。ただし、図 7.1 を見るとわかるように磁気モーメントの周りの要素数は外側と内側で 2 倍、アップスピンとダウンスピンとで 2 倍となるため合計 4 倍もの要素数となる。そのため、多数の磁気モーメントがある場合は要素数が膨大な数となり非常に時間がかかってしまう。複数の磁区による共鳴がある場合の解析を行うためには、波動関数の変化の激しくないところではあまり要素をとらないなど要素数を減らす手法が必要となる。

## 第8章 2次元系における複数の点状磁性散乱体がある場合の境界要素法

### 8.1 境界積分方程式

無次元化した Schrödinger 方程式は系に磁化を含む場合、(4.1.14) 式から

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_{\uparrow} = ((kd)^2 + M_z) \psi_{\uparrow} + (M_x - iM_y) \psi_{\downarrow} \\ -\nabla^2 \psi_{\downarrow} = ((kd)^2 - M_z) \psi_{\downarrow} + (M_x + iM_y) \psi_{\uparrow} \end{cases} \quad (8.1.1)$$

である。

つぎにこのグリーン関数が満たす式は

$$-\nabla'^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; (kd)^2) = ((kd)^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; (kd)^2) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (8.1.2)$$

である。

よって、これら2式から  $\psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r})$  は境界積分方程式で表すことができ

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}) = & \oint [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}') - \psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot n dS' \\ & + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (M_{\mp}(\mathbf{r}') \psi_{\downarrow, \uparrow}(\mathbf{r}') \pm M_z(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}')) d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (8.1.3)$$

となる。ただし  $M_{\pm}(\mathbf{r}') = M_x(\mathbf{r}') \pm iM_y(\mathbf{r}')$  とした。境界要素法を適用するに当たって、(8.1.3) 式右辺第2項の体積積分を工夫して評価する必要がある。

### 8.2 近似

$N_s$  個の点状磁性散乱体がある場合を考える。[32, 33] ここで、図 8.1 のように  $n$  番目の点状の磁性散乱体を高さ  $M_{\pm}(\mathbf{R}_n)$ 、 $M_z(\mathbf{R}_n)$  で中心  $\mathbf{R}_n$ 、半径  $a$  の円柱であると考え。ただし、 $s = \uparrow, \downarrow$  である。このとき、磁化ベクトル  $M_{\pm}(\mathbf{r})$ 、 $M_z(\mathbf{r})$  は

$$\begin{aligned} M(\mathbf{r}) &= \sum_{n=1}^{N_s} M_{\pm}(\mathbf{R}_n) a^2 \frac{1}{\pi a^2} \theta(a - |\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|) \\ M(\mathbf{r}) &= \sum_{n=1}^{N_s} M_z(\mathbf{R}_n) a^2 \frac{1}{\pi a^2} \theta(a - |\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|) \end{aligned} \quad (8.2.1)$$

で表せる。 $\theta(x)$  は単位ステップ関数である。

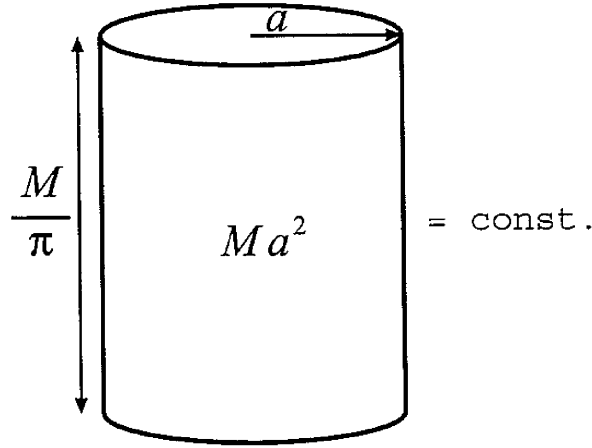


図 8.1: 点状の磁性散乱体

点状の磁性散乱体を想定しているので、 $M_{\pm}a^2$ 、 $M_z a^2$  を一定のままで  $a$  を十分に小さくする。すると  $(1/\pi a^2)\theta(a - |r - \mathbf{R}_n|)$  はデルタ関数  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$  に近似できる。よって、(8.1.3) 式右辺第 2 項は

$$\begin{aligned} & \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (M_{\mp}(\mathbf{r}')\psi_{\downarrow, \uparrow}(\mathbf{r}') \pm M_z(\mathbf{r}')\psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}')) d\mathbf{r}' \\ & \approx \sum_n G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) (M_{\mp}(\mathbf{R}_n)a^2\psi_{\downarrow, \uparrow}(\mathbf{R}_n) \pm M_z(\mathbf{R}_n)\psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{R}_n)) \end{aligned} \quad (8.2.2)$$

と表せる。

ただし、このままでは (8.2.2) 式のグリーン関数  $G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n)$  の  $\mathbf{r}$  が  $\mathbf{R}_m$  になったとき、 $G(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_m)$  はグリーン関数の特異性によって発散してしまう。(6.2.1 節)

そこで  $\mathbf{r}$  が  $\mathbf{R}_m$  となるときは (8.1.3) 式の積分

$$\begin{aligned} & \frac{M_{\mp}(\mathbf{R}_m)a^2}{\pi a^2} \int G(\mathbf{R}_m, \mathbf{r}')\theta(a - |\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m|)\psi_{\downarrow, \uparrow}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ & \pm \frac{M_z(\mathbf{R}_m)a^2}{\pi a^2} \int G(\mathbf{R}_m, \mathbf{r}')\theta(a - |\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m|)\psi_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned}$$

をより正確に近似する必要がある。

(8.1.2) 式のグリーン関数は 0 次第 1 種のハンケル関数

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(kd|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (8.2.3)$$

で与えられる。ここでこのハンケル関数は 6.2.1 節と同様に  $z$  が十分に近ければ (6.2.4) 式より

$$H_0^{(1)}(z) \approx 1 + i\frac{2}{\pi} (\ln(z) + \gamma - \ln(2)) \quad (8.2.4)$$

と近似できる。

この近似したグリーン関数を用いてさきほどの積分を議論する。ここで  $\psi_{\uparrow}(r')$ 、 $\psi_{\downarrow}(r')$  は中心  $\mathbf{R}_m$  付近では  $M_{\pm}(\mathbf{R}_m)$ 、 $M_z(\mathbf{R}_m)$  が有限な値を持っているのでそれほど大きく変化しな

いと考え積分の外に出す。つまり、中心  $\mathbf{R}_m$  で半径  $a$  の円内部において  $\psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}') \approx \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_m)$  とする。よってこの積分は  $M_{\mp}(\mathbf{R}_m)$  の項に関しては次のように評価できる。

$$\begin{aligned}
& \frac{M_{\mp}(\mathbf{R}_m)a^2}{\pi a^2} \int G(\mathbf{R}_m, \mathbf{r}') \theta(a - |\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m|) \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
& \sim \frac{iM_{\mp}(\mathbf{R}_m)a^2}{4\pi a^2} \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_m) \int H_0^{(1)}(kd|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \\
& \quad \theta(a - |\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m|) d(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m) \\
& \sim \frac{iM_{\mp}(\mathbf{R}_m)a^2}{4\pi a^2} \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_m) \\
& \quad \int_0^a \left\{ 1 + i\frac{2}{\pi} (\ln(r) + \ln(kd) + \gamma - \ln(2)) \right\} 2\pi r dr \\
& = -\frac{1}{4\pi} \left( 2\ln \frac{kda}{2} + 2\gamma - 1 - i\pi \right) M_{\mp}(\mathbf{R}_m)a^2 \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_m) \tag{8.2.5}
\end{aligned}$$

$M_z(\mathbf{R}_m)$  の項についても同様に評価する。

よって、(8.2.2) 式において  $\mathbf{r}$  が  $\mathbf{R}_m$  をとるときはグリーン関数  $G(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_m)$  を  $-1/(4\pi) (2\ln((kda)/2) + 2\gamma - 1 - i\pi)$  で置き換えてやればよい。

最終的に波動関数  $\psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r})$  は

$$\begin{aligned}
\psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}) &= \oint [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}') - \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{n} dS' \\
&+ \sum_n G'(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) (M_{\mp}(\mathbf{R}_n)a^2 \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_n) \pm M_z(\mathbf{R}_n) \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_n)) \tag{8.2.6}
\end{aligned}$$

であらわせる。ここで

$$G'(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) = \begin{cases} \frac{i}{4} H_0^{(1)}(kd|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|), & \mathbf{r} \neq \mathbf{R}_n \\ -\frac{1}{4\pi} (2\ln \frac{kda}{2} + 2\gamma - 1 - i\pi), & \mathbf{r} = \mathbf{R}_n \end{cases} \tag{8.2.7}$$

である。つまり散乱体による影響は  $G'(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) (M_{\mp}(\mathbf{R}_n)a^2 \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_n) \pm M_z(\mathbf{R}_n) \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_n))$  を足しあわせるだけでよいことになる。

### 8.3 全ての磁性散乱体の磁化ベクトル $M$ が等しい場合

もしも全ての磁性散乱体の磁化ベクトルが等しければ、その磁性散乱体による影響が  $xy$  面内での磁化の向きによらないことを証明する。

磁化の  $xy$  面内での大きさ  $M_{xy} = |M_{\pm}| = \sqrt{M_x^2 + M_y^2}$  とすれば、その位相  $\theta$  を用いて

$$\begin{aligned}
M_+ &= M_x + iM_y = M_{xy} \exp(i\theta) \\
M_- &= M_x - iM_y = M_{xy} \exp(-i\theta) \tag{8.3.1}
\end{aligned}$$

と表すことができる。次に  $\psi_{\uparrow} \exp(i\theta/2) = \tilde{\psi}_{\uparrow}$  と  $\psi_{\downarrow} \exp(-i\theta/2) = \tilde{\psi}_{\downarrow}$  を定義すれば (8.1.3) 式に  $\exp(\pm i\theta/2)$  をかけて

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow,\downarrow}(r) e^{\pm i\frac{\theta}{2}} &= \oint \left[ G(r, r') \nabla' \psi_{\uparrow,\downarrow}(r') e^{\pm i\frac{\theta}{2}} - \psi_{\uparrow,\downarrow}(r') e^{\pm i\frac{\theta}{2}} \nabla' G(r, r') \right] \cdot ndS' \\ &\quad + \sum_n G'(r, \mathbf{R}_n) \left( M_{xy}(\mathbf{R}_n) a^2 \psi_{\downarrow,\uparrow}(\mathbf{R}_n) e^{\mp i\frac{\theta}{2}} \pm M_z(\mathbf{R}_n) \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_n) e^{\pm i\frac{\theta}{2}} \right) \\ \tilde{\psi}_{\uparrow,\downarrow}(r) &= \oint \left[ G(r, r') \nabla' \tilde{\psi}_{\uparrow,\downarrow}(r') - \tilde{\psi}_{\uparrow,\downarrow}(r') \nabla' G(r, r') \right] \cdot ndS' \\ &\quad + \sum_n G'(r, \mathbf{R}_n) \left( M_{xy} a^2 \tilde{\psi}_{\downarrow,\uparrow}(\mathbf{R}_n) \pm M_z(\mathbf{R}_n) \tilde{\psi}_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}_n) \right) \end{aligned} \quad (8.3.2)$$

となる。それゆえ、もし  $M_z = 0$  であれば磁性散乱体による影響は  $M_{xy} a^2$  のみによることになる。

## 8.4 4つ点状の磁性散乱体を並べた場合

### 8.4.1 定式化

(8.2.6) 式を使って図 8.2 のように量子細線中に4つ並べた場合を考える。入射波はアップスピン、基本モードで系の左側のリードより入射するものとし、それぞれのスピンの透過係数  $t_{\uparrow}$  と  $t_{\downarrow}$  で透過し、反射係数  $r_{\uparrow}$  と  $r_{\downarrow}$  で反射する。

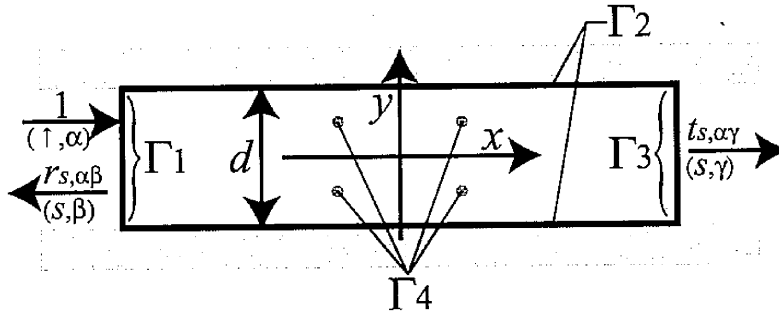


図 8.2: 量子細線中に点状磁性散乱体を導入したモデル

このときの波動関数は  $\Gamma_1$  と  $\Gamma_3$  では細線の固有関数で表せ、また  $\Gamma_2$  では0である。よって

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : \psi_s(r) &= I(s) \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d} \left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(ik_{\alpha}x) \\ &\quad + \sum_{\beta} r_{s,\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d} \left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(-ik_{\beta}x) \\ \Gamma_2 : \psi_s(r) &= 0 \\ \Gamma_3 : \psi_s(r) &= \sum_{\gamma} t_{s,\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d} \left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(ik_{\gamma}x), \end{aligned} \quad (8.4.1)$$

となる。ここで  $s = \uparrow, \downarrow$  で  $k_\alpha = \sqrt{k^2 - (\alpha\pi/d)^2}$  であり、 $I(s) = 1 (s = \uparrow)$  もしくは  $0 (s = \downarrow)$  と定義する。また  $\Gamma_1$  から  $\Gamma_4$  での未知変数はそれぞれ  $r_{s,\alpha\beta}$ ,  $\partial\psi_s/\partial n$ ,  $t_{s,\alpha\gamma}$ ,  $\psi_{s'}$  と  $\psi_s$  である。ここで  $s' = \downarrow, \uparrow$  で  $s$  とは逆のスピンのとする。これらの未知変数は連立して解くことによって求められる。未知変数が求められた後に、(8.2.6) 式に従って系内部の波動関数の値が得られる。

#### 8.4.2 全ての磁化ベクトルの向きが等しい場合

まず、最初に4つの磁化とも全て同じ場合を考える。[34] この場合、8.3節より  $xy$  面内の向きによらないことがわかっている。また、 $M_z = 0$  で磁性散乱体の半径  $a = 0.05$  とした。図8.3は  $M_{xy}a^2 = 700$  の時の透過、反射スペクトルである。このときの透過、反射確

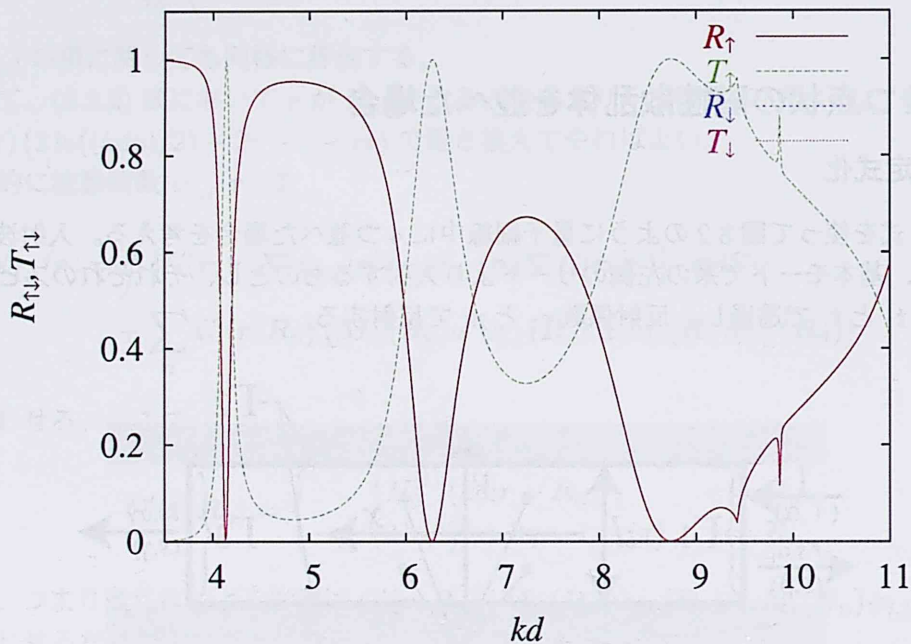


図 8.3:  $M_{xy}a^2 = 700$  の時の透過反射スペクトル

率は (2.2.31) 式や (2.2.32) 式から次式で与えられる。

$$R_s = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |r_{s,\alpha\beta}|^2, \quad T_s = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |t_{s,\alpha\beta}|^2 \quad (8.4.2)$$

図8.3の  $R_{\uparrow}$  や  $T_{\uparrow}$  は共鳴によるものと考えられるいくつかのピークやディップが存在するが、 $R_{\downarrow}$  や  $T_{\downarrow}$  は波数によらずほとんど0である。

これは (8.3.2) 式より理解できる。(8.3.2) 式の  $\psi_{\uparrow}$  と  $\psi_{\downarrow}$  はセルフコンシステントに決まる必要があるから、もし  $M_{xy}a^2$  が大きくなると  $\psi_{\downarrow}$  が小さくならなければならない。つまり、強く磁化した領域に電子は入り込めないためである。これは、例え系に大きな磁化が

あってもスピン間でのカップリングが起これないため、ポテンシャルによる散乱体と同じように振る舞うということを示している。

次に磁化の大きさを小さくしてみる。図 8.4 は  $M_{xy}a^2 = 4$  のときの透過、反射スペクトル

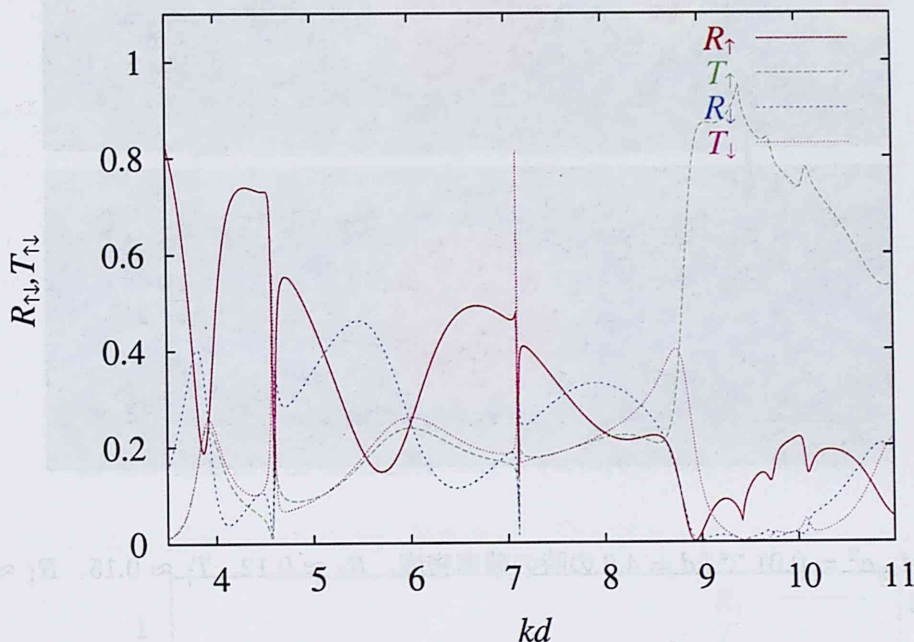


図 8.4:  $M_{xy}a^2 = 4$  のときの透過反射スペクトル

ルである。今度はスピン間のカップリングが起これり  $R_{\uparrow}$  や  $T_{\uparrow}$  が 0 ではなく激しく変化していることがわかる。また、この磁化の大きさは (7.3.3) 式などより  $d = 10\text{nm}$  で  $z$  方向の幅  $0.1d$  とすれば

$$\frac{|M|\pi a^2 d^2(0.1d)}{\mu_B} \approx 9.0 \times 10^{20} \pi(0.1)d M_{xy} a^2 \approx 1.13 \times 10^{13} \quad (8.4.3)$$

であり妥当な値であると考えられる。

次にこのスペクトルを元に興味を引くいくつかのピークやディップにおける確率密度を示す。まず、最初に  $R_{\downarrow}$  が鋭いディップになっている  $kd = 4.6$  の確率密度が図 8.5 である。図の灰色の部分には壁、もしくは磁性散乱体である。両方のスピン状態において 4 つの散乱体の間で強く局在している様子が分かる。電子は、散乱体間でいったり来たりするため、他方のスピン状態への遷移が頻繁に起こる。散乱体付近でも電子の確率密度は高く、散乱体にぶつかることによりスピン反転が起こることがわかる。

図 8.6 は  $kd = 7.11$  の時であり、 $T_{\downarrow}$  が急激なピークになっている点である。ダウンスピンでの透過確率が 80% 以上になっており、アップスピンで入射したほとんどの電子がダウンスピンで透過することになる。さきほどの図 8.5 と同様に電子は散乱体間に強く局在しており、先ほどが散乱体間での基本モードであればこちらは 2 番目のモードでの共鳴であると理解できる。

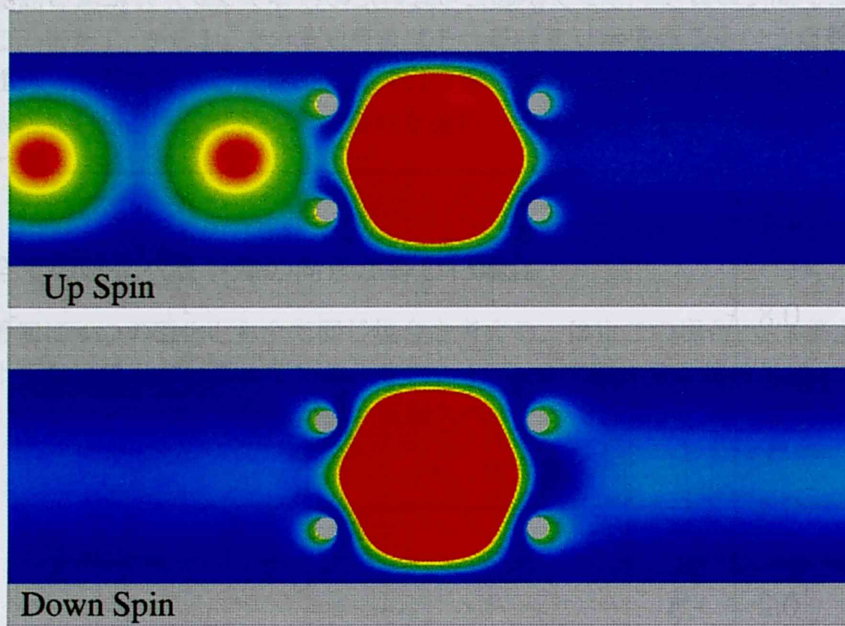


図 8.5:  $M_{xy}a^2 = 0.01$  で  $kd = 4.6$  の時の確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.12$ 、  $T_{\uparrow} \approx 0.15$ 、  $R_{\downarrow} \approx 0.30$ 、  $T_{\downarrow} \approx 0.43$

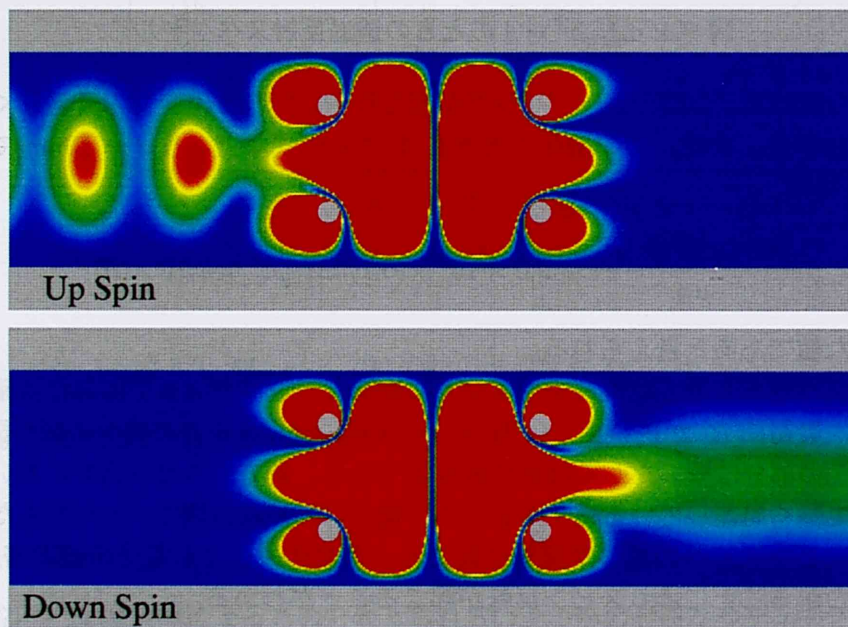


図 8.6:  $M_{xy}a^2 = 0.01$  で  $kd = 7.11$  の時の確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.14$ 、  $T_{\uparrow} \approx 0.01$ 、  $R_{\downarrow} \approx 0.03$ 、  $T_{\downarrow} \approx 0.82$



### 8.4.3 磁化ベクトルの向きが等しくない場合

前節では4つの散乱体とも同じ磁気モーメントの場合のみを計算した。そして、その対称性により共鳴が引き起こされスペクトルに鋭いピークが現れていたと考えられる。そこで、図8.7のように磁気モーメントの向きを変えていくらか対称性を崩すとどうなるだろうか。

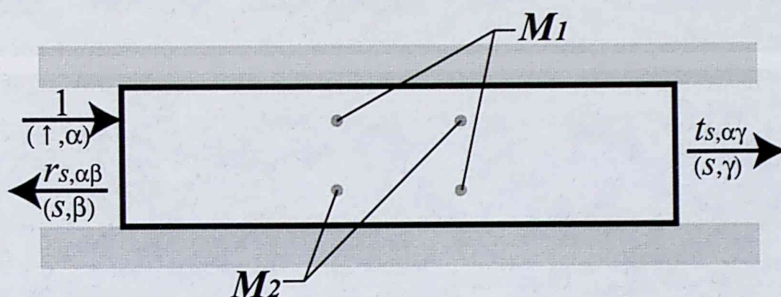


図 8.7: 対称性を崩した配置。  $M_1 = (0, m, 0)$ 、 $M_2 = (m, 0, 0)$ 。

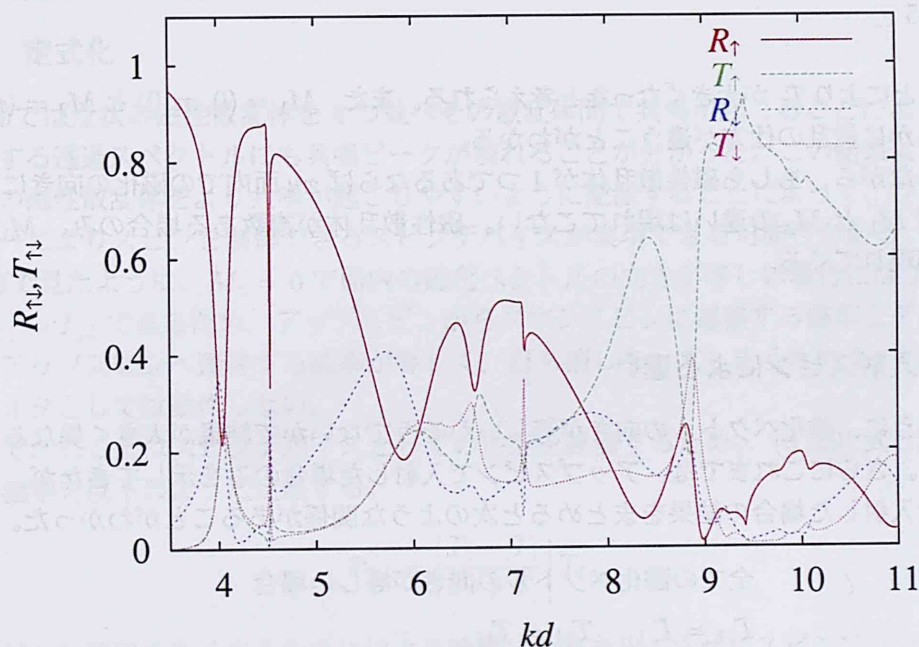


図 8.8: 図 8.7 の配置における  $ma^2 = 0.01$  のときの透過反射スペクトル

おおまかな特徴は図 8.4 と同じであるが、図 8.4 にはなかったいくつかのピークやディップが現れていることがわかる。また、図 8.4 と比べてピークやディップが少しなだらかになっている様子が分かる。

図 8.9 は  $kd = 8.37$  の時の電子密度である。図 8.4 ではみられなかった  $T_↑$  がゆるやかなピークになっている点である。対称性が崩れ4つとも同じ場合にはなかった電子の通り道が

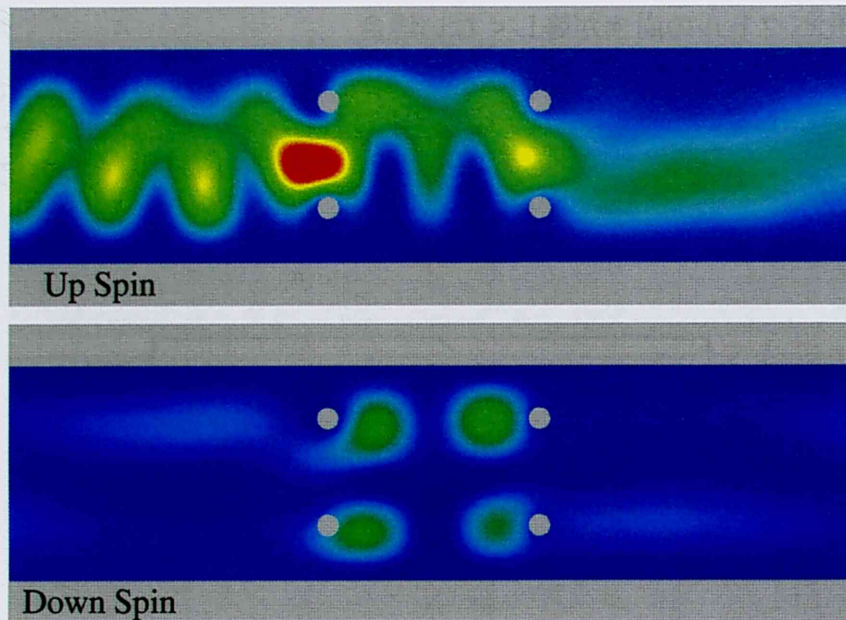


図 8.9:  $ma^2 = 0.01$  で  $kd = 8.37$  の時の確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.05$ 、  $T_{\uparrow} \approx 0.63$ 、  $R_{\downarrow} \approx 0.17$ 、  $T_{\downarrow} \approx 0.15$

できることにより  $T_{\uparrow}$  が大きくなったと考えられる。また、  $M_1 = (0, m, 0)$  と  $M_2 = (m, 0, 0)$  では明らかに散乱の仕方が違うことがわかる。

しかしながら、もしも磁性散乱体が1つであるならば  $xy$  面内での磁化の向きにはよらないので  $M_1$  と  $M_2$  の違いは現れてこない。磁性散乱体が複数ある場合のみ、  $M_1$  と  $M_2$  の違いが現れてくる。

#### 8.4.4 入射スピンによる違い

このように、磁化ベクトルの向きが等しいかそうでないかで結果が大きく異なることが分かった。さらにこれまでは、アップスピンで入射した場合のみを示してきたが、ダウンスピンで入射した場合の結果をまとめると次のような関係があることがわかった。

全ての磁化ベクトルの向きが等しい場合

$$T_{\uparrow\uparrow} = T_{\downarrow\downarrow}, \quad T_{\uparrow\downarrow} = T_{\downarrow\uparrow}$$

全ての磁化ベクトルの向きが等しくない場合

$$T_{\uparrow\uparrow} \neq T_{\downarrow\downarrow}, \quad T_{\uparrow\downarrow} \neq T_{\downarrow\uparrow} \quad (8.4.4)$$

ここで、  $T_{\uparrow\downarrow}$  はアップスピンで入射しダウンスピンで透過する場合の透過確率を示す。

この関係は次のように理解できる。  $M_z = 0$  の場合の Schrödinger 方程式は

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_{\uparrow} = (kd)^2 \psi_{\uparrow} + M_{xy} a^2 e^{-i\theta} \psi_{\downarrow} \\ -\nabla^2 \psi_{\downarrow} = (kd)^2 \psi_{\downarrow} + M_{xy} a^2 e^{i\theta} \psi_{\uparrow} \end{cases} \quad (8.4.5)$$

であった。(8.4.5) 式に  $\exp(\pm i\theta)$  をかけ、 $\tilde{\psi}_{\uparrow,\downarrow} = \psi_{\uparrow,\downarrow} \exp(\pm i\theta)$  とおけば

$$\begin{cases} -\nabla^2 \tilde{\psi}_{\uparrow} = (kd)^2 \tilde{\psi}_{\uparrow} + M_{xy} a^2 e^{i\theta} \tilde{\psi}_{\downarrow} \\ -\nabla^2 \tilde{\psi}_{\downarrow} = (kd)^2 \tilde{\psi}_{\downarrow} + M_{xy} a^2 e^{-i\theta} \tilde{\psi}_{\uparrow} \end{cases} \quad (8.4.6)$$

となる。これは (8.4.5) 式のスピンを逆にしたものと全く同じ形をしている。つまり、磁化ベクトルの向き  $\theta$  が全て等しい場合には波動関数の位相に含めてしまえば、アップスピンの入射した場合の表式とダウンスピンの入射した場合の表式とを同一になる。ただし、波動関数の位相が違うので、振幅の位相も位相差にして  $2\theta$  異なる。よって、全ての磁化ベクトルが  $M = (0, M_y, 0)$  である場合には振幅に関して以下の関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} t_{\uparrow\uparrow} &= t_{\downarrow\downarrow} \\ t_{\uparrow\downarrow} &= -t_{\downarrow\uparrow} \end{aligned} \quad (8.4.7)$$

しかしながら、(8.4.2) 式より透過、反射確率では振幅の絶対値をとるのでこれらの位相は消えてしまう。よって、(8.4.4) 式の関係が満たされる必要がある。

## 8.5 規則的に配置した場合

### 8.5.1 定式化

8.4 節では点状の磁性散乱体を 4 つ並べその散乱体間で共鳴が起こることにより、スピン反転する透過スペクトルにも共鳴ピークが現れることが分かった。この結果より細線中に点状の磁性散乱体をより共鳴が起こりやすいように配置することによって、フェルミエネルギーによりスピンを制御できるスピndeバイスが実現できる可能性がある。ただし、8.4.4 節で見たように、 $M_z = 0$  で面内の磁化ベクトルの向きが等しい場合には  $T_{\uparrow\uparrow} = T_{\downarrow\downarrow}$  かつ  $T_{\uparrow\downarrow} = T_{\downarrow\uparrow}$  であるため、アップスピンからダウンスピンの遷移する確率とダウンスピンのアップスピンへ遷移する確率が等しく、打ち消しあってしまうため 3.5.4 節のスピンフィルタとしては動作しない。

そこで、ここではスピndeバイスとしての性能を評価するため、(3.5.9) 式と同じくスピン分極率を以下のように定義する。

$$P_{\uparrow,\downarrow} = \left| \frac{T_{\uparrow} - T_{\downarrow}}{T_{\uparrow} + T_{\downarrow}} \right| T_{\uparrow,\downarrow} \quad (8.5.1)$$

このスピン分極率を高くするためにはより頻繁に共鳴を起こさせてスピンのフリップさせる必要がある。これまでの結果から、磁性散乱体を何層にも格子状に配置すればある波数において強い共鳴が期待される。

そこで、図 8.10 のように格子状に点状磁性体を配置し、その共鳴状態を解析する。図 8.10 は 3 層配置であり、細線の幅  $d$  を長さの次元にとり点状磁性散乱体の半径  $a = 0.05$  でその格子間隔は 0.2 とした。1 層、2 層の時も同様な間隔で配置する。また、全ての磁性散乱体の磁化ベクトル  $M$  は同じとする。以下の結果ではすべて入射電子波は左からアップスピン、基本モードで振幅 1 で入射するものとする。

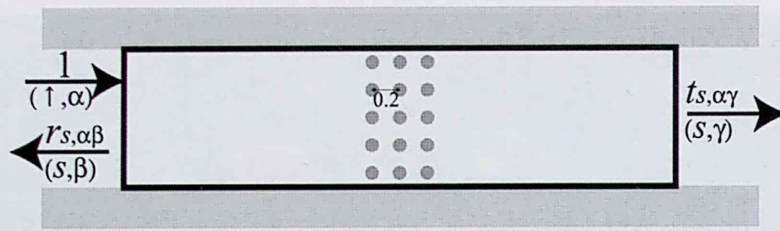


図 8.10: 3層の格子状配置

### 8.5.2 1層配置

まず最初に磁化を1層に配置した場合の結果を示す。この場合は $y$ 方向の散乱体間での共鳴が期待され、それは2,3層と増やしていったときにも同様な傾向がみられると考えられる。 $M_z = 0$ で $M_{xy}a^2$ は4.0とした。図8.11は1層配置の時の透過反射スペクトルで

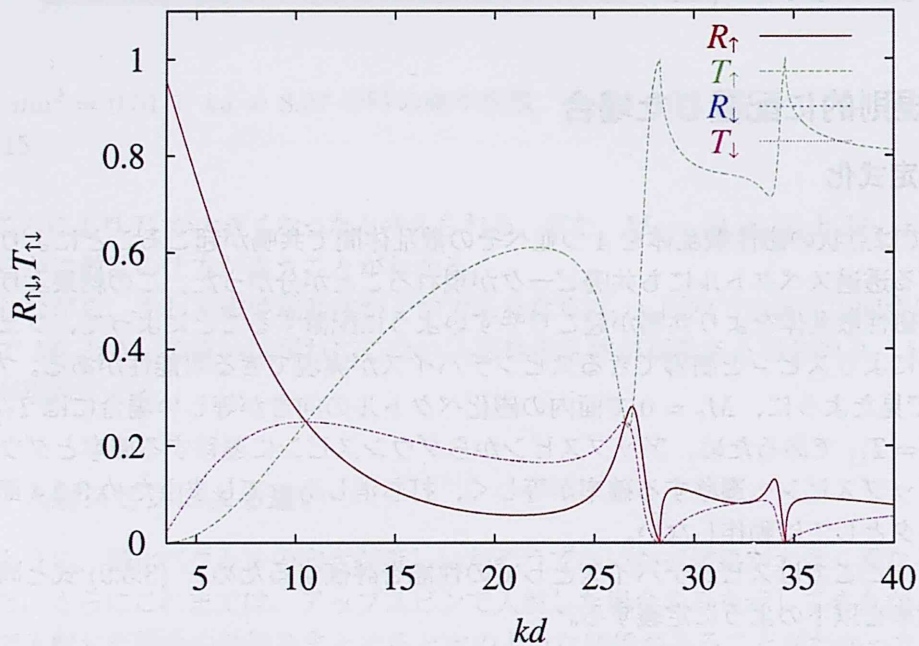


図 8.11: 1層配置の時の透過反射スペクトル

ある。波数によらず $R_{\uparrow}$ と $T_{\uparrow}$ が全く同じ値になっている。これは、アップスピンで入射した電子が、磁性散乱体によりスピン反転しダウンスピンとなる。そのとき、この配置は左右対称性があるのでダウンスピンでの反射も透過も全く同じように起こるためだと考えられる。

つぎに、いくつかの興味を引く波数での確率密度を示す。図8.12は $kd = 26.54$ の時の確率密度で、すべての透過、反射確率が等しく0.25となっている。これは共鳴が起こり散乱体間に強く局在し、電子がいわゆるトラップされた状態となりなかなか出てこれないた

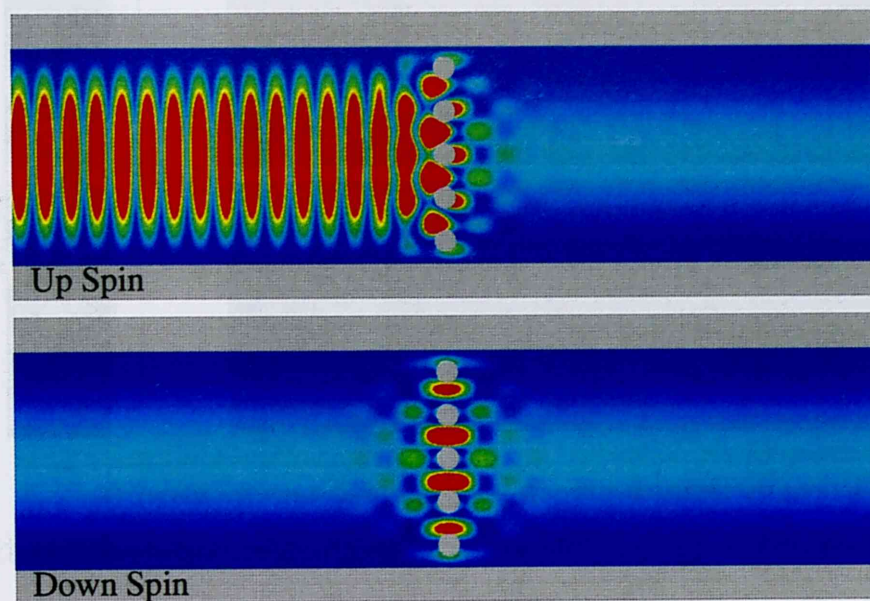


図 8.12:  $kd = 26.54$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.25$ ,  $T_{\uparrow} \approx 0.25$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.25$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.25$

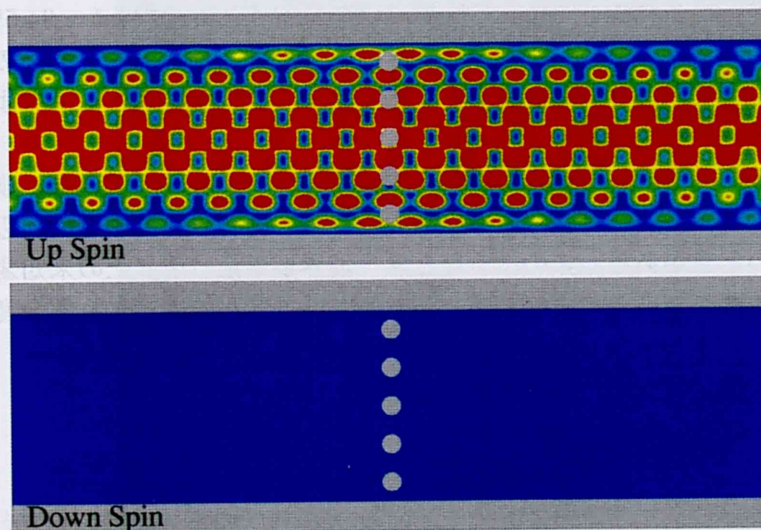


図 8.13:  $kd = 28.27$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\uparrow} \approx 1.0$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.0$

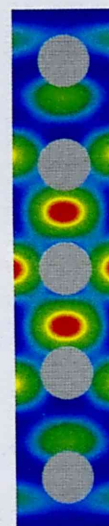


図 8.14: UpSpin 散乱体付近拡大図

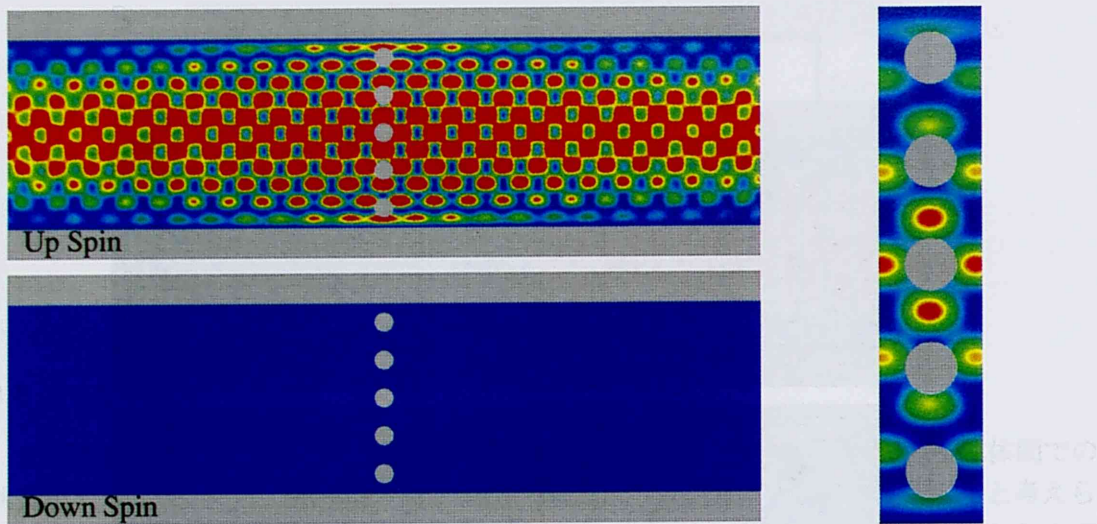


図 8.15:  $kd = 34.55$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\uparrow} \approx 1.0$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.0$  図 8.16: UpSpin 散乱体付近拡大図

めだと考えられる。

次に、図 8.13 は  $T_{\uparrow}$  が鋭いピークで 1 になっている場合である。これは図 8.14 の拡大図をみるとよくわかるが、このときの波数  $kd = 28.27$  は  $\lambda = 2\pi/(kd)$  とすれば細線の  $y$  方向にちょうど  $1/(\lambda/2) \approx 9$  個のモードを持つ波数でありこのモードのちょうど節の部分に散乱体が存在しているため散乱体に全く散乱されることなく抜けていってしまうためだと考えられる。これは  $y$  方向のモードであるので 2,3 層と増やしていったときもこの波数において  $T_{\uparrow}$  が 1 となると考えられる。

同様に、図 8.15 も  $T_{\uparrow}$  が鋭いピークで 1 になっている場合である。この波数  $kd = 34.55$  は  $1/(\lambda/2) \approx 11$  個のモードを持つ波数であり、上の場合と同様にちょうどモードの節の部分に位置しているためアップスピンでの透過が 1 となっている。これは拡大図 8.16 でよく確認できる。

このように、1 層の場合においても  $y$  方向に共鳴が起こり鋭いピークが確認できた。また、このような共鳴状態を解析するときに散乱体付近でのモードを確認するためその周辺だけより解像度を高くしたいときがある。このようなとき、境界要素法は境界上の未知変数がいったん計算できれば内部の波動関数の値は任意の場所で計算できるのでより解像度を高くしたいときでも最初から未知変数を計算し直す必要がないという利点がある。

### 8.5.3 2 層配置

次に 2 層配置の場合の結果を示す。この場合は、先ほどの  $y$  方向の共鳴に加えて  $x$  方向の共鳴が起こることが期待される。また、1 層配置の時と同様に  $M_z = 0$  で  $M_{xy}a^2$  は 4.0 とした。図 8.17 は 2 層配置の透過、反射スペクトルである。先ほどの 1 層配置の時と比べていくつか似たような傾向がみられる。とくに  $T_{\uparrow}$  の  $kd = 28.27$  と  $34.55$  でのピークは先ほどの時と全く同様であり、これはやはり  $y$  方向でのモードによるものだと考えられる。

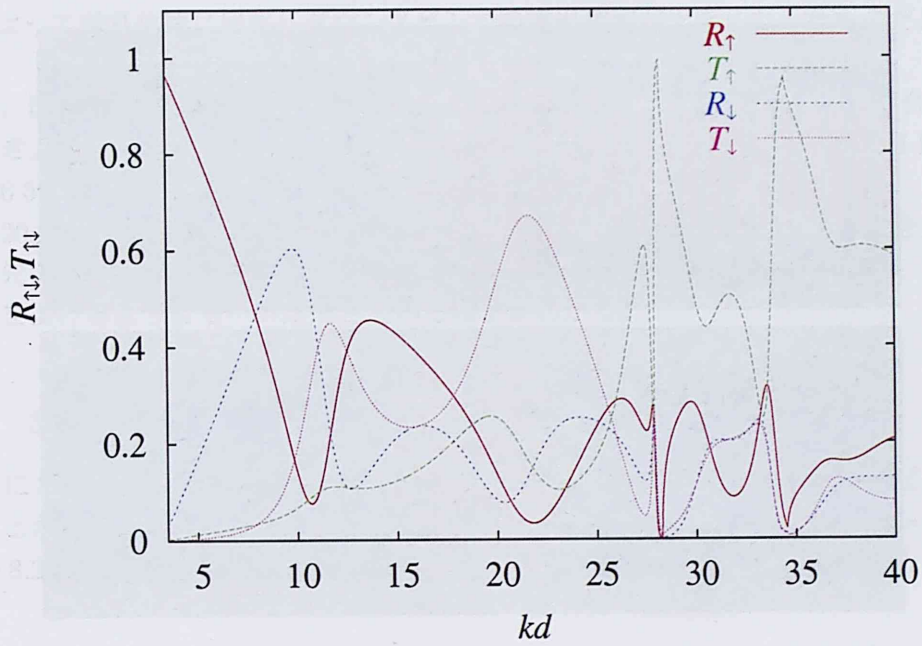


図 8.17: 2層配置の時の透過反射スペクトル

また、いままでに全くなかったピークも現れている。そこで、いくつかの波数における確率密度を示す。

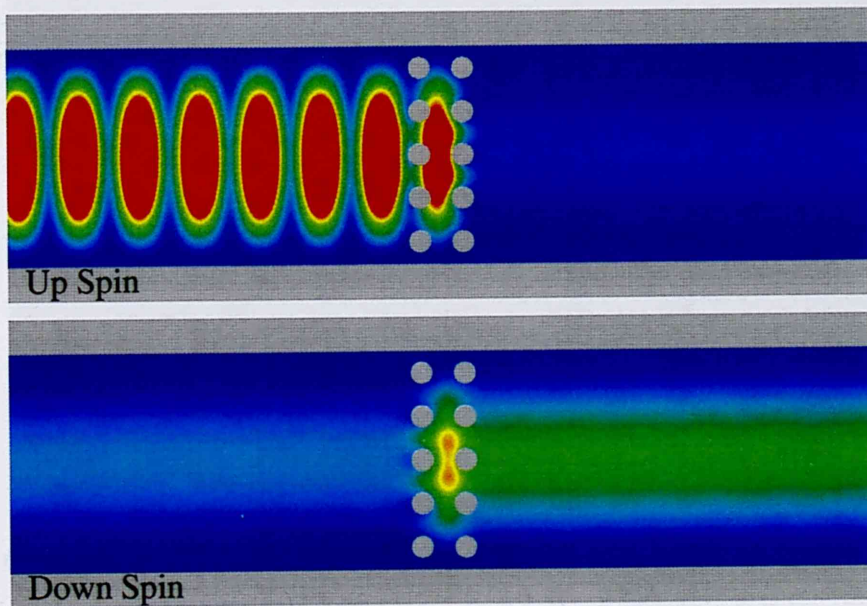


図 8.18:  $kd = 11.69$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.23$ 、  $T_{\uparrow} \approx 0.10$ 、  $R_{\downarrow} \approx 0.22$ 、  $T_{\downarrow} \approx 0.45$

図 8.18 は  $kd = 11.69$  での確率密度であり、  $T_{\downarrow}$  での最初の緩やかなピークとなってい

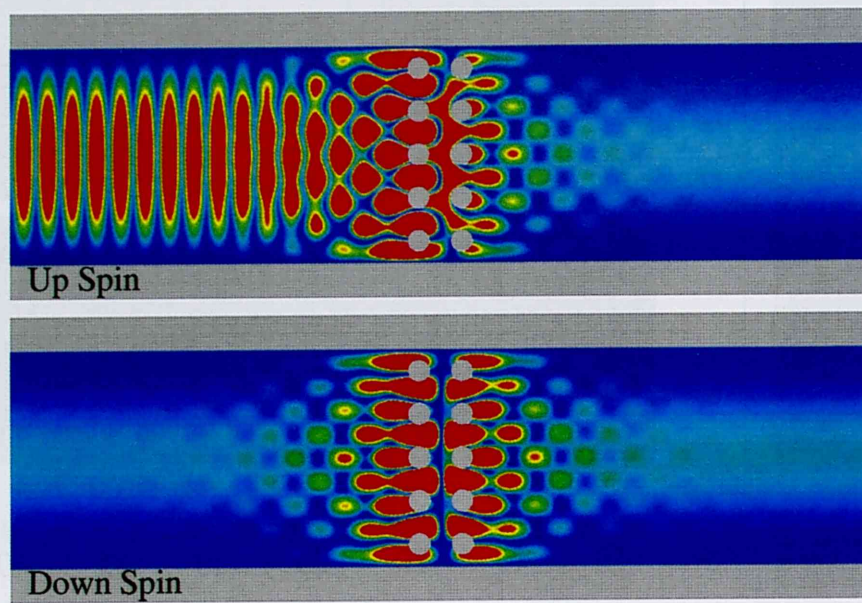


図 8.19:  $kd = 27.88$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.24$ ,  $T_{\uparrow} \approx 0.26$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.26$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.24$

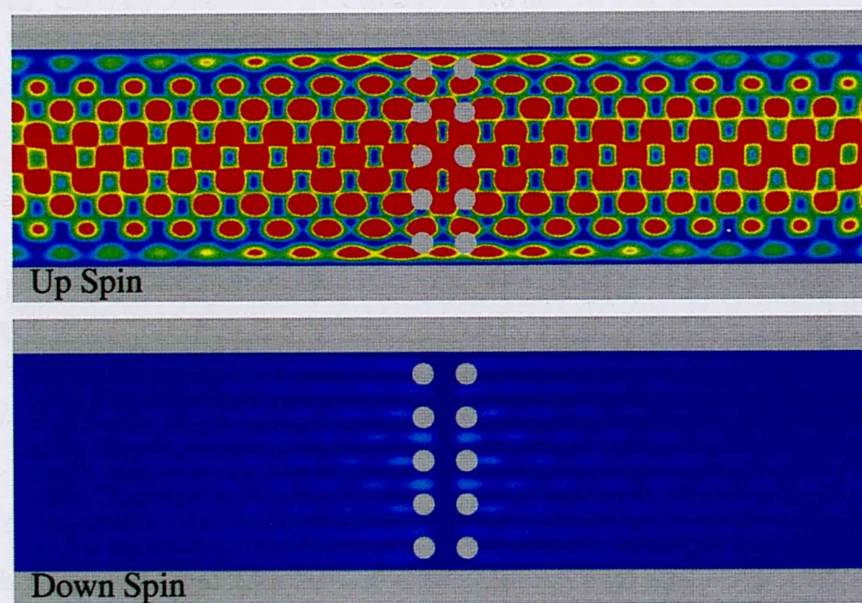


図 8.20:  $kd = 28.27$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\uparrow} \approx 1.0$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.0$



る場合である。これは最初の層と2番目の層との間にちょうど1つモードが立っており、それによって散乱体間に局在しダウンスピンでの透過確率が大きくなったものだと考えられる。

次に、図 8.19 は  $kd = 27.88$  での確率密度で、 $T_{\downarrow}$  が急激に落ち込んでいる場合である。このとき、それぞれの透過、反射確率はほぼ等しく 0.25 となっていてこれは1層の時の  $kd = 26.54$ (図 8.12) に対応しているものと考えられる。

図 8.20 は  $kd = 28.27$  での確率密度で、 $T_{\uparrow}$  が1となっている場合である。図を見れば明らかに先ほどの1層の場合の  $kd = 28.27$ (図 8.13) に対応していることがわかり、ちょうど散乱体をよけるようにモードができていく様子がわかる。

#### 8.5.4 3層配置

最後に3層配置の場合の結果を示す。この場合は、2層に加えてより激しくピークが現れることが予想される。また、1層、2層配置の時と同様に  $M_z = 0$  で  $M_{xy}a^2 = 4.0$  とした。図 8.21 が3層配置の時の透過、反射スペクトルであり1層、2層配置の時と比べてよ

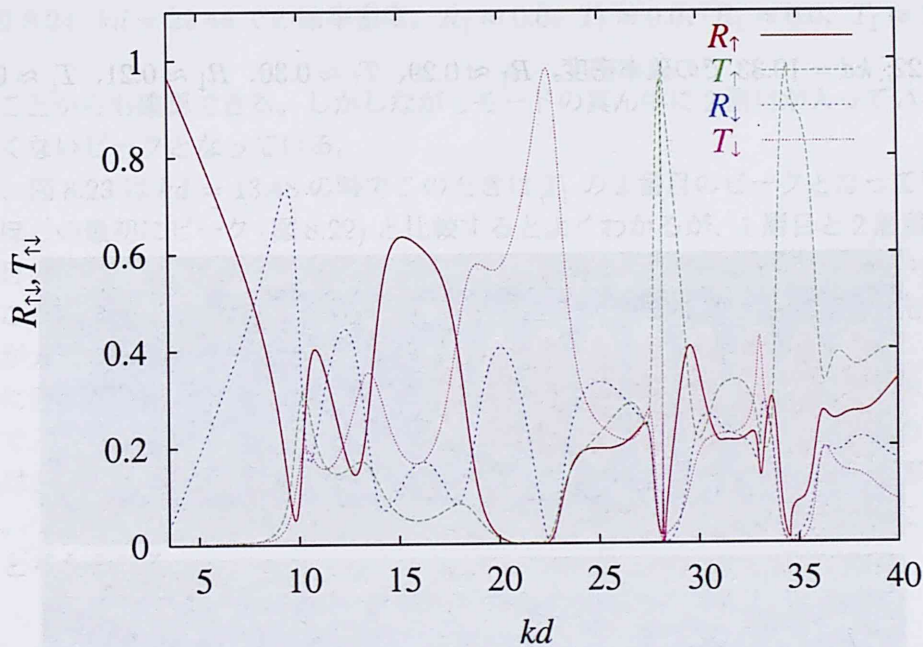


図 8.21: 3層配置の時の透過反射スペクトル

り複雑になっている。また、非常に興味深い事に  $T_{\downarrow}$  がほぼ1となっている場合もみられる。 $kd = 28.27$  と  $34.55$  での  $T_{\uparrow}$  での鋭いピークは1層、2層配置の場合と同様に  $y$  方向のモードであると考えられる。

そこでこれらの波数での確率密度を示す。図 8.22 は  $kd = 10.33$  での確率密度である。これは  $T_{\downarrow}$  での最初にピークであり、図 8.22 においても1層目と3層目との間に1つのモードが立っておりこれがその原因となっていることが考えられる。このとき、 $\lambda/2 \approx 0.304$

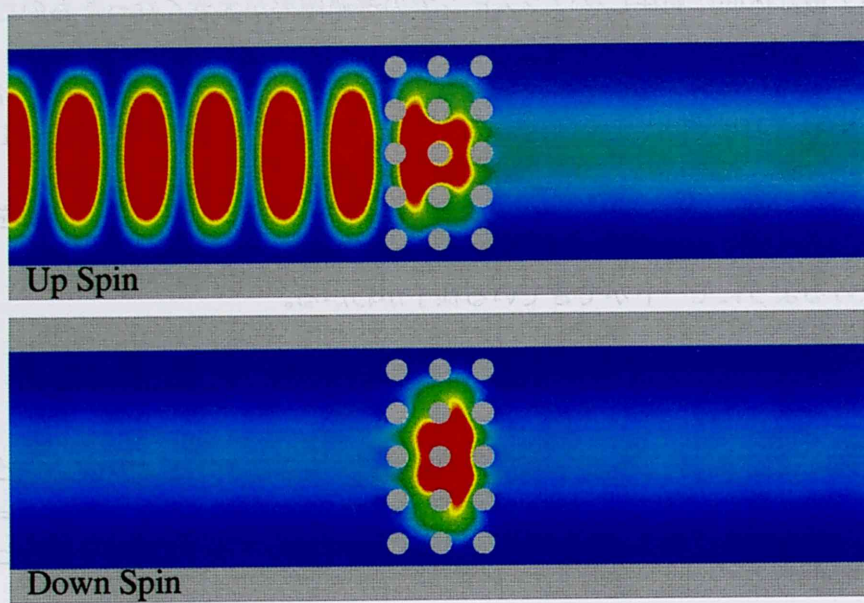


図 8.22:  $kd = 10.33$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.29$ ,  $T_{\uparrow} \approx 0.30$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.21$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.20$

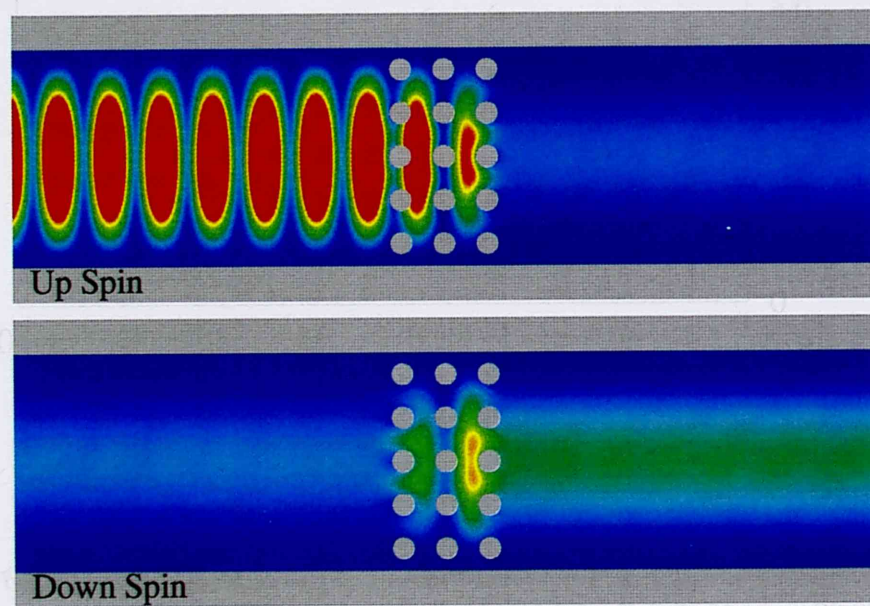


図 8.23:  $kd = 13.48$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.28$ ,  $T_{\uparrow} \approx 0.16$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.20$ ,  $T_{\downarrow} \approx 0.36$

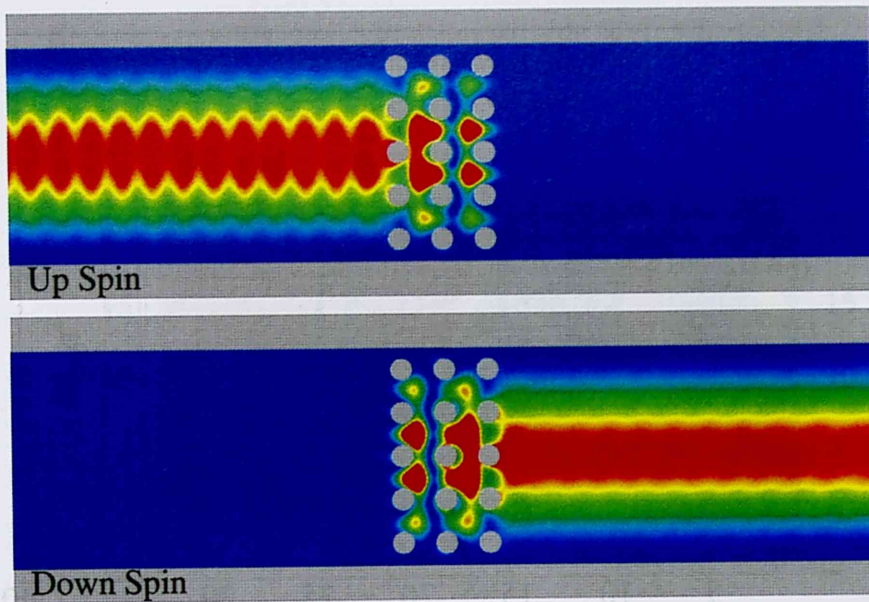


図 8.24:  $kd = 22.44$  での確率密度。  $R_{\uparrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\uparrow} \approx 0.0$ ,  $R_{\downarrow} \approx 0.0$ ,  $T_{\downarrow} \approx 1.0$

であることから確認できる。しかしながらモードの真ん中に 2 層目が入っているためあまり強くないピークとなっている。

次に、図 8.23 は  $kd = 13.48$  の時でこのときは  $T_{\downarrow}$  の 2 番目のピークとなっている。これは先ほどの最初にピーク (図 8.22) と比較するとよくわかるが、1 層目と 2 層目、2 層目と 3 層目の間にモードが立っている。このときは、 $\lambda/2 = 0.233$  でありだいたい格子間隔と近いことから確認できる。先ほどと比べてモードの中に散乱体がないため先ほどよりピークが大きくなっていることがわかる。

最後に図 8.24 であるがこれは  $T_{\downarrow}$  がほぼ 1 となっている。つまり、基本モード、アップスピンで入ってきた電子がすべてダウンスピンで透過していくことになる。このときの共鳴状態は波長  $\lambda \approx 0.28 \approx 0.2\sqrt{2}$  でありちょうど 1 つの格子の対角線の長さと同様になっている。つまり、1 つのセルにおける 4 つの散乱体の間で共鳴され、散乱体間に局在するためだと考えられる。

### 8.5.5 3 層配置のスピンの分極率

3 層配置においてある波数で  $T_{\uparrow}$  が 1、またある波数で  $T_{\downarrow}$  が 1 となるという特定のスピンの入射したときにそのスピンを制御できるスピンドバイスとしての可能性を見た。そこで、このときのスピンの分極率を図 8.25 に示す。このスピンの分極率  $P_{\uparrow, \downarrow}$  は (8.5.1) 式で与えられる。

図 8.25 では  $kd = 28.27$  や  $kd = 34.55$  では  $P_{\uparrow} = 1$  であり、 $kd = 22.44$  で  $P_{\downarrow} = 1$  となっている。つまり、入射電子波の波長を変えてやることによりそのスピンの分極率が制御でき、さらに特定の波数では分極率が 1 である。つまり、アップスピンを入射したときに、フェルミエネルギーによってはそのままアップスピンとして透過し、またエネルギーを変えれ

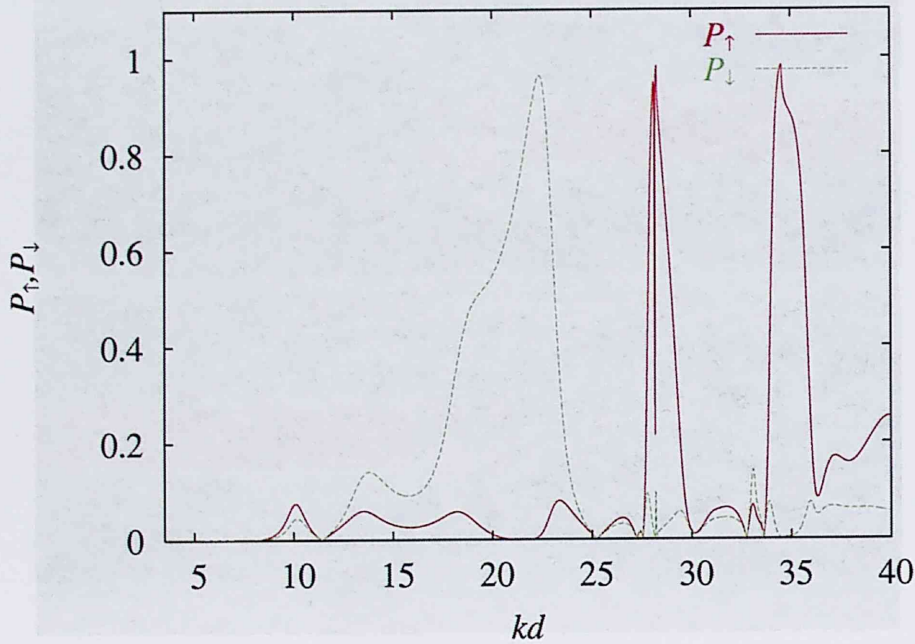


図 8.25: 3層配置のスピンの分極率

ば全てダウンスピンへとスピン反転させて透過させることが出来る。ここでは、アップスピンで入射した場合を見たが、8.4.4節よりダウンスピンで入射した場合にはスピンに対して全く反対に動作する。つまり、特定のエネルギーで入射したスピンを全て反転させる論理回路における NOT 回路のような動作をする。

### 8.5.6 磁化の大きさによる影響

これまでではすべて  $M_z = 0$  で  $M_{xy}a^2 = 4.0$  として計算を行ってきた。この磁化の大きさを変えるとそれに伴い透過、反射スペクトルも大きく変化する。そこで3層配置において磁化を変化したときのそれぞれのスピンの透過、反射スペクトルを図 8.26、8.27、8.28、8.29 に示す。

これらからわかることは磁化が小さいうちはスピンのフリップすることなくそのまま抜けていく。少し大きくなるとスピンのフリップが起こり、特定の波数において共鳴が起こりピークが現れる。さらに大きくなると今度は磁化の内部に入り込めないためにスピンのフリップが起こりにくくなり、アップスピンでの反射が大きくなる。このときポテンシャルによる散乱体と変わらなくなるのでバンド構造が現れてくる。格子間隔が 0.2 なのでバンドは  $2\pi/(0.2 \times 2) \approx 15.7 = b$  程度の間隔で現れ、特に図 8.26 では  $b \times 1 = 15.7$ 、 $b \times 2 = 31.4$  あたりにはっきりと現れている。また同様に少し崩れているがダウンスピンでのバンドもみられる。

つぎに、分極率が磁化の大きさによってどのように変化するかを示す。このときの分極率は図 8.28、8.29 での  $T_{\uparrow, \downarrow}$  から求めたものである。

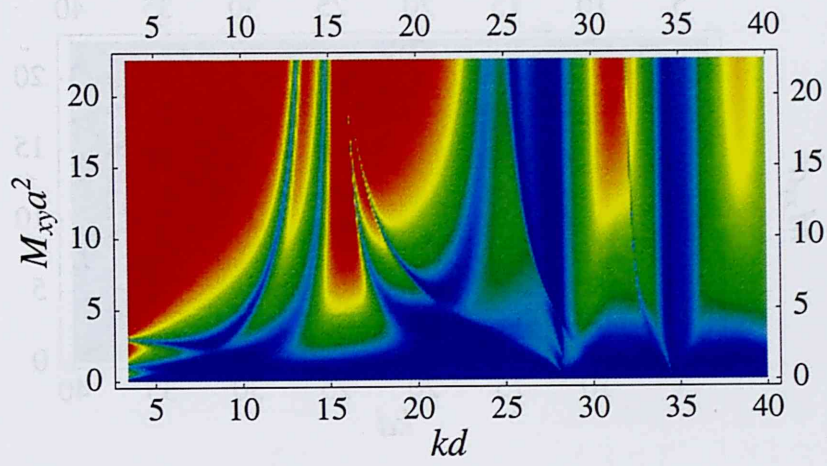


図 8.26: 3層配置でのアップスピンでの反射確率  $R_{\uparrow}$

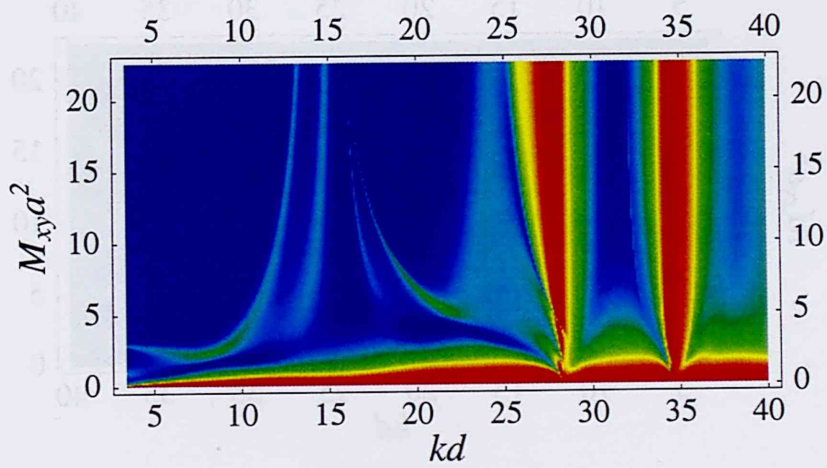


図 8.27: 3層配置でのアップスピンでの透過確率  $T_{\uparrow}$

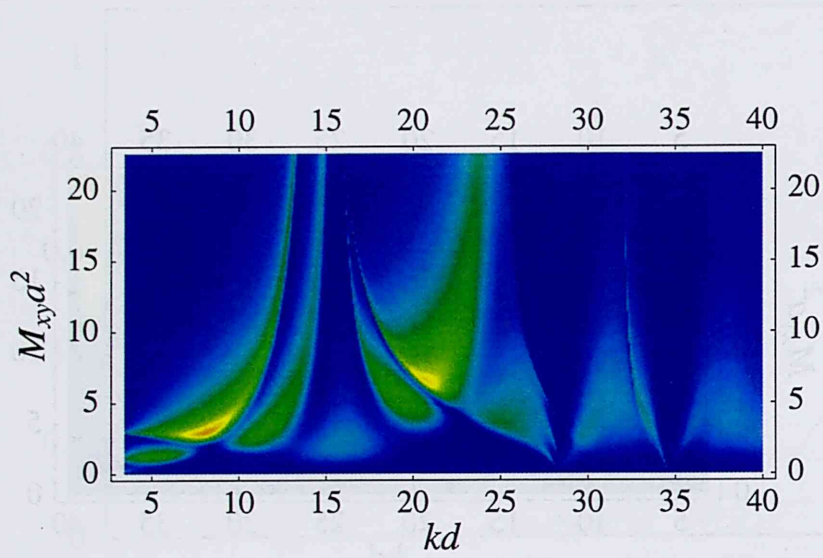


図 8.28: 3層配置でのダウンスピンでの反射確率  $R_{\downarrow}$

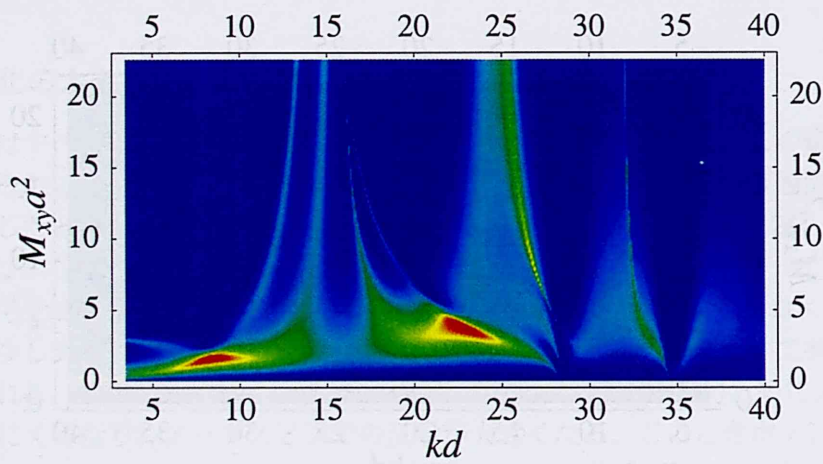


図 8.29: 3層配置でのダウンスピンでの透過確率  $T_{\downarrow}$

今仮定として、式(8.29)の左辺を  $M_{xy}d^2$  とし、右辺を  $P_1$  とする。このとき、式(8.29)は、  
 $M_{xy}d^2 = P_1$  となる。ここで、 $P_1$  はアップスピンの分極率を示す。

### 第9章 境界要素法

9.1 導波管

近年の無線通信技術の発展に伴い、導波管の設計・解析が重要な役割を果たしている。導波管は、電磁波を特定の方向に伝搬させるための構造体であり、その設計には境界要素法(BEM)が有効である。BEMは、導波管の境界面上に未知の電磁場を仮定し、その境界面上での電磁場の連続性を満たすように未知量を決定する。この方法により、導波管の伝搬特性や損失特性を高精度で解析することができる。

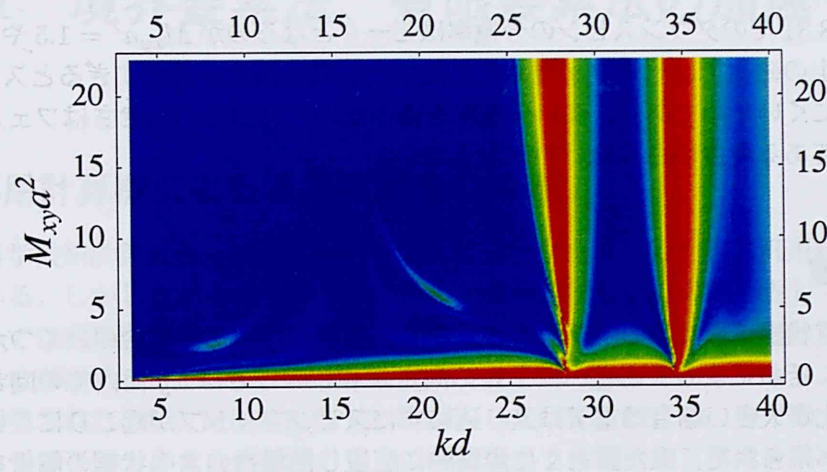


図 8.30: 3層配置でのアップスピンの分極率  $P_1$

導波管の設計には、伝搬モードの解析が不可欠である。伝搬モードは、導波管内部を伝搬する電磁波の空間的・時間的分布を示す。伝搬モードの解析には、境界要素法(BEM)が有効である。BEMは、導波管の境界面上に未知の電磁場を仮定し、その境界面上での電磁場の連続性を満たすように未知量を決定する。この方法により、導波管の伝搬特性や損失特性を高精度で解析することができる。

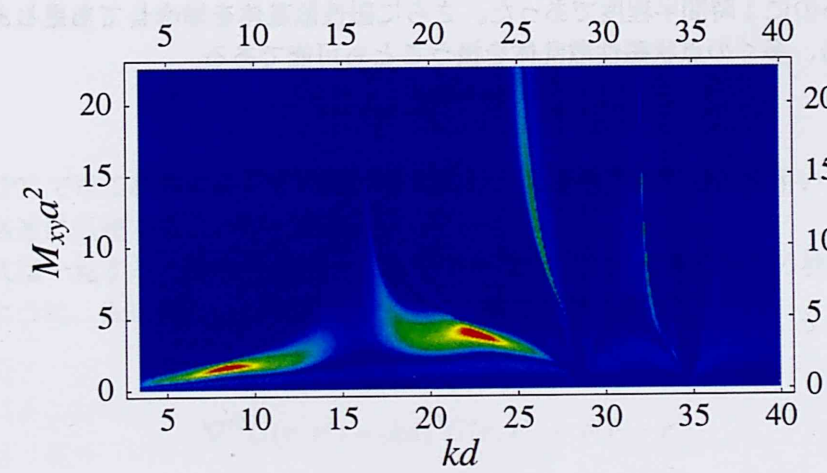


図 8.31: 3層配置でのダウンスピンの分極率  $P_1$

図 8.30 でのアップスピンの分極率は 1 層、2 層、3 層に共通して現れた  $kd = 28.27$  や  $kd = 34.55$  でのピークを中心にピークとなっており、散乱体をそのまま抜けていくモードによるものと考えられる。このピークはその磁性体の配置によるものなので磁化の大きさを変えても変わらない。

また、図 8.31 でのダウンスピンの分極率はピークとなるのが  $M_{xy}a^2 = 1.5$  や 4 付近しかなくそれ以上の磁化ではピークが現れてこない。これは磁化が大きすぎるとスピントリップが起こりにくいことためであり、高い分極率を得るためには磁化の大きさはフェルミエネルギーに対してある程度小さくしなければならない。

## 8.6 議論

本章では点状磁性散乱体のモデルを定式化し、それが複数ある場合のいくつかの計算結果を示した。それにより、磁化ベクトルの向きが等しいときは  $xy$  面内での向きによらないことや磁化が大きい場合は電子は入り込めずにスピントリップが起こりにくいことなど意外な結果が得られた。また、とくに規則的に配置した場合の共鳴状態の解析を行い、電子は共鳴により散乱体間に局在しスピン反転が頻繁に起こることを明らかにした。さらにこれらの配置でのコンダクタンス、そしてスピン分極率を示した。それにより格子状配置でのスピンドバイスとしての可能性を示し、特に 3 層の場合には入射したスピンを全て反転させるスピン NOT 回路が実現できることを見た。

また、本章で行った定式化は (8.2.6) 式で示したように磁性散乱体による影響を体積積分を実行することなく足しあわせるだけでよく、計算精度、時間の面からみても優秀であった。たとえば、図 8.5 のような確率密度の計算では境界の要素を 500 個、内部を  $250 \times 1000$  程度に分割し計算を行った結果、計算精度は確率の保存が小数点第 3 位以下の誤差であり、計算時間が 3GHz の Pentium4 を用いて内部の未知変数を求めるのに 15 分程度、確率密度を計算するのに 1 時間半程度であった。さらに磁性散乱体を増やしても足しあわせるだけでよいこと、多くの点状磁性散乱体を扱うことも可能である。



## 第9章 境界要素法、有限要素法の加速

### 9.1 専用計算機による境界要素法の加速

近年の科学技術計算の多くは、スーパーコンピュータをはじめとする汎用計算機により行われている。しかしながら、それらの計算の大部分が同じ計算の繰り返しであり、その部分に関しては汎用計算機を用いる必要はなく、その計算に特化した専用計算機により加速させることが出来る。そこで、理化学研究所で分子動力学シミュレーションの専用計算機として開発されたのが、MD-GRAPPE2である。MD-GRAPPE2は、分子動力学におけるクーロン力や分子間力、また惑星間の重力の計算など2体間の相互作用を求め、それらを足し合わせることに特化した専用計算機である。実はこのMD-GRAPPE2を用いて、境界要素法を加速させることが出来る。

MD-GRAPPE2は大きく分けて2つの計算が出来る。ひとつがフォースモードで、2体間に働く力をすべての粒子に対して足し合わせるものである。

$$f_i = \sum_j b_{ij}g(a_{ij}|\mathbf{r}_{ij}|^2)\mathbf{r}_{ij} \quad (9.1.1)$$

ここで、 $a_{ij}$ と $b_{ij}$ は定数、 $g$ は相互作用を表す関数、 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ は粒子 $i$ から粒子 $j$ への位置ベクトルである。そしてもうひとつがポテンシャルモードで、すべての粒子からのポテンシャルを足し合わせる計算を行う。

$$\phi_i = \sum_j b_{ij}g(a_{ij}|\mathbf{r}_{ij}|^2) \quad (9.1.2)$$

MD-GRAPPEではこれらの計算を内部で並列化し、最適化された回路を用いることによって非常に高速に処理することが出来る。

この2式は一見すると境界要素法とは結びつかない。2次元電子系での境界要素法は6章で見たように、Schrödinger方程式とグリーン関数が満たす式

$$\begin{aligned} -\nabla'^2\psi(\mathbf{r}') &= (kd)^2\psi(\mathbf{r}') \\ -\nabla'^2G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= (kd)^2G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (9.1.3)$$

より、グリーンの公式を用いて、境界積分方程式

$$\psi(\mathbf{r}) = \oint \left( G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \cdot n dS' \quad (9.1.4)$$

をたて、これを解くことによって内部の波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を求めた。実際に数値計算を行うにあたって、上式は数値積分により評価される。このとき、0次要素、つまり要素上で $\psi(\mathbf{r}')$

と  $\frac{\partial}{\partial n'}\psi(\mathbf{r}')$  が一定とした時の (9.1.4) 式右辺第 1 項はある要素  $\Gamma_j$  において、

$$\frac{\partial}{\partial n'}\psi_j \int_{\Gamma_j} G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}') dS' \quad (9.1.5)$$

となる。この積分に対し、ガウス積分法を適用すれば、

$$\frac{\partial}{\partial n'}\psi_j \sum_m w_m G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_m) \frac{l_m}{2} \quad (9.1.6)$$

である。ここで、 $w_m$  はガウス積分の重み、 $l_m$  は要素  $\Gamma_j$  の長さである。この式は、MD-GRAPe のポテンシャルモード (9.1.2) 式とまったく同様の形式となっている。さらに (9.1.4) 式右辺第 2 項もある要素  $\Gamma_j$  において、

$$\psi_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial}{\partial n'} G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}') dS' \quad (9.1.7)$$

であるので、ガウス積分を適用すれば、

$$\psi_j \sum_m \left( w_m \frac{\partial}{\partial n_m} G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_m) \frac{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m|} \right) \frac{l_m}{2} \quad (9.1.8)$$

と表すことができ、これはフォースモード 9.1.1 式と同一の形をしている。

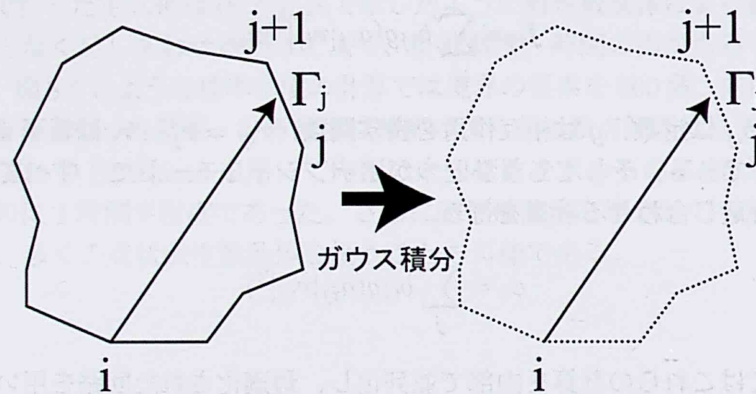


図 9.1: 境界積分方程式に対するガウス積分

つまり、境界積分方程式をガウス積分で求める場合には、図 9.1 のようにガウス積分での分点をそれぞれひとつの粒子と捉え、それらとの相互作用を足し合わせたものとみなすことが出来る。つまり、分子間力や惑星間の重力の計算とまったく同じ計算であるといえる。このようにして、MD-GRAPe を用いて境界要素法による内部の波動関数を求める計算を加速できる。この内点の計算では、MD-GRAPe2 を 2 枚用いて要素数 1500、内点数 40000 の計算を行ったところ、Pentium4 3.0GHz に対して約 240 倍もの加速を得ることが出来た。

また、境界上の未知変数や透過、反射確率を求める場合には反復解法を使えばよい。その場合、未知変数に適当な初期値を入れ、その解ベクトルを MD-GRAPe を用いて係数行

列と掛け合わせる。この残差より、解ベクトルを修正し係数行列にかける。これを繰り返すことによって、解を求めることが出来る。ただし、本研究では反復解法として GMRES、前処理法として点ヤコビ法を用いて計算を行ったが十分な収束性が得られず、MD-GRAPE による加速を行うことは出来なかった。これは、(9.1.8) 式のグリーン関数を関数テーブルにより近似しているためその誤差が蓄積されたため、または係数行列のリード線部分と、境界部分との行列の性質の違いに起因するものではないかと考えられ、より適切な前処理を行うことにより改善するのではないかと考えられる。

## 9.2 MPIによる境界要素法の加速

最近のスーパーコンピュータの傾向として、専用に設計された高速に動作する CPU を用いたものから、汎用の CPU を数多く設置し並列計算を行う超並列マシンが主流となっている。とくに、コストの面から複数の PC やワークステーションをネットワークで結合し並列計算を行う PC クラスタ、そしてより巨大なグリッドコンピューティングが注目されている。このことは、プロセスを微細化すれば高速化する半導体のスケーリング則の崩壊により、CPU 単体での性能向上の限界が見えてきたことが大きい。このため、科学技術計算の加速化も並列計算を用いたものが主流となっている。このことは科学技術計算の多くが同じ計算の繰り返しであるため、並列化しやすいことも手伝っている。

本研究では、スーパーコンピュータと PC クラスタを用いて MPI 並列計算により境界要素法や有限要素法の計算を行っている。現在の並列計算は大きく分けて 2 つあり、全てのプロセスが同じメモリーを共有する共有メモリー型とそれぞれのプロセスが異なるメモリーを持つ分散メモリー型がある。前者では SMP 並列計算が可能で OpenMP などが用いられ、後者では MPI 並列計算が可能である。分散メモリー型の利点は、メモリーを共有しないのでネットワークで繋がっていても異なるマシン間でも並列計算を実行できることにある。そのため、同一のプログラムでスーパーコンピュータから PC クラスタまで実行可能である。本研究ではこの分散メモリー型である MPI を採用し、加速化を行った。

### 9.2.1 ループの分割

一般的に並列計算ではループを分割しそれぞれのプロセスに割りあて、計算時間を理想的には  $1/\text{プロセス数}$  とすることを旨とする。そのため、どのような方法でループを分割するかが重要となってくる。ループの分割法として最も単純な方法がブロック分割である。ブロック分割は、図 9.2 のように全ループ数  $N$  をプロセス数  $P$  で割り  $N/P$  のブロックに分割し、それぞれのプロセスにそれらのブロックを割り当てる方法である。非常に単純なため、プログラミングが容易であり通信も少なくすむ。しかしながらロードバランスが一定ではない場合、例えばスペクトル計算のようにエネルギーもしくは波数によって分割数を変え、要素数が  $N$  の前半と後半部分で大きく異なってくる様な場合にはブロック間での仕事量が変わってしまい、効率よく計算できない。また、PC クラスタのようにプロセス間での演算性能に差がある場合にも同様に効率が悪くなってしまふ。

他の分割法としては、サイクリック分割がある。サイクリック分割では、全ループ数  $N$  からプロセス数  $P$  だけ取り出し、その 1 つをそれぞれのプロセスに割り当て、全てのプロ

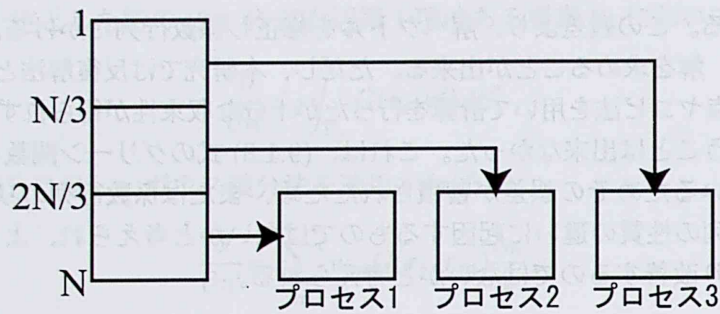


図 9.2: ブロック分割

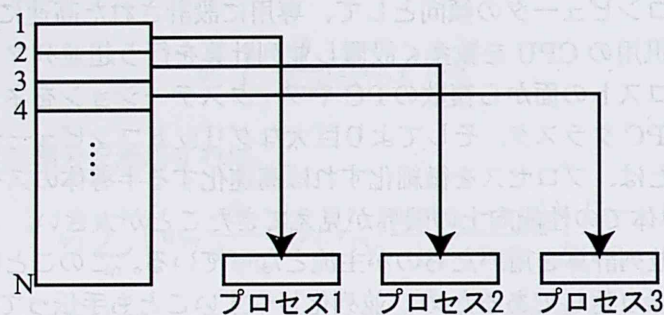
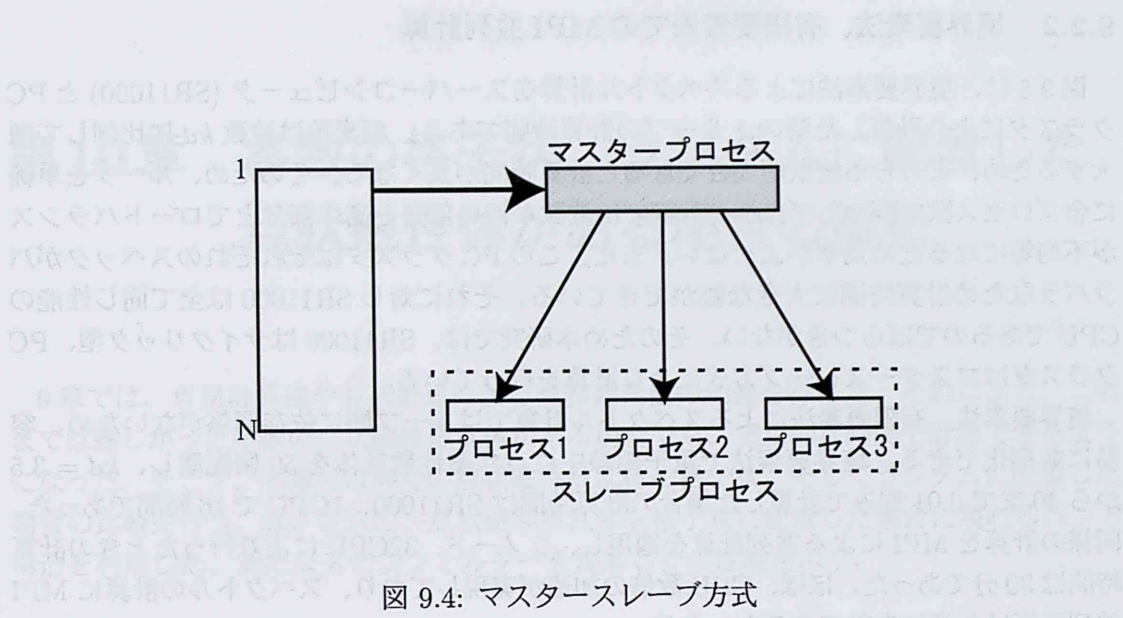


図 9.3: サイクリック分割

セスでの計算が終わったら、再び  $P$  だけ取り出し割り当てていく方法である。この方法での利点は一回ずつ割り当てていくので、ロードバランスが一定でないループの分割に有効である。しかしながら、計算するたびに結果を通信する必要があるので、通信によるオーバーヘッドが大きくなる。また、プロセス間での演算性能に差がある場合にはブロック分割と同様に効率が良くない。

これまでの分割法では割り当てられる仕事はそれぞれのプロセスに平等に、そして最初から決められたものが割り当てられる。そのためプロセス間の演算性能に差がある場合を考慮したものではなく、PC クラスタでの実行に適していない。PC クラスタに適した方法として、マスタースレーブ方式がある。マスタースレーブ方式は、一つのプロセスをマスタースレーブ方式として割り当て、ジョブを管理させる。他のプロセスはスレーブプロセスとして、実際の計算を行う。このようにすれば、計算が終わったプロセスにはすぐジョブが割り当てられ、他のプロセスが終わるまで待つ必要がない。そのため、PC クラスタでも効率よく計算できる。欠点としては、マスタースレーブ方式として1つプロセスを要する、通信回数が多くなるのでそれによるオーバーヘッドが大きくなる、さらにプログラムが複雑になると言ったことがあげられる。



### 10.1 正方格子状配置とランダム配置との比較

8章で、正方格子状に配置した場合に、スピンの値が1となるという多量に興味深い結果を得た。そこで本節では、正方格子状により多くの磁を配置した格子の解析を行う。さらに、何個の磁がランダムに配置した場合との比較を行う。図9.5の

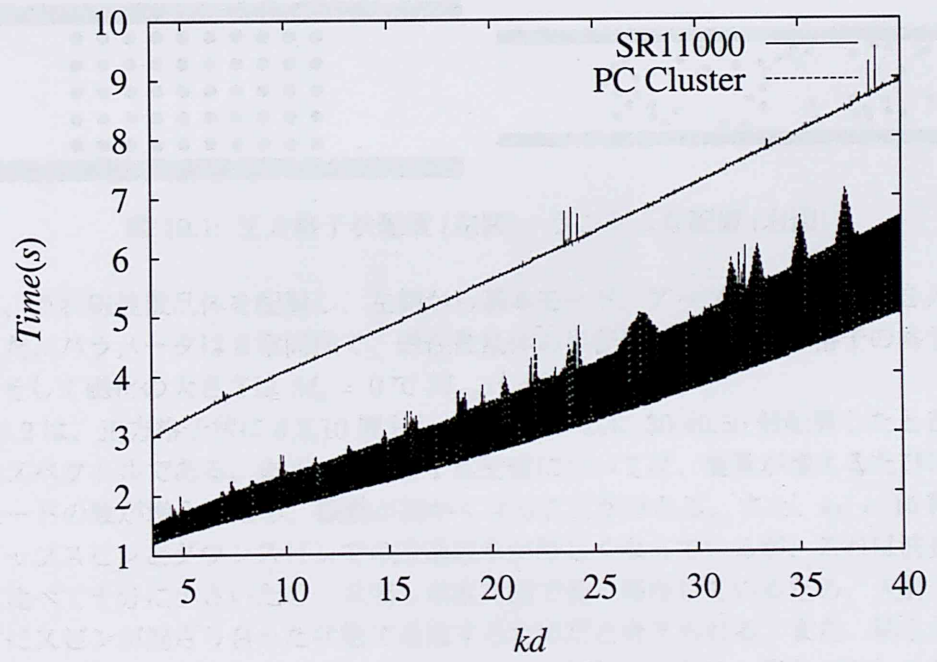
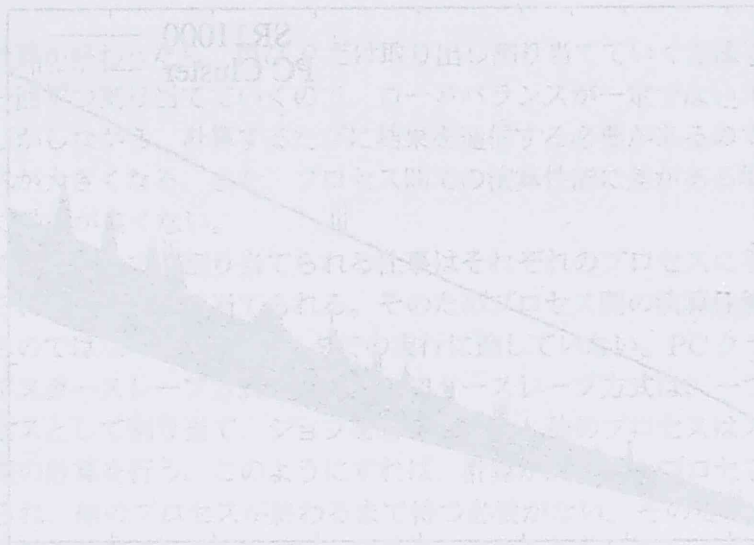


図 9.5: SR11000 と PC クラスタにおける 1 ループの計算時間

## 9.2.2 境界要素法、有限要素法でのMPI 並列計算

図9.5は、境界要素法によるスペクトル計算をスーパーコンピュータ (SR11000) とPCクラスタにより計算した時の1ループの計算時間である。要素数は波数  $kd$  に比例して増大するため、どちらも波数が大きくなると計算時間が長くなる。そのため、ループを単純に全プロセス数で割ったブロック分割では波数が低い部分と高い部分とでロードバランスが不均等になるため効率がよくない。また、このPCクラスタはそれぞれのスペックがバラバラなため計算時間に大きな幅ができています。それに対しSR11000は全て同じ性能のCPUであるのでばらつきがない。そのため本研究では、SR11000はサイクリック型、PCクラスタはマスタースレーブ方式により計算を行っている。

境界要素法、有限要素法によるスペクトル計算ではループ間に依存関係がないため、容易に並列化できる。境界要素法で量子細線中に点状磁性散乱体を50個配置し、 $kd = 3.5$  から40まで0.01刻みで計算した場合の計算時間はSR11000、1CPUで16時間であった。同様の計算をMPIによる並列計算を適用し、2ノード、32CPUにより行ったときの計算時間は30分であった。ほぼ、CPU数倍の加速が実現しており、スペクトルの計算にMPI並列計算は非常に有効であるといえる。



## 第10章 多数の格子状、ランダムに配置した点状磁性体がある場合の解析

9章では、専用計算機や並列計算による境界要素法の加速を行った。それにより、これまでは難しかった多数の点状磁性散乱体がある場合でも、実用的な時間で計算できるようになった。そこで、本章では多くの点状磁性散乱体を格子状、そしてランダムに配置した場合の比較を行う。[35] さらに、点状磁性散乱体を格子状に配置した場合に現れるバンド構造を利用した、新たなスピフィルターを提案しその性能を示す。

### 10.1 正方格子状配置とランダム配置との比較

8章で、正方格子状に3層配置した場合に、スピン分極率が1となるという非常に興味深い結果を得た。そこで本節では、正方格子状により多くの層を配置した場合の解析を行う。さらに、同数の点状磁性散乱体をランダムに配置した場合との比較を行う。図10.1の

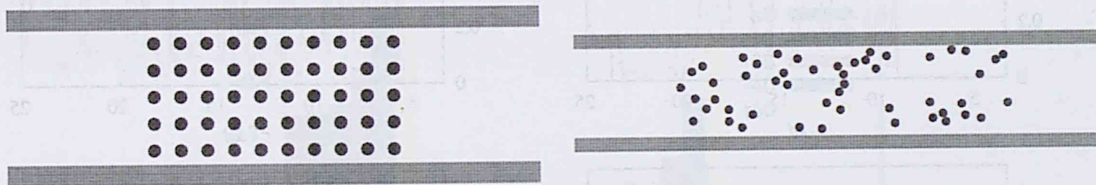


図 10.1: 正方格子状配置 (左図)、ランダムな配置 (右図)

ように、点状磁性散乱体を配置し、左側から基本モード、アップスピンで電子を入射させる。また、パラメータは8章同様で、磁性散乱体の半径は  $0.05d$  で正方格子の格子間隔は  $0.2d$ 、そして磁化の大きさは  $M_z = 0$  で  $M_{xy}a^2 = 4.0$  である。

図10.2は、正方格子状に6,8,10層もしくはランダムに30,40,50個配置したときの、透過反射スペクトルである。まず、正方格子状配置については、層数が増えるたびに共鳴できるモードの数が増えるため、振動が細かくなることが分かる。また、 $kd = 15$ 程度までは、アップスピンとダウンスピンでの透過確率が等しくなっているが、これは波長が格子間隔と比べて十分に小さいため、共鳴し散乱体間で長く滞在しているため、入射スピンによらずにスピが混ざり合った状態で透過するためだと考えられる。また、明らかに反射が強い領域と透過が強い領域が現れており、それは層数が増えると振動が激しくなり最終的にはバンドになると思われる。興味深いのは、 $kd = 20$ から $kd = 24$ 程度に現れている透過バンドが、6層ではアップスピン、8層ではダウンスピンが強くなっている。つまり、透過バンドのスピは層数によって入れ替わることがある。

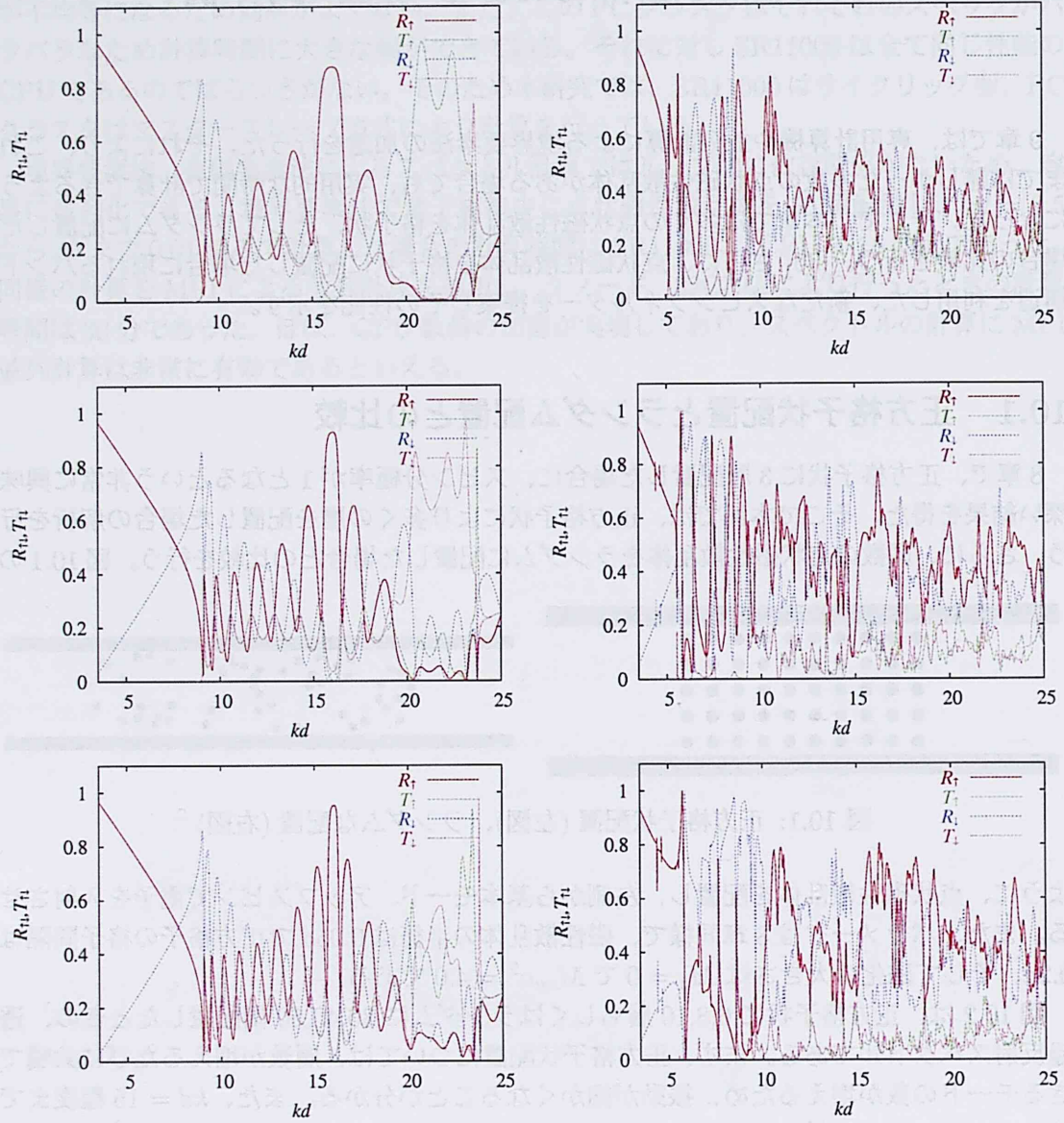


図 10.2: 正方格子状配置 (左図)、ランダムな配置 (右図) における透過反射スペクトル。上から、左図は 6,8,10 層、右図は 30,40,50 個



つぎに、ランダム配置については、激しく振動しておりこのままでは、その性質を見ることは難しい。そこで、 $kd = 3.5$  から  $kd = 25$  の間で、波数に対して透過、反射確率の平均と標準偏差をとったものが図 10.4 である。まず、平均についてみると、正方格子状配置の場合は層数が増えても反射確率の平均はあまり変わっていない。これは、振動は激しくなってもその振幅はあまり変わらないためである。透過確率の平均は、6 層と 8 層ではアップとダウンスピンで異なるが 10 層では、ほぼ同じになっている。つまり、スピンドバイスとして用いる場合には、あまり層数を増やさない方が良い結果が得られることも考えられる。

対して、ランダム配置の場合は  $R_{\downarrow}$  が散乱体数が増えるたびに増加し、50 個の場合には  $R_{\uparrow}$  とほぼ同じになっている。これは、散乱体の数が増えるほど散乱体間での局在が起りやすくなり、そのためスピンの混ざり合ったためである。また、散乱体数が増えるたびに反射が多くなっているが、これはアンダーソン局在が起り始めており、入射波と反射波で間で共鳴が起り、それにより反射振幅が大きくなるためであると考えられる。

つぎに、標準偏差についてみる。まず、正方格子状配置の場合は、反射確率についてはほぼ等しくなっている。これは、やはり層数が変わっても振幅が変わらないことに起因している。たいては、ランダム配置では散乱体数が増加するたびに反射については増加し、透過については減少している。これは、単純に散乱体の数が増えると反射確率が大きくなり透過確率が小さくなるため、その分、反射、透過スペクトルに現れる振幅も大きくもしくは小さくなるためである。

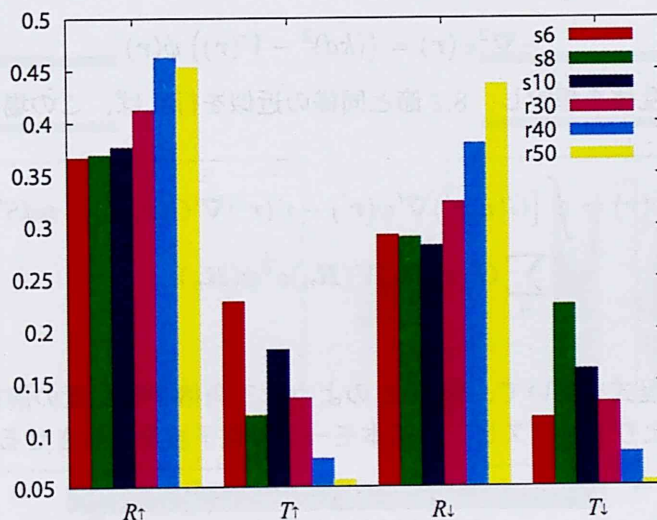


図 10.3: 図 10.2 に対する平均。それぞれ左から正方格子 6、8、10 層 (s6、s8、s10)、ランダム配置 30、40、50 個 (r30、r40、r50)

## 10.2 格子状配置によるバンドの形成

これまで、点状散乱体を格子状に配置することにより透過スペクトルにバンド構造が現れることを見た。そこで、本節ではまず散乱体がポテンシャルの場合を想定し、縦方向

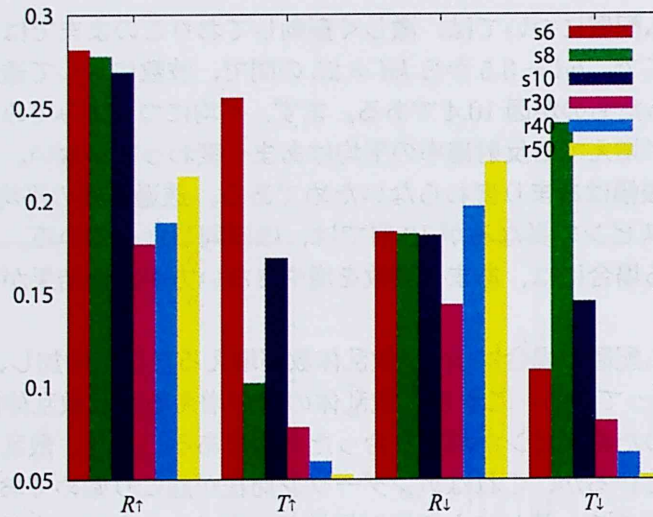


図 10.4: 図 10.2 に対する標準偏差

の層数を増やした場合と、散乱体領域の長さを固定したままで格子間隔を小さくした場合とを比較する。その後、散乱体がポテンシャルの場合と、磁化との場合を比較する。

まず、最初に散乱体がポテンシャルである場合の解析を行う。ポテンシャルがある場合の無次元化した Schrödinger 方程式は

$$-\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = ((kd)^2 - V(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) \quad (10.2.1)$$

である。点状の散乱体を想定し、8.2 節と同様の近似を行えば、この場合の境界積分方程式は

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) = & \oint [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{n} dS' \\ & + \sum_n G'(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) V(\mathbf{R}_n) a^2 \psi(\mathbf{R}_n) \end{aligned} \quad (10.2.2)$$

となる。

この境界積分方程式を用いて、図 10.5 のような三角格子状配置の解析を行う。ここでも、左のリード線よりアップスピン、基本モードで電子波を入射させるものとする。

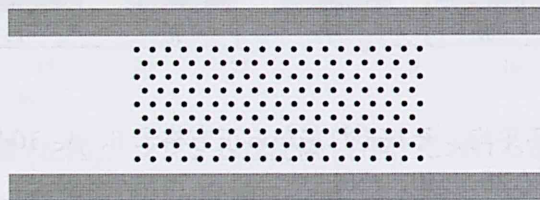


図 10.5: 三角格子状配置、横方向に 8 層、縦方向に 35 層、散乱体領域の長さ  $\frac{7.2}{\sqrt{3}}d$

最初にポテンシャル  $Va^2 = 4.0$ 、半径  $a = 0.01d$  の散乱体を三角格子状に配置し、縦方向の層数を増加させたときの比較を行う。

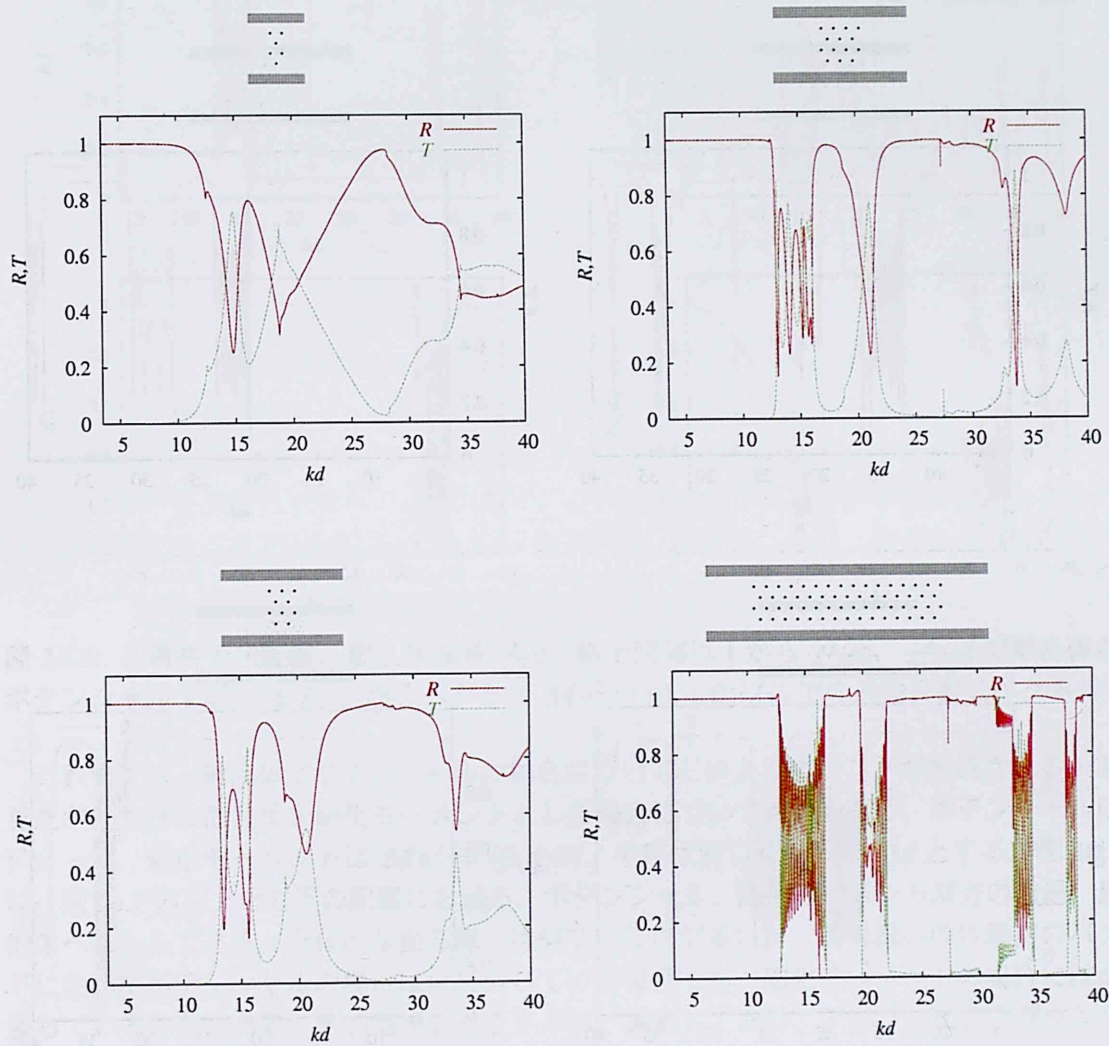


図 10.6: 三角格子状配置、横方向に3層、縦方向に1層(左上)、3層(左下)、5層(右上)、29層(右下)での透過反射スペクトル

図 10.6 は、縦方向に 1,3,5,29 層と増加させた場合での透過、反射スペクトルである。スペクトルの上の図が、それぞれの配置を表す。まず、全ての場合についていえるのは、波長が格子間隔と比べて十分に小さい場合には、散乱体領域を通り抜けることが出来ず、ほぼ全て反射する。格子間隔は  $l = \frac{2}{5\sqrt{3}}d$  であり、 $\frac{2\pi}{2l} \approx 13.6$  であるので、波数が 13.6 あたりまではどの場合も反射となる。その後、1 層の場合には共鳴ピークが一つ現れ、それがその格子間隔での基本モードに対応する。3 層、5 層と増えるにつれその共鳴ピークの数が増えていき、最終的に 29 層ではピークである 1 とピークでない 0 のみ存在し、それがバンドを形成する。

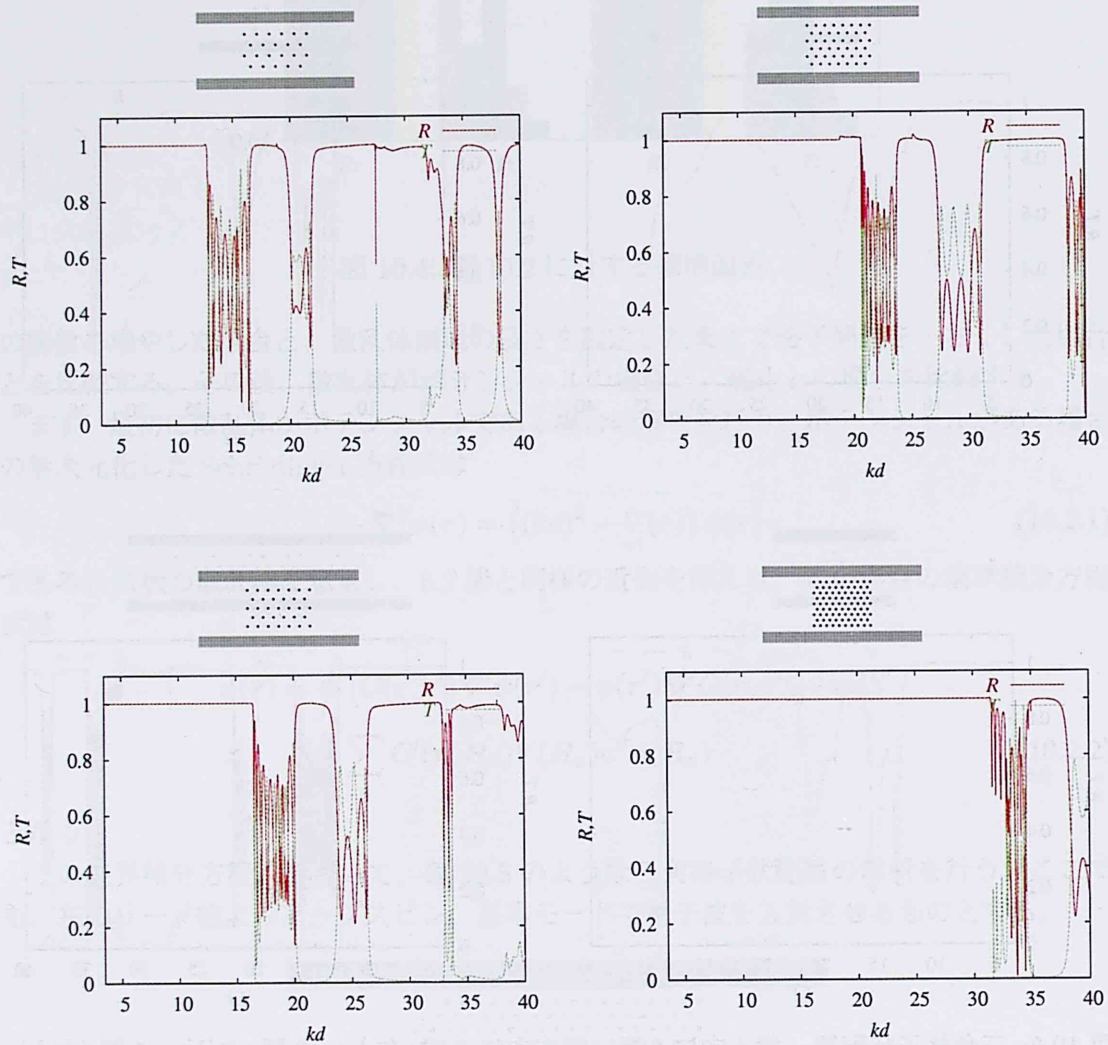


図 10.7: 三角格子状配置、散乱体領域  $\frac{2}{\sqrt{3}}d$ 、格子間隔  $\frac{2}{5\sqrt{3}}d$ (左上)、 $\frac{2}{6\sqrt{3}}d$ (左下)、 $\frac{2}{7\sqrt{3}}d$ (右上)、 $\frac{2}{10\sqrt{3}}d$ (右下) での透過反射スペクトル

次に、散乱領域の長さはそのままで、格子間隔を変えた場合についてみる。パラメータは先ほどと同じ  $Va^2 = 4$ 、 $a = 0.01d$  である。図 10.7 が、格子間隔  $l$  を  $\frac{2}{5\sqrt{3}}d$  から、 $\frac{2}{10\sqrt{3}}d$  まで変えたときの透過、反射スペクトルである。これをみると、格子間隔が変わっても、バンド構造はそのまま波数に対してシフトしていく様子が分かる。最初のバンド

は先ほどと同様に考えると、 $\frac{2\pi}{a} \approx 13.6, 16.3, 19.0, 27.2$  までとなるが、 $l = \frac{2}{7\sqrt{3}}d, \frac{2}{10\sqrt{3}}d$  の場合は、若干ずれている。これは、ポテンシャルは一定であるのに対して、層数が増加するとバンドが始まる波数が大きくなるため、ポテンシャルに対してエネルギーが大きくなり透過しやすくなるためであると考えられる。

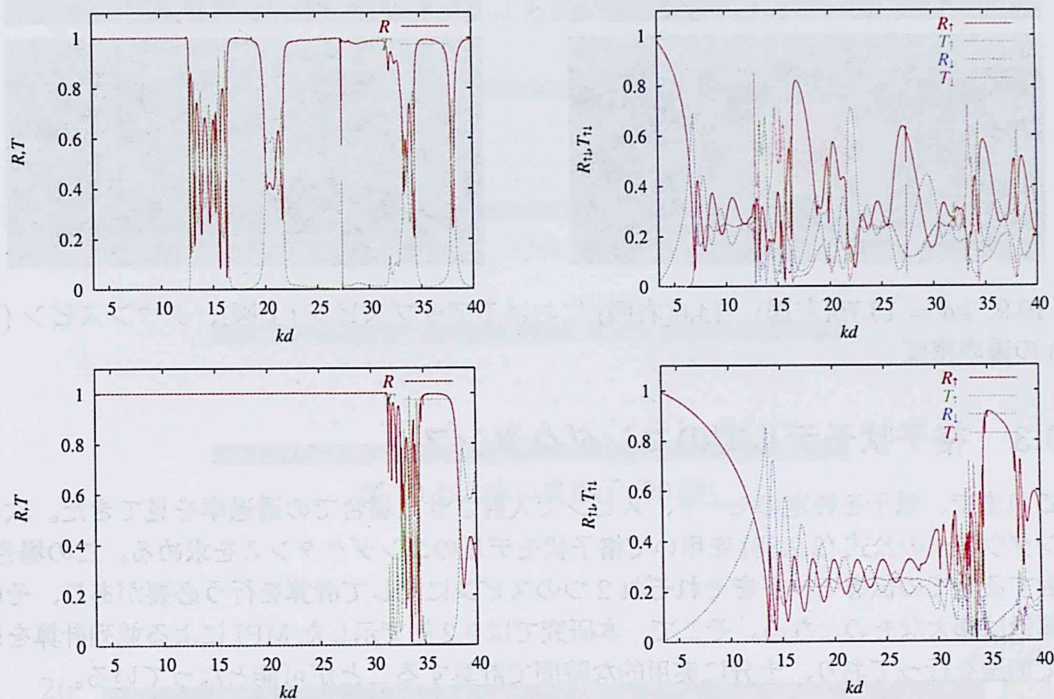


図 10.8: 三角格子状配置、散乱体領域  $\frac{2}{\sqrt{3}}d$ 、格子間隔は上から  $\frac{2}{5\sqrt{3}}d, \frac{2}{10\sqrt{3}}d$  で散乱体がポテンシャル  $Va^2 = 4$ (左)、磁化ベクトル  $Ma^2 = (0, 4, 0)$ (右) での透過反射スペクトル

これまでの、散乱体がポテンシャルの場合についてどのようにバンドが形成されるかを見たが、つぎに散乱体を磁化モーメントとした場合について比較を行う。ポテンシャルは  $Va^2 = 4$ 、磁化モーメントは  $Ma^2 = (0, 4, 0)$ 、半径は同じく  $a = 0.01d$  とする。図 10.8 は、図 10.7 の左上と右下の配置における、ポテンシャル、磁化モーメント双方の透過、反射スペクトルである。全体的な振る舞いは似ている点が多いが、興味深いのは最初のバンドにおいてポテンシャルの場合は全反射している場合でも、磁化モーメントの場合には透過していることである。その透過スペクトルは、振動しており、アップスピンとダウンスピンでの透過確率が等しくなっている。

そこで、この時の挙動を見るため、図 10.9 に最初のピーク  $kd = 13.75$ 、次のピーク  $kd = 14.6$  での確率密度を示す。これを見ると、最初のピークは散乱体領域全体の基本モード、次のピークは 2 番目のモードに対応しており、それによって磁性散乱体間に長く滞在し、スピンの完全に混じり合った状態で透過したものと考えられる。

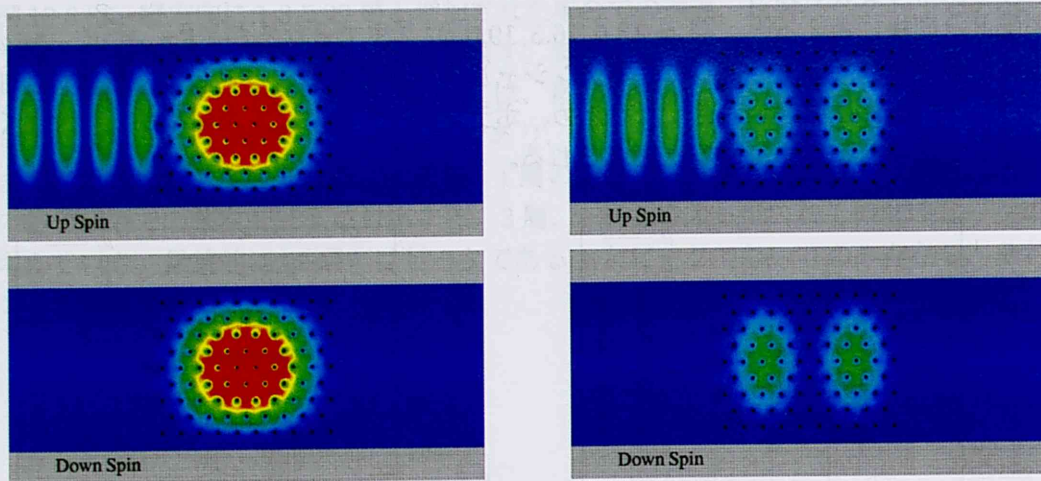


図 10.9:  $kd = 13.75$ (左図)、 $14.6$ (右図)におけるアップスピン(上図)、ダウンスピン(下図)の確率密度

### 10.3 格子状モデルでのコンダクタンス

これまで、電子を特定のモード、スピンドで入射させた場合での透過率を見てきた。次にランダウアーの公式(2.2.38)を用いて格子状モデルのコンダクタンスを求める。この場合、入射する全ての伝導モードをそれぞれ2つのスピンに関して計算を行う必要があり、その計算量は膨大なものとなる。そこで、本研究では9.2節で示したMPIによる並列計算を用いて加速を行っており、十分に実用的な時間で計算することが可能となっている。

#### 10.3.1 コンダクタンスにおけるバンドの形成

10.2節では、点状の散乱体を格子状に配置することにより、それぞれの入射モードに関して透過スペクトルにバンドが形成されることを見た。つぎに全ての入射モードについて計算を行い、ランダウアーの公式よりコンダクタンスを求める。

ポテンシャルの散乱体を想定し、(10.2.2)式を用いて境界要素法を適用する。また、パラメータは  $Va^2 = 4$ 、半径  $a = 0.01d$  とする。この散乱体を、次の3種類の格子状に配置する。

これらの格子における散乱体の間隔は、量子細線の幅方向に5分割した縦方向に平行な線上に散乱体を配置し、縦方向に層数を増やしていくものとする。図10.10、10.11、10.12は縦方向に20層配置した場合を示してある。

図10.13、10.14、10.15はそれぞれの格子状配置の層数を1から20層まで増加させたときのコンダクタンスである。このように、格子状に散乱体を配置することにより、コンダクタンスにもバンド構造が現れ、それは層数が増えるにつれてはっきりと形成されていく。また、層数が増えると伝導バンドの振動がより細くなるが、それは層数が増えることによって可能な共鳴モードの数が増えるためであり、その共鳴ピークが伝導バンドを形成していく。一方、バンドの数が最も多いのは蜂の巣格子で、つぎに三角格子、最も少ないのが正方格子となっている。これは、正方格子の場合は縦と横方向の2種類の方向のみに共

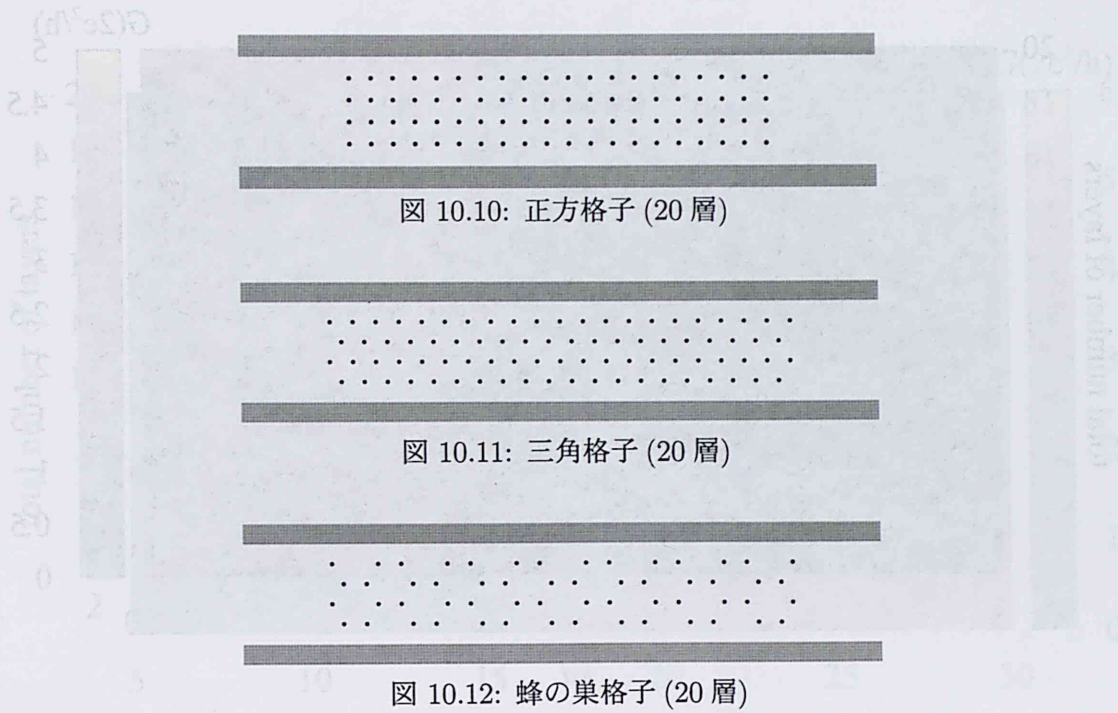


図 10.10: 正方格子 (20 層)

図 10.11: 三角格子 (20 層)

図 10.12: 蜂の巣格子 (20 層)

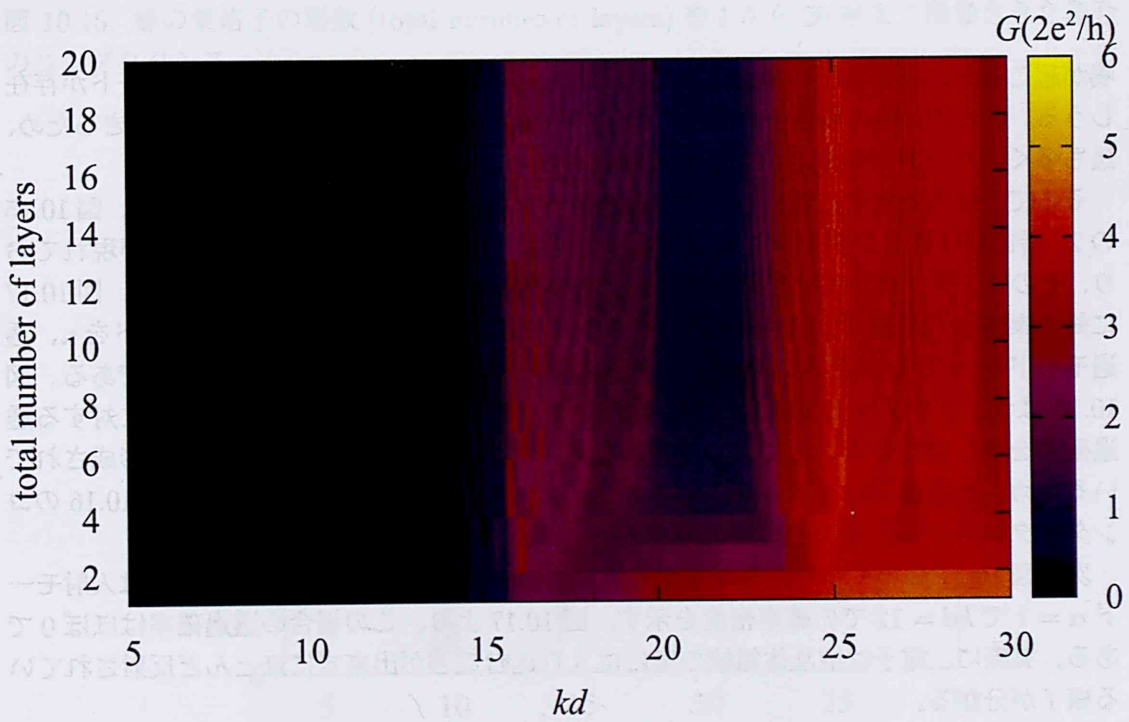


図 10.13: 正方格子の層数 (total number of layers) を 1 から 20 層まで増加させた場合のコンダクタンス

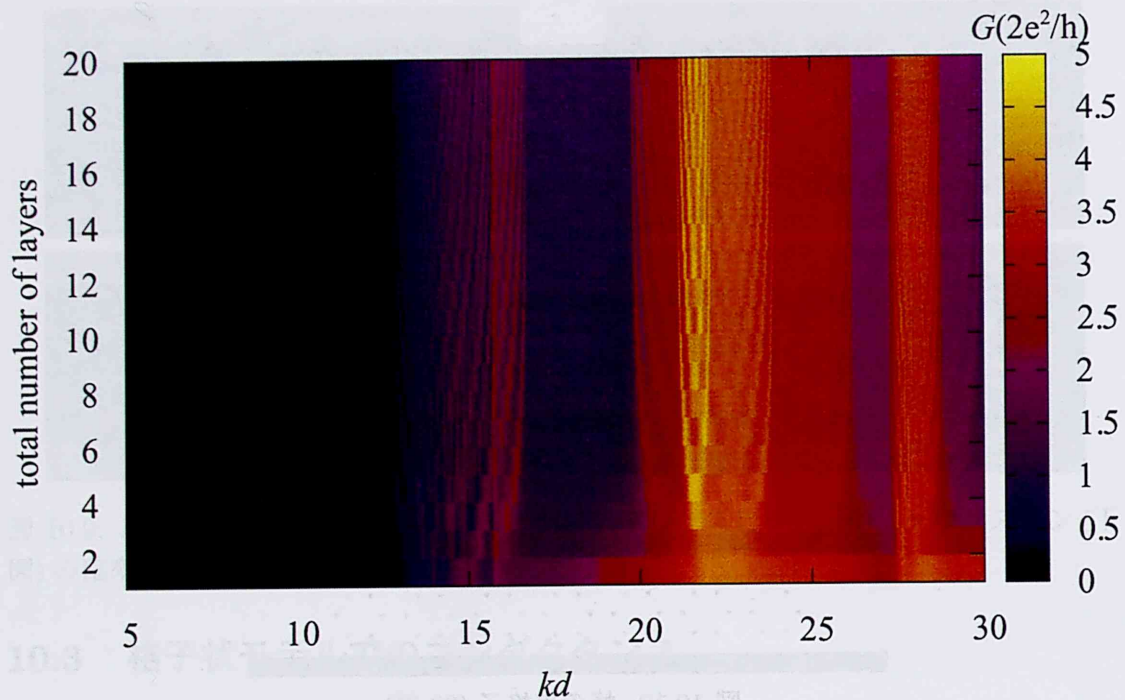


図 10.14: 三角格子の層数 (total number of layers) を 1 から 20 層まで増加させた場合のコンダクタンス

鳴が起こるが、三角格子の場合にはそれぞれの辺の法線方向に 3 種類の共鳴モードが存在しうる。さらに、蜂の巣格子の場合には辺の法線方向に 4 種類の方向に共鳴が起きるため、最も多くのバンドが形成されたものと考えられる。

そこで、蜂の巣格子に着目し、その透過スペクトルの解析を行う。図 10.16 は、図 10.15 の 20 層におけるコンダクタンスである。このように、はっきりとバンド構造が現れており、そのコンダクタンスはだいたい  $2e^2/h$  の整数倍となる。このことを見るため、図 10.17 に蜂の巣格子 (20 層) における透過スペクトルを示す。ここで  $T_n$  は、入射モードを  $n$ 、透過モードを  $m$  としたときの入射モード  $n$  に対する透過確率  $T_n = \sum_m T_{nm}$  である。図 10.16 はランダウアーの公式 (2.2.38) を用いて、図 10.17 の全ての入射モードに対する透過確率を足し合わせることによって得られる。さらに、図 10.17 ではバンドが形成されているため、透過確率はほぼ 0 か 1 のみとる。よって、それらを足し合わせた図 10.16 のコンダクタンスは  $2e^2/h$  の整数倍のみをとる。

次に図 10.17 のいくつかの興味を引く点における確率密度を示す。図 10.18 は入射モード  $\alpha = 1$  で  $kd = 12$  での確率密度を示す。図 10.17 より、この場合の透過確率はほぼ 0 である。実際に、電子は散乱体領域の奥には入り込むことが出来ずにほとんど反射されている様子が分かる。

次に、入射モード  $\alpha = 1$  で  $kd = 16.5$  での確率密度である図 10.19 について見てみる。この場合は、図 10.17 より伝導バンドにおける 1 つの共鳴ピークで、その透過確率はほぼ 1 である。格子状配置によって、強く共鳴を起こしておりそれによる共鳴であることが分



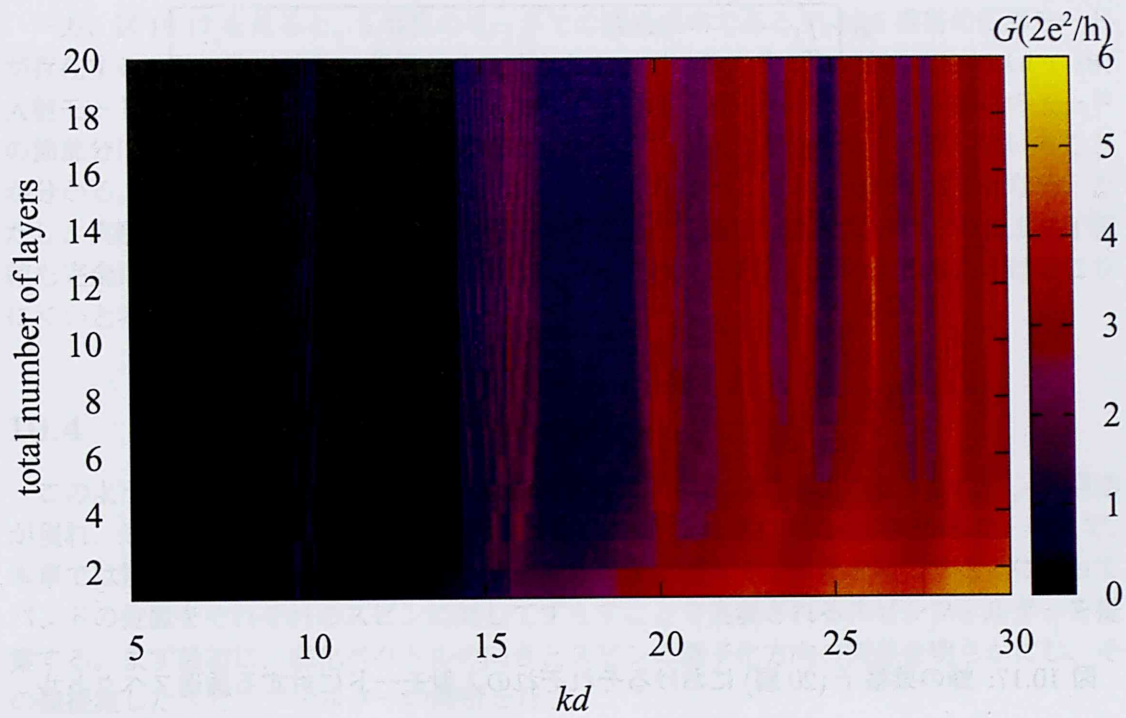


図 10.15: 蜂の巣格子の層数 (total number of layers) を 1 から 20 層まで増加させた場合のコンダクタンス

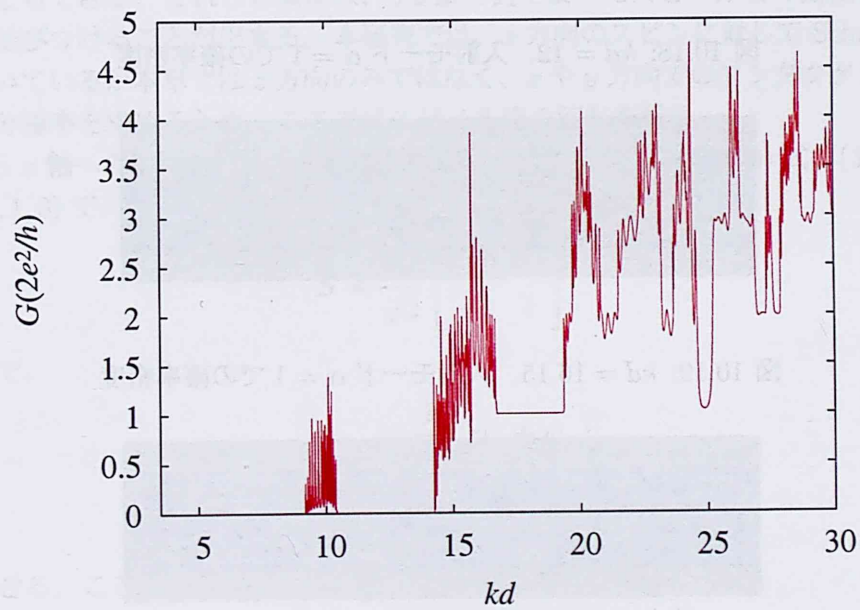


図 10.16: 蜂の巣格子 (20 層) におけるコンダクタンス

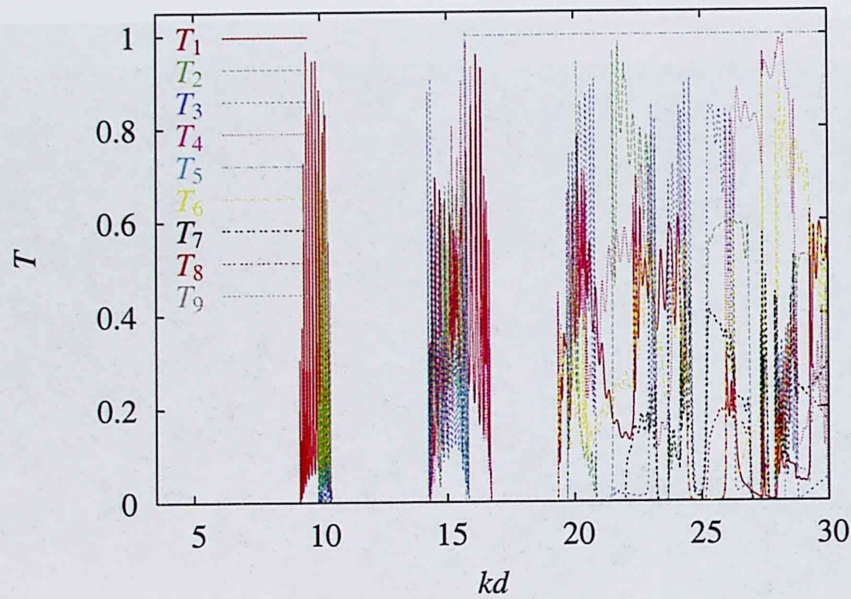


図 10.17: 蜂の巣格子 (20 層) におけるそれぞれの入射モードに対する透過スペクトル



図 10.18:  $kd = 12$ 、入射モード  $\alpha = 1$  での確率密度

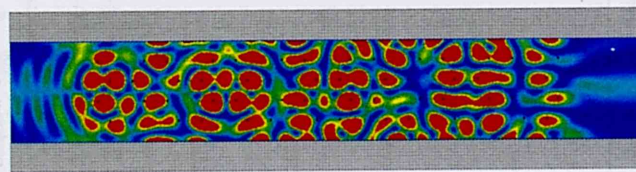


図 10.19:  $kd = 16.15$ 、入射モード  $\alpha = 1$  での確率密度



図 10.20:  $kd = 18$ 、入射モード  $\alpha = 5$  での確率密度

かる。

一方、図 10.17 を見ると、5 番目のモードでの透過確率である  $T_5$  は 5 番目の伝導モードが存在する波数以降は波数に関係なくほぼ 1 となっている。そこで、図 10.20 に  $kd = 18$ 、入射モード  $\alpha = 5$  での確率密度を示す。これを見ると、明らかに散乱体が 5 番目のモードの節部分に存在しており、そのため電子は散乱体を全く感じることなく伝導していることが分かる。これによって、波数と関わりなく 5 番目のモードでの透過確率は 1 となる。ただし、実験ではここまで正確に散乱体を配置することは難しいと考えられ、その上量子細線も完全に井戸型であるということはまず無いと思われるので、このようなことは起こりにくいと考えられる。

## 10.4 点状磁性散乱体の格子状配置

このように、点状の散乱体を格子状に配置することにより透過スペクトルにバンド構造が現れ、それがコンダクタンスにも反映されバンドが形成されることが分かった。そこで、本章では散乱体に磁性的な性質を持たせ、磁化によるゼーマン分離を起こすことによってバンドの位置をそれぞれのスピンに対してずらすことで実現されるスピフィルターを提案する。まず最初に、磁化ベクトルの向きとスピンの量子化方向の関係を明らかにし、その後提案したスピフィルターの解析を行う。

### 10.4.1 スピンの観測方向の回転

8 章では、 $z$  方向に  $\pm\hbar/2$  の固有値をとる場合のスピンをアップスピン、ダウンスピンとし透過確率やそのスピン分極率を求めた。しかし、実際には  $x$  や  $y$  方向に  $\pm\hbar/2$  の固有値をとることもできる。これらの関係は、3.2 節で見たようにスピノル場の回転を行うことによって結びつけることが出来る。本研究では、 $z$  方向のスピンに対して Schrödinger 方程式を解いているが本章では  $z$  方向のみではなく、 $x$  や  $y$  方向でのコンダクタンスに対するスピン分極率を求めるため、ここではスピノル場の回転を行う。

$z$  軸から  $x$  軸への回転は、 $y$  軸周りに  $\pi/2$  回転させればよい。(3.2.9) 式、(3.2.20) 式より  $e = (0, 1, 0)$  で、 $\theta = \pi/2$  なので、

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (10.4.1)$$

となるので、

$$\begin{aligned} \psi_{+x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_+ + \psi_-) \\ \psi_{-x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-\psi_+ + \psi_-) \end{aligned} \quad (10.4.2)$$

と変換できる。ここで、 $+$  はアップスピン、 $-$  はダウンスピンとする。

同様に  $z$  軸から  $y$  軸への回転は、 $e = (1, 0, 0)$ 、 $\theta = -\pi/2$  より

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \quad (10.4.3)$$

となり、

$$\begin{aligned}\psi_{+y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ - i\psi_-) \\ \psi_{-y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-i\psi_+ + \psi_-)\end{aligned}\quad (10.4.4)$$

と変換すればよい。

これまで、 $z$  方向のスピんで入射し、 $z$  方向のスピんで反射、透過する場合の解析を行ってきた。その場合の反射透過確率は

$$\begin{aligned}R_{\alpha,\beta,\pm z,\pm z'} &= \frac{k_\beta}{k_\alpha} |r_{\alpha,\beta,\pm,\pm'}|^2 \\ T_{\alpha,\gamma,\pm z,\pm z'} &= \frac{k_\gamma}{k_\alpha} |t_{\alpha,\gamma,\pm,\pm'}|^2\end{aligned}\quad (10.4.5)$$

であった。ここで、 $R_{\alpha,\beta,\pm z,\pm z'}$ 、 $T_{\alpha,\gamma,\pm z,\pm z'}$  は  $\alpha$  モード、スピン  $\pm z$  で入射した電子がスピン  $\pm z'$ 、 $\beta$  モードで反射、 $\gamma$  モードで透過する場合の確率を表す。

よって、 $z$  方向のスピんで入射し  $x$ 、 $y$  方向のスピんでの透過、反射振幅は、

$$\begin{aligned}r_{\alpha,\beta,\pm,+x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(r_{\alpha,\beta,\pm,+'} + r_{\alpha,\beta,\pm,-'}) & r_{\alpha,\beta,\pm,-x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-r_{\alpha,\beta,\pm,+'} + r_{\alpha,\beta,\pm,-'}) \\ t_{\alpha,\gamma,\pm,+x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(t_{\alpha,\gamma,\pm,+'} + t_{\alpha,\gamma,\pm,-'}) & t_{\alpha,\gamma,\pm,-x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-t_{\alpha,\gamma,\pm,+'} + t_{\alpha,\gamma,\pm,-'}) \\ r_{\alpha,\beta,\pm,+y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(r_{\alpha,\beta,\pm,+'} - ir_{\alpha,\beta,\pm,-'}) & r_{\alpha,\beta,\pm,-y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-ir_{\alpha,\beta,\pm,+'} + r_{\alpha,\beta,\pm,-'}) \\ t_{\alpha,\gamma,\pm,+y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(t_{\alpha,\gamma,\pm,+'} - it_{\alpha,\gamma,\pm,-'}) & t_{\alpha,\gamma,\pm,-y} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-it_{\alpha,\gamma,\pm,+'} + t_{\alpha,\gamma,\pm,-'})\end{aligned}\quad (10.4.6)$$

と変換できる。

さらに、 $z$  方向のスピんで入射したときの  $x$ 、 $y$  方向スピンに対するコンダクタンスはランダウアーの公式により

$$G_{\uparrow\downarrow z, \uparrow\downarrow x, y} = \frac{2e^2}{h} \sum_{\alpha, \gamma} \frac{k_\gamma}{k_\alpha} |t_{\alpha, \gamma, \pm, \pm_{x, y}}|^2 \quad (10.4.7)$$

と表される。

#### 10.4.2 $M_x$ または $M_y$ のみがある場合

次に磁化ベクトルとスピンの量子化方向との関係を明らかにするため、図 8.10 の配置で、全ての散乱体の磁化ベクトルを  $\mathbf{M} = (0, 4, 0)$  としたときの 1 層配置での各方向のコンダクタンスを図 10.21 に示す。

ここで、 $G$  は散乱体として磁化ではなく同じ大きさ、つまり  $V = 4$  のポテンシャルを配置した場合のコンダクタンスである。また、 $G_{\uparrow\downarrow x, y, z}$  は

$$\begin{aligned}G_{\uparrow x, y, z} &= G_{\uparrow z, \uparrow x, y, z} + G_{\downarrow z, \uparrow x, y, z} \\ G_{\downarrow x, y, z} &= G_{\uparrow z, \downarrow x, y, z} + G_{\downarrow z, \downarrow x, y, z}\end{aligned}\quad (10.4.8)$$

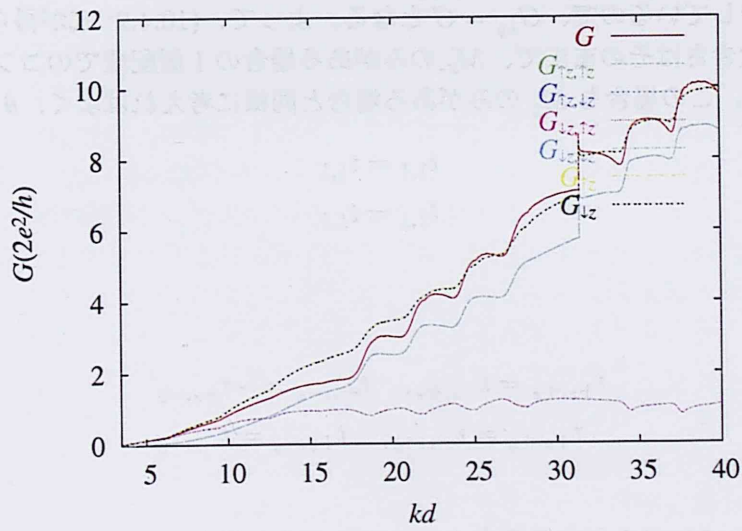
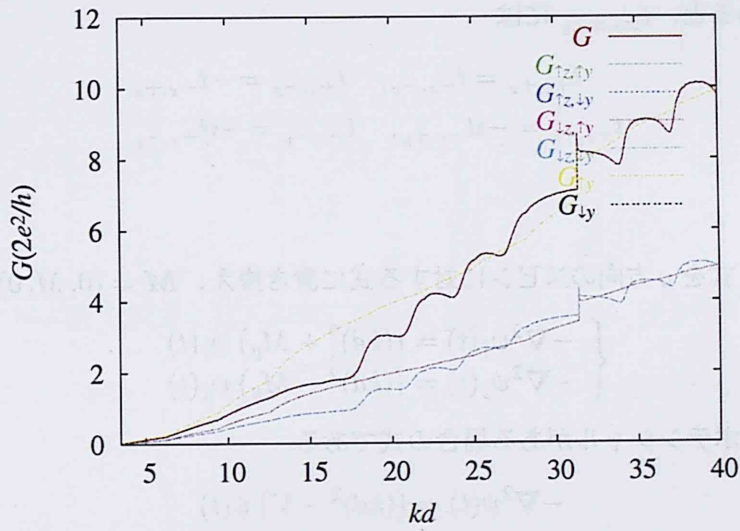
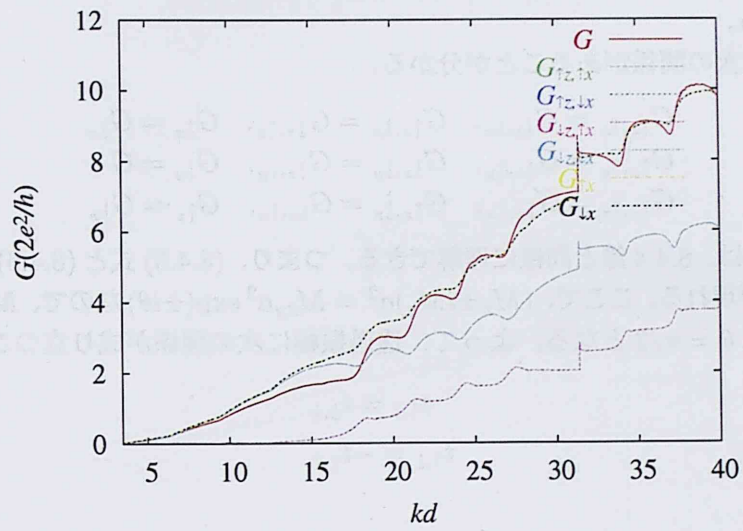


図 10.21: 1層配置、 $M = (0, 4, 0)$  での各方向のスピンの対するコンダクタンス

と定義した。これは分極していない電子を入射させたときのそれぞれのスピンのコンダクタンスである。

図 10.21 には次の関係があることが分かる。

$$\begin{aligned} G_{\uparrow z, \uparrow x} &= G_{\downarrow z, \downarrow x}, & G_{\uparrow z, \downarrow x} &= G_{\downarrow z, \uparrow x}, & G_{\uparrow x} &= G_{\downarrow x} \\ G_{\uparrow z, \uparrow y} &= G_{\downarrow z, \uparrow y}, & G_{\downarrow z, \downarrow y} &= G_{\uparrow z, \downarrow y}, & G_{\downarrow y} &= G \\ G_{\uparrow z, \uparrow z} &= G_{\downarrow z, \downarrow z}, & G_{\uparrow z, \downarrow z} &= G_{\downarrow z, \uparrow z}, & G_{\uparrow z} &= G_{\downarrow z} \end{aligned} \quad (10.4.9)$$

これらの関係は、8.4.4 節と同様に理解できる。つまり、(8.4.5) 式と (8.4.6) 式より振幅には  $2\theta$  の位相差が現れる。ここで、 $(M_x \pm iM_y)a^2 = M_{xy}a^2 \exp(\pm i\theta)$  なので、 $\mathbf{M} = (0, M_y, 0)$  の場合の位相は  $\theta = \pi/2$  となる。よって、透過振幅に次の関係が成り立つことになる。

$$\begin{aligned} t_{\uparrow, \uparrow} &= t_{\downarrow, \downarrow} \\ t_{\uparrow, \downarrow} &= -t_{\downarrow, \uparrow} \end{aligned} \quad (10.4.10)$$

この関係を用いると、 $t_{\pm z, \pm x, y}$  には

$$\begin{aligned} t_{+z, +x} &= t_{-z, -x}, & t_{+z, -x} &= -t_{-z, +x} \\ t_{+z, +y} &= -it_{-z, +y}, & t_{-z, -y} &= -it_{+z, -y} \end{aligned} \quad (10.4.11)$$

が成り立つ。

また、(8.1.1) 式を  $y$  方向のスピンの式に置き換え、 $\mathbf{M} = (0, M, 0)$  を代入すれば

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_{\uparrow}(t) = ((kd)^2 + M_y) \psi_{\uparrow}(t) \\ -\nabla^2 \psi_{\downarrow}(t) = ((kd)^2 - M_y) \psi_{\downarrow}(t) \end{cases} \quad (10.4.12)$$

となる。これはポテンシャルがある場合の式である

$$-\nabla^2 \psi(t) = ((kd)^2 - V) \psi(t) \quad (10.4.13)$$

と全く同じ形をしているので、 $G_{\downarrow y} = G$  となる。よって、(10.4.9) 式が得られる。

次に磁化の大きさはそのまま、 $M_x$  のみがある場合の 1 層配置でのコンダクタンスを図 10.22 に示す。この場合も  $M_y$  のみがある場合と同様に考えればよく、 $\theta = 0$  なので

$$\begin{aligned} t_{\uparrow, \uparrow} &= t_{\downarrow, \downarrow} \\ t_{\uparrow, \downarrow} &= t_{\downarrow, \uparrow} \end{aligned} \quad (10.4.14)$$

が成り立ち、

$$\begin{aligned} t_{+z, +x} &= t_{-z, +x}, & t_{-z, -x} &= -t_{+z, -x} \\ t_{+z, +y} &= t_{-z, -y}, & t_{+z, -y} &= t_{-z, +y} \end{aligned} \quad (10.4.15)$$

となる。つまり、 $M_y$  のみがある場合と  $M_x$  のみがある場合のコンダクタンスの  $G_x$ 、 $G_y$  を入れ替えたものが等しくなる。

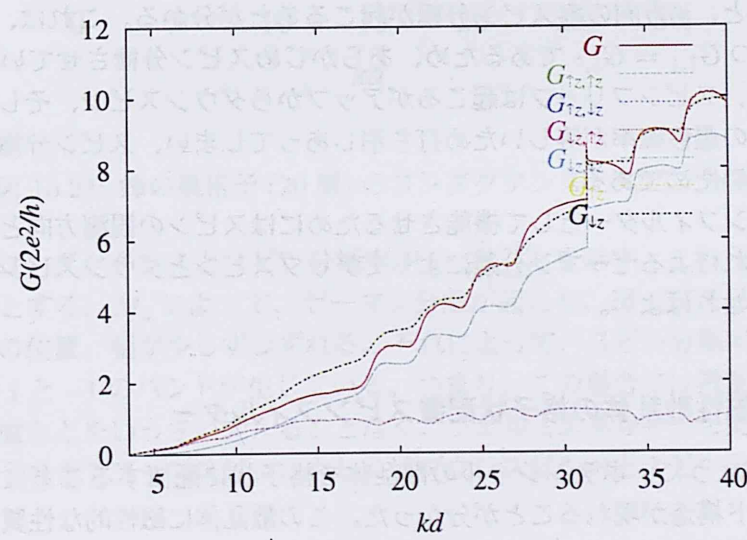
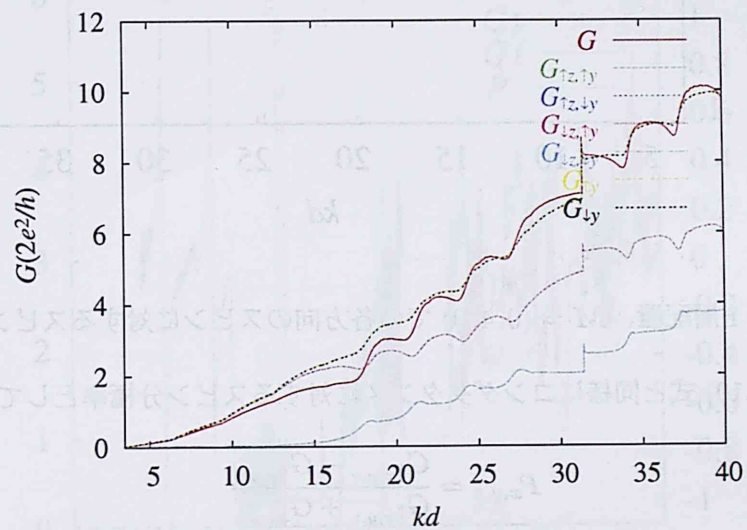
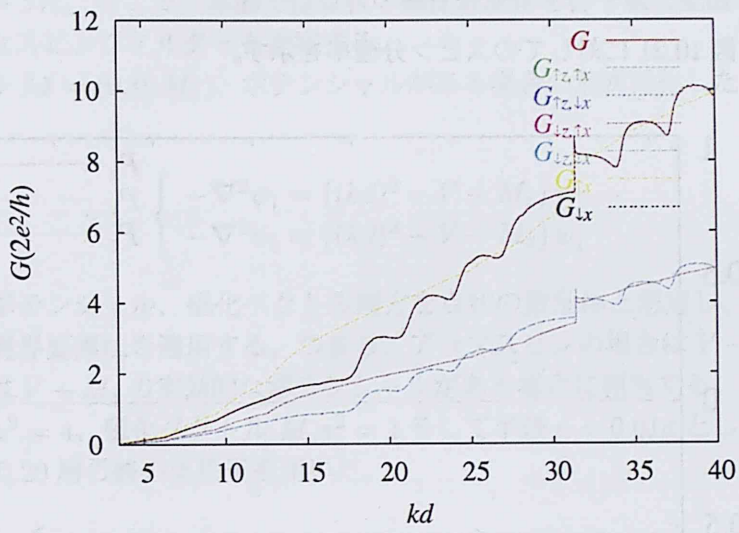


図 10.22: 1層配置、 $M = (4, 0, 0)$  での各方向のスピンの対するコンダクタンス

### 10.4.3 コンダクタンスのスピンの分極率

図 10.23 に、図 10.21 に対してのスピンの分極率を示す。

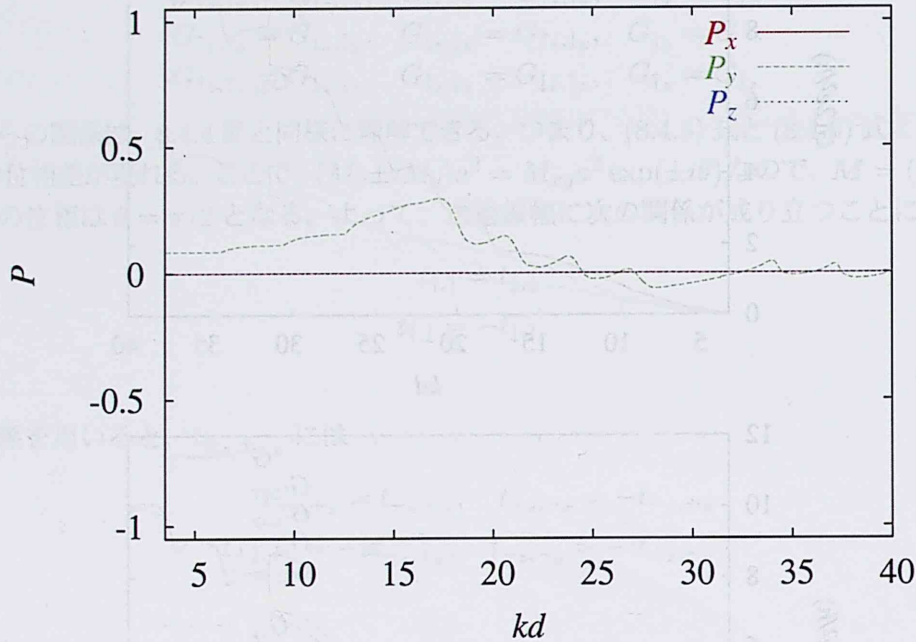


図 10.23: 1層配置、 $M = (0, 4, 0)$  での各方向のスピンの分極率

ここで、(3.5.10) 式と同様にコンダクタンスに対するスピンの分極率として以下のように定義した。

$$P_{x,y,z} = \frac{G_{\uparrow x,y,z} - G_{\downarrow x,y,z}}{G_{\uparrow x,y,z} + G_{\downarrow x,y,z}} \quad (10.4.16)$$

図 10.23 を見ると、 $y$  方向のみスピンの分極が起こることが分かる。これは、 $y$  方向以外は  $G_{\uparrow, \uparrow} = G_{\downarrow, \downarrow}$  かつ  $G_{\uparrow, \downarrow} = G_{\downarrow, \uparrow}$  であるため、あらかじめスピンの分極させていない電子を入射した場合には、スピンのフリップは起こるがアップからダウンスピンの遷移と、そしてダウンからアップスピンの遷移の確率が等しいため打ち消しあってしまう、スピンの分極した電子を得ることは出来ないためである。

つまり、スピンのフィルターとして機能させるためにはスピンの観測方向と同じ向きの磁化を導入し、それによるゼーマン分離によってアップスピンとダウンスピンのコンダクタンスを分離させればよい。

### 10.4.4 点状磁性散乱体の格子状配置スピンのフィルター

10.3 節で見たように、ポテンシャルの散乱体を格子状に配置することによってコンダクタンスにバンド構造が現れることが分かった。この散乱体に磁性的な性質を持たせることによって、伝導電子のスピンの縮退が解けスピンの依存した伝導が期待される。さらに、10.4.3 より磁化ベクトルを導入すれば、磁化によるゼーマン分離によってスピンの分極が起



ることが分かった。そこで、本節では点状の磁性散乱体を格子状に配置した場合の解析を行い、新たなスピフィルターを提案する。

磁化ベクトル  $M = (0, 0, M_z)$ 、ポテンシャルがある場合の無次元化した Schrödinger 方程式は

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_{\uparrow} = ((kd)^2 - V + M_z) \psi_{\uparrow} \\ -\nabla^2 \psi_{\downarrow} = ((kd)^2 - V - M_z) \psi_{\downarrow} \end{cases} \quad (10.4.17)$$

である。このポテンシャル、磁化ベクトル両方を点状の散乱体と想定し、8.2節を同様の近似を行い、境界要素法を適用する。つまり、アップスピンの場合は  $V - M_z$ 、ダウンスピンの場合には  $V + M_z$  の実効的なポテンシャルがある場合に相当する。パラメータはポテンシャル  $Va^2 = 4$ 、磁化ベクトル  $M_z a^2 = 1$  そして半径  $a = 0.01d$  とした。散乱体の配置は図 10.12 の 20 層の蜂の巣格子を用いた。

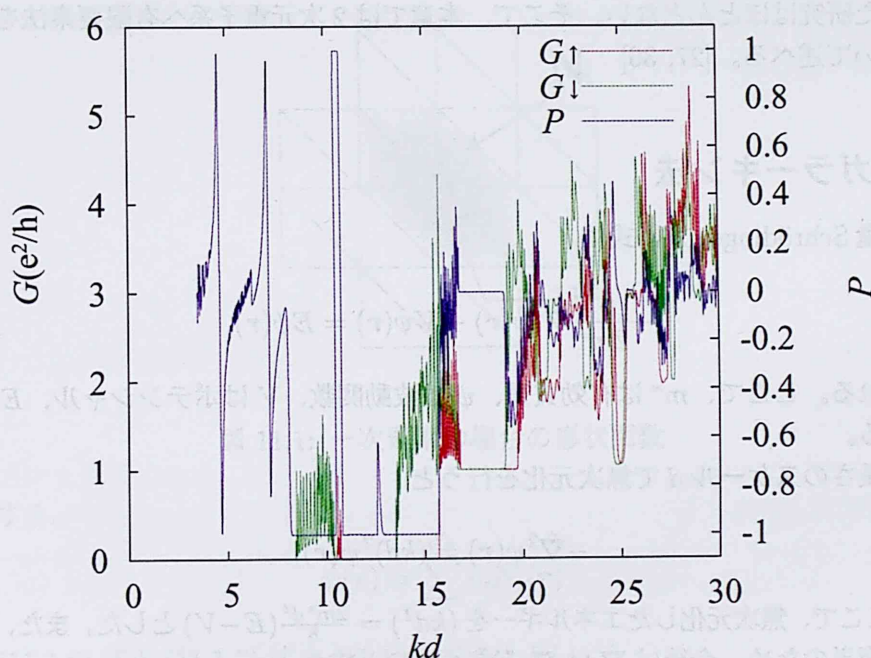


図 10.24: 蜂の巣格子 (20 層) のコンダクタンスとスピ分極率

図 10.24 にコンダクタンスとスピ分極率  $P = \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}}$  を示す。これらのスピンの観測方向は  $z$  方向とする。  $M_z$  によって、ゼーマン分離が起こり、アップスピンとダウンスピンとでバンドの位置、幅が少しずつずれる。それによって、スピ分極率にもバンド構造が現れ、  $P$  が 1 と  $-1$  のバンドが生じている。つまり、この場合には散乱体の磁化ベクトルの向きや配置などをいっさい変えることなく、フェルミエネルギーを変えるだけで分極していない電子を全てアップスピン、もしくはダウンスピンへとスピ分極させることが出来る。

## 第11章 有限要素法

これまで、境界要素法により2次元電子系に散乱体や、磁化モーメントがある場合の解析を行った。境界要素法は、境界上の離散化のみでよいので大規模、高エネルギー計算に有効である。しかし、適用するためには系のグリーン関数が必要となる。そこで、この章では有限要素法を2次元電子系に適用し、解析を行う。有限要素法はほとんどの偏微分方程式に適用することができ、構造力学や熱伝導問題、電磁気学など工学分野では広い範囲で用いられている。しかしながら、これまで2次元電子系、特にリード線を考慮した計算を行った研究はほとんどない。そこで、本章では2次元電子系へ有限要素法を適用する手法について述べる。[27, 36]

### 11.1 ガラーキン法

有効質量 Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (11.1.1)$$

で与えられる。ここで、 $m^*$  は有効質量、 $\psi$  は波動関数、 $V$  はポテンシャル、 $E$  はエネルギーである。

上式に長さのスケール  $d$  で無次元化を行うと

$$-\hat{\nabla}^2\psi(\mathbf{r}) = (kd)^2\psi(\mathbf{r}), \quad (11.1.2)$$

となる。ここで、無次元化したエネルギーを  $(kd)^2 = \frac{2m^*d^2}{\hbar^2}(E-V)$  とした。また、 $\hat{\nabla} = d\nabla$  である。簡単のため、今後は  $\hat{\nabla}$  は  $\nabla$  と書くものとする。

(11.1.2) 式に、試行関数  $\bar{\psi}$  を乗じて、系全体の領域  $\Omega$  で積分する。試行関数  $\bar{\psi}$  は、波動関数と同じ境界条件を満たす任意の関数とする。

$$\begin{aligned} & -\int_{\Omega} \bar{\psi} \nabla^2 \psi d\Omega - \int_{\Omega} (kd)^2 \bar{\psi} \psi d\Omega = 0 \\ & -\int_{\Omega} (\nabla(\bar{\psi} \nabla \psi) - \nabla \bar{\psi} \nabla \psi) d\Omega - \int_{\Omega} (kd)^2 \bar{\psi} \psi d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (11.1.3)$$

であるから、ガウスの定理を適用すれば、

$$\int_{\Omega} \nabla \bar{\psi} \cdot \nabla \psi - (kd)^2 \bar{\psi} \psi d\Omega = \int_{\Gamma} \bar{\psi} \nabla \psi d\Gamma, \quad (11.1.4)$$

となり、(11.1.2) 式の弱形式を得る。ここで、 $\Gamma$  は  $\Omega$  の境界である。

つぎに、数値計算を行うにあたり波動関数  $\psi$  を離散化する。領域を  $N_e$  個の要素に分割し、それぞれに節点を割り当てる。節点は領域全体で  $N_p$  個あるものとする。節点間を補完する形状関数は一次要素の場合、節点  $i$  を含むある要素  $j$  において

$$N_i(\mathbf{r}) = a_i + b_i x + c_i y \quad (11.1.5)$$

で表せられ、節点間は1次関数で補完される。ただし、形状関数  $N_i(\mathbf{r})$  は要素  $j$  においてのみ値を持ち、他の要素においては0とする。この形状関数を用いて波動関数は次のように近似される。

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \sum_i^{N_p} u_i N_i(\mathbf{r}) \quad (11.1.6)$$

ここで、 $u_i$  は節点  $i$  における波動関数の値  $\psi(\mathbf{r}_i)$  である。(11.1.6) 式を表したのが、図 11.1 で  $u_i$  が形状関数  $N_i$  により線形に補完される。同様に、試行関数も同じ形状関数を基底と

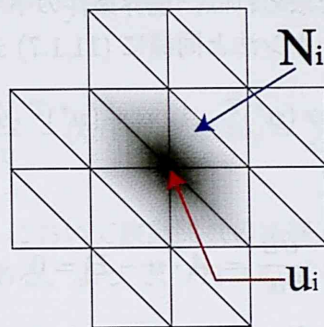


図 11.1: 一次要素の場合の形状関数

して展開する。

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}) \approx \sum_i^{N_p} \bar{u}_i N_i(\mathbf{r}) \quad (11.1.7)$$

次に、(11.1.6) 式と (11.1.7) 式を (11.1.4) 式に代入し、

$$\sum_{i,j} \bar{u}_i \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} - (kd)^2 N_i N_j d\Omega u_j = \sum_i \bar{u}_i \int_{\Gamma} N_i \frac{\partial \psi}{\partial n} d\Gamma, \quad (11.1.8)$$

を得る。ここで、 $\partial\psi/\partial n$  は波動関数  $\psi$  の法線方向の微分である。これは、ベクトルで表すと

$$\bar{\mathbf{u}}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}^T \cdot \mathbf{B} \quad (11.1.9)$$

と表せる。ただし、 $\bar{\mathbf{u}}, \mathbf{u}, \mathbf{B}$  は  $N_p$  個の列ベクトルで、 $\mathbf{A}$  は  $N_p \times N_p$  個の行列である。よって、両辺から  $\bar{\mathbf{u}}$  を消すことが出来て

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{B} \quad (11.1.10)$$

となり、この連立一次方程式を解くことにより節点での波動関数  $u_i$  を求めることが出来る。

## 11.2 変分法との比較

前節ではガラーキン法により、(11.1.2) 式の弱形式 (11.1.4) 式を導出した。本節では、それと変分法との比較を行う。(11.1.2) 式に波動関数の複素共役の変分  $\delta\psi^*$  を乗じて、領域  $\Omega$  で積分する。

$$-\int_{\Omega} \delta\psi^* \nabla^2 \psi d\Omega - \int_{\Omega} (kd)^2 \delta\psi^* \psi d\Omega = 0$$

$$\delta \left( \int_{\Omega} \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - (kd)^2 |\psi|^2 d\Omega - \int_{\Gamma} \psi^* \nabla\psi d\Gamma \right) = 0 \quad (11.2.1)$$

よって、汎関数として

$$L = \int_{\Omega} \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - (kd)^2 |\psi|^2 d\Omega - \int_{\Gamma} \psi^* \nabla\psi d\Gamma, \quad (11.2.2)$$

とおき、 $L$  の  $\psi^*$  に対する停留を求めれば、境界条件の下で (11.1.2) 式を満たす  $\psi$  を求めたことになる。 $\psi$  と  $\psi^*$  をガラーキン法と同様に (11.1.7) 式で展開すれば、(11.2.2) 式は

$$L = (\mathbf{u}^*)^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - (\mathbf{u}^*)^T \cdot \mathbf{B} \quad (11.2.3)$$

となり、 $\mathbf{u}^*$  で両辺を微分すれば、

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}^*} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{B} = 0 \quad (11.2.4)$$

を得る。これは、ガラーキン法の (11.1.10) 式と一致しており、有限要素法におけるガラーキン法は変分法と同一である。

## 11.3 境界条件

図 11.2 に、想定している系を示す。任意形状の系  $\Omega$  の左右にリード線を取り付けた構

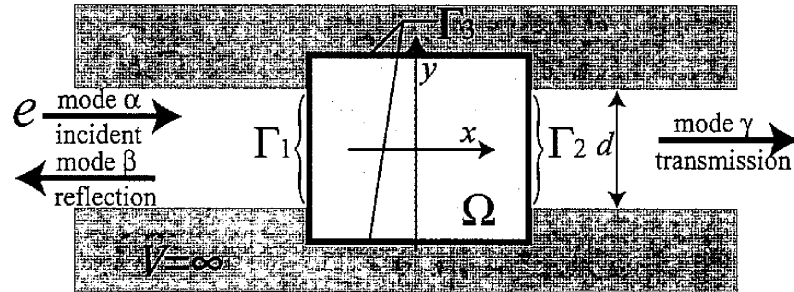


図 11.2: リード線を取り付けた場合の境界条件

造を想定する。電子は、左のリードから  $\alpha$  モードで振幅 1 で、入射するものとする。リー

ド線との接合部分は  $\Gamma_{1,2}$  とし、系と無限に高い障壁との境界は  $\Gamma_3$  とする。よって、境界条件は

$$\Gamma_1 : \psi = \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)e^{ik_\alpha x} + \sum_{\beta} r_{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)e^{-ik_\beta x} \quad (11.3.1)$$

$$\Gamma_2 : \psi = \sum_{\gamma} t_{\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)e^{ik_\gamma x} \quad (11.3.2)$$

$$\Gamma_3 : \psi = 0 \quad (11.3.3)$$

と想定する。ここで、 $\Gamma_{1,2}$  ではリード線の固有関数で展開し、未知変数は透過、反射振幅  $r_{\alpha\beta}$ 、 $t_{\alpha\gamma}$  である。また、 $\Gamma_3$  ではハードウォールを想定しているので波動関数  $\psi$  は 0、未知変数は波動関数の法線方向の微分  $\partial\psi/\partial n$  となる。長さのスケールはリード線の幅  $d$  とした。

$\Gamma_{1,2}$  以外では、波動関数は 0 なので同じ境界条件を満たす試行関数も 0 であり、(11.1.8) 式は

$$\sum_{i,j} \bar{u}_i \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} - (kd)^2 N_i N_j d\Omega u_j = \sum_i \bar{u}_i \sum_n \int_{\Gamma_n} N_i \frac{\partial \psi}{\partial n} d\Gamma, \quad (11.3.4)$$

と書ける。しかしながら、 $\Gamma_{1,2}$  において波動関数の法線方向の微分  $\frac{\partial \psi}{\partial n}$  は与えられておらず、未知変数は  $r_{\alpha\beta}$ 、 $t_{\alpha\gamma}$  である。よって、(11.3.4) 式の右辺は別に考える必要がある。

## 11.4 リード線の取り扱い

$\Gamma_{1,2}$  での未知変数は透過、反射振幅  $r_{\alpha\beta}$ 、 $t_{\alpha\gamma}$  である。しかしながら、(11.3.4) 式の左辺の面積積分に現れるのは、 $\Gamma_{1,2}$  での波動関数である。したがってこのままでは、有限要素法を適用できないので、リード線の固有関数の直交関係を利用して、波動関数を透過、反射振幅で表す。 $\Gamma_1$  において、(11.3.1) 式より波動関数は左のリード線での固有関数で表される。この時

$$\frac{2}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) dy = \delta_{\alpha\beta} \quad (11.4.1)$$

であるから、(11.3.1) 式に  $\sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)$  を乗じて、 $\Gamma_1$  で積分すれば

$$\frac{2}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \psi \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) dy = e^{ik_\alpha x} \delta_{\alpha\beta} + r_{\alpha\beta} e^{-ik_\beta x} \quad (11.4.2)$$

となる。よって、 $r_{\alpha\beta}$  は

$$r_{\alpha\beta} = \frac{2e^{ik_\beta x}}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \psi \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) dy - e^{2ik_\beta x} \delta_{\alpha\beta} \quad (11.4.3)$$

と表される。(11.4.3) 式を代入すれば、波動関数の法線方向微分  $\partial\psi/\partial n$  は

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial n} &= -\frac{\partial\psi}{\partial x} \\ &= -2ik_\alpha e^{ik_\alpha x} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) + \sum_\beta i\frac{2k_\beta}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \psi \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) dy \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right)\end{aligned}\quad (11.4.4)$$

と表される。(11.1.6) 式より波動関数を形状関数で展開し、(11.4.3) 式を離散化すれば

$$r_{\alpha\beta} \approx \frac{2e^{ik_\beta x}}{d} \sum_{i,j}^{\Gamma_1} (\tilde{N}_{i\beta} u_i + \tilde{N}_{j\beta} u_j) - e^{2ik_\beta x} \delta_{\alpha\beta} \quad (11.4.5)$$

となる。ここで  $\tilde{N}_{(i,j)\beta} = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} N_{i,j} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) dy$  とした。同様に、式(11.4.4) も離散化すれば、

$$\frac{\partial\psi}{\partial n} \approx -2ik_\alpha e^{ik_\alpha x} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) + \sum_\beta i\frac{2k_\beta}{d} \sum_{i,j}^{\Gamma_1} (\tilde{N}_{i\beta} u_i + \tilde{N}_{j\beta} u_j) \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \quad (11.4.6)$$

を得る。よって、(11.1.8) 式の右辺は、境界  $\Gamma_1$  のある節点  $i, j$  において

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma_1, ij} \bar{\psi} \frac{\partial\psi}{\partial n} d\Gamma_1 &\approx \bar{u}_i \left( -i2k_\alpha e^{ik_\alpha x_1} \tilde{N}_{i\alpha} + \sum_\beta i\frac{2k_\beta}{d} \sum_{l,m}^{\Gamma_1} (\tilde{N}_{l\beta} u_l + \tilde{N}_{m\beta} u_m) \tilde{N}_{i\beta} \right) \\ &\quad + \bar{u}_j \left( -i2k_\alpha e^{ik_\alpha x_1} \tilde{N}_{j\alpha} + \sum_\beta i\frac{2k_\beta}{d} \sum_{l,m}^{\Gamma_1} (\tilde{N}_{l\beta} u_l + \tilde{N}_{m\beta} u_m) \tilde{N}_{j\beta} \right)\end{aligned}\quad (11.4.7)$$

と表される。ここで、 $x_1$  は  $\Gamma_1$  の  $x$  座標である。このようにして、(11.1.8) 式の右辺から、反射振幅  $r_{\alpha\beta}$  を消すことが出来る。

同様に、境界  $\Gamma_2$  における透過振幅  $t_{\alpha\gamma}$  は  $u_i$  で表すことができ

$$t_{\alpha\gamma} \approx \frac{2e^{-ik_\gamma x_2}}{d} \sum_{i,j}^{\Gamma_1} (\tilde{N}_{i\gamma} u_i + \tilde{N}_{j\gamma} u_j) \quad (11.4.8)$$

となる。

よって、(11.1.8) 式の両辺に試行関数  $\bar{u}$  が現れ、(11.1.10) 式を得る。(11.1.10) 式を解けば、節点での波動関数  $u_i$  を求めることができ、反射、透過振幅は(11.4.5) 式、(11.4.8) 式に従って得られる。このようにして、2次元電子系に有限要素法を適用できる。

実際に計算を行う上で注意したいのは、十分な離散化のためエバネッセントモードまでとる必要があることである。エバネッセントモード ( $kd = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar}(E - V)}$ ,  $E < V$ ) は決して伝導に寄与せず、その振幅は0となるが境界  $\Gamma_{1,2}$  の十分な離散化のためには必要となる。

## 11.5 Delaunay 三角形分割

### 11.5.1 Delaunay 三角形分割とは

前節まで、2次元電子系での有限要素法の定式化を行った。さて、実際に計算を行うためには、領域 $\Omega$ を要素分割する必要がある。しかしながら、有限要素法においてメッシュの品質はその解析精度に大きく影響する。とくに、ここで用いた形状関数(11.1.5)式は隣り合う要素の境界上の連続性は保証されているが、その法線方向の連続性は保証されていない。そのため、全ての要素は歪みが少なく、正三角形に近いことが要求される。

そこで本研究では、数多くある要素分割法の中から Delaunay 三角形分割を採用した。[37] 三角要素は非常に柔軟で、どのような複雑な形状も三角形のみで分割できる。また、Delaunay 三角形分割はどの要素をとっても、その三角形の外接円が他の要素の節点を含まない分割法であり、そのため大きさが均一で歪みの少ない要素分割が期待できる。また、Voronoi 分割とは双対関係にあり、Delaunay 三角形分割の垂直 2 等分線をつないだものが Voronoi 図である。図 11.3 は、ランダムな形状を Delaunay 分割し、それから Voronoi 図を求めたものである。Voronoi 図はある節点と付近に存在する節点間を均等に分割したもので、それぞれの節点からの勢力図とみることができる。この Voronoi 図は、自然界にも多く現れており生物の細胞や、泡の断面図、また物性の分野ではウィグナーザイツセルなどがある。

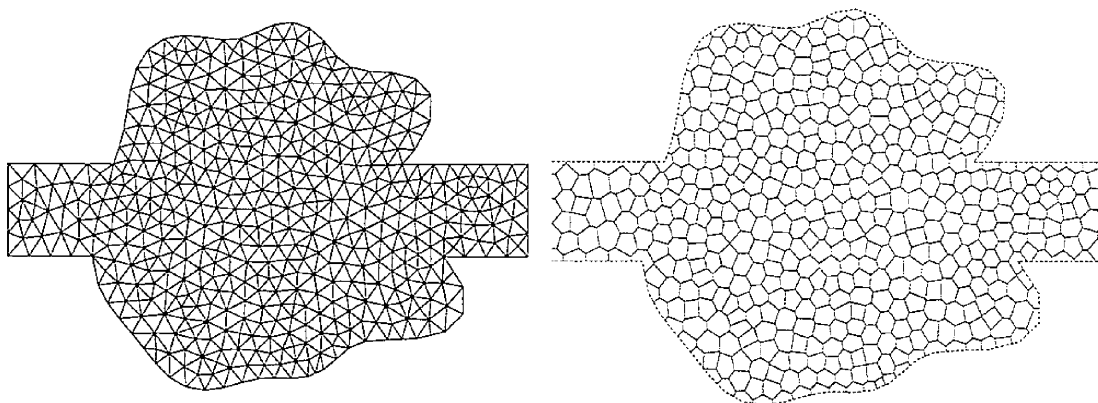


図 11.3: Delaunay 三角形分割 (左図)、Voronoi 分割 (右図)

### 11.5.2 Delaunay 三角形分割の判定条件

本研究では、逐次添加法により Delaunay 三角形分割を行う。この方式では、既に Delaunay 三角分割を満たしている図形の内部に、新たに節点を追加しその節点により生成される新たな要素が Delaunay 三角形分割の条件を満たすよう要素分割を行う。まず、この判定条件を示す。

Delaunay 三角形分割では、ある要素の外接円に他の要素の接点を含まないことが要求される。図 11.4 は、隣り合う要素がちょうど外接円に含まれている場合を示す。いま、考えている要素の節点を  $A, B, D$  とし、 $B, C, D$  で構成される要素が隣の要素であるとする。

このとき、図の破線部分において

$$\begin{aligned} 2\angle A + 2\angle C &= 2\pi \\ \angle A + \angle C &= \pi \end{aligned} \quad (11.5.1)$$

であるから、 $\angle A + \angle C$  が  $\pi$  より小さければ隣の要素の節点  $C$  は外接円の外にあり、大きければ内側にある。

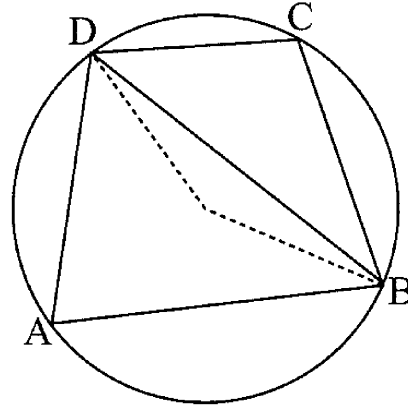


図 11.4: 四角形の外接円

節点  $A, B, C, D$  の座標を  $(x_A, y_A), (x_B, y_B), (x_C, y_C), (x_D, y_D)$  とする。ここで、考えやすいように複素平面で考える。節点  $A$  から  $B, D$  へのベクトルを  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ 、節点  $C$  から  $B, D$  へのベクトルを  $\mathbf{c}, \mathbf{d}$  とする。このとき、

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= (x_B - x_A, y_B - y_A) = a_r + ia_i = r_a \exp(i\theta_a) \\ \mathbf{b} &= (x_D - x_A, y_D - y_A) = b_r + ib_i = r_b \exp(i\theta_b) \\ \mathbf{c} &= (x_B - x_C, y_B - y_C) = c_r + ic_i = r_c \exp(i\theta_c) \\ \mathbf{d} &= (x_D - x_C, y_D - y_C) = d_r + id_i = r_d \exp(i\theta_d) \end{aligned} \quad (11.5.2)$$

とおけば、

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{b}}{\mathbf{a}} &= \frac{r_b}{r_a} \exp(i(\theta_b - \theta_a)) = \frac{a_r b_r + a_i b_i + i(a_r b_i - a_i b_r)}{r_a^2} = \frac{M_r + iM_i}{r_a^2} \\ \frac{\mathbf{c}}{\mathbf{d}} &= \frac{r_c}{r_d} \exp(i(\theta_c - \theta_d)) = \frac{d_r c_r + d_i c_i + i(d_r c_i - d_i c_r)}{r_d^2} = \frac{N_r + iN_i}{r_d^2} \end{aligned} \quad (11.5.3)$$

でなる。ここで、 $M_r, M_i, N_r, N_i$  を新たに定義し、 $\theta_{ba} = \theta_b - \theta_a = \angle A, \theta_{cd} = \theta_c - \theta_d = \angle C$  とした。上式をかければ

$$\frac{r_b r_c}{r_a r_d} \exp(i(\theta_{ba} + \theta_{cd})) = \frac{M_r N_r - M_i N_i + i(M_r N_i + M_i N_r)}{r_a^2 r_d^2}$$



であるので、(11.5.1) 式より  $M_r N_i + M_i N_r$  が負であれば節点  $C$  は外接円の内側、正であれば外側となる。もし外接円の内側にある場合には、対角線を  $BD$  から  $AC$  に入れ替えれば節点  $B$  は  $A, C, D$  で構成される要素の外側になる。対角線を入れ替えた場合、新たな要素の隣接要素もこの条件を満たしているか調べ、満たしていなければ対角線を入れ替える。このようにして、次々と隣の要素をチェックし、それらがすべてこの条件を満たすまで繰り返す。

### 11.5.3 アルゴリズム

考えている系の境界の節点が与えられているものとする。まず、境界の節点を全て含む三角形を最初の要素とする。その三角形に境界の節点を、判定条件を満たすよう次々と加えていく (図 11.5)。

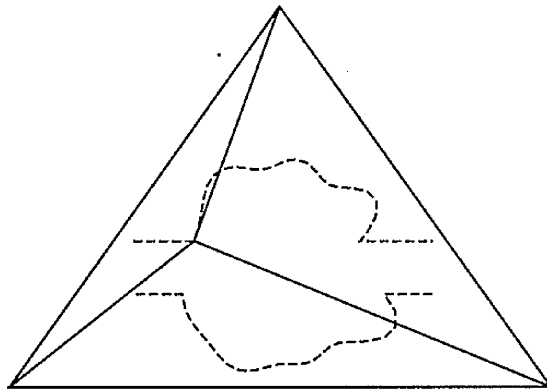


図 11.5: 境界の分割

境界の分割が終わったら、その内部にある要素の扁平率を計算し、正三角形から離れていて扁平率の大きな要素から分割を行う。それを繰り返して十分な分割を行った後、一つの節点を取り出し、その節点を含む全ての要素により構成される多角形の重心へその節点を移動させる。移動後、付近の要素が判定条件を満たしているか調べ満たしていなければ、その付近が全て満たすまで対角線を入れ替えを行う。最後に、考えている領域外の要素を全て削除し要素分割が終了する。このようにすれば、Delaunay 三角分割を満たした大きさが均一で歪みの少ない要素を生成できる。

## 11.6 係数行列

有限要素法では、(11.1.10) 式の  $A, B$  を計算し、連立一次方程式を解くことにより節点での波動関数を求める。  $A, B$  を求めるには、(11.3.4) 式の積分を実行する必要がある。この積分は全ての節点の組み合わせに対して行われるが、形状関数はある要素のみ値を持ち他の要素では 0 となるため、全ての要素に対してその要素内の節点の組み合わせに対して行えばよい。そこで、本節では一次要素と二次要素の場合について要素行列を導出する。

### 11.6.1 1次要素

#### 面積座標

要素行列を求めるにあたり、面積座標を導入すると非常にわかりやすい。

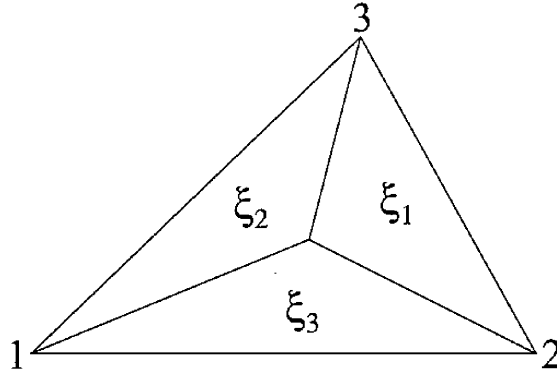


図 11.6: 面積座標

節点 1, 2, 3 で構成されるある要素を考える。ここで、ある節点から他の節点を  $[0, 1]$  の間で線形に補完する面積座標  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  を考える。

$$\begin{cases} \xi_1 = a_1 + b_1x + c_1y \\ \xi_2 = a_2 + b_2x + c_2y \\ \xi_3 = a_3 + b_3x + c_3y \end{cases} \quad (11.6.1)$$

1次要素の場合は、形状関数 (11.1.5) 式は面積座標と一致する。

$$\begin{cases} N_1 = \xi_1 \\ N_2 = \xi_2 \\ N_3 = \xi_3 \end{cases} \quad (11.6.2)$$

節点  $i$  の座標を  $(x_i, y_i)$  とすれば、 $\xi_i$  は節点  $i$  で 1 で、他の節点では 0 となるので

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix} = I \quad (11.6.3)$$

より

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2s} \begin{bmatrix} x_2y_3 - x_3y_2 & x_3y_1 - x_1y_3 & x_1y_2 - x_2y_1 \\ y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \end{bmatrix} \quad (11.6.4)$$

となる。ここで、 $s$  は要素の面積で  $s = 1/2((x_1 - x_3)(y_2 - y_3) - (x_2 - x_3)(y_1 - y_3))$  である。また、面積座標  $\xi_i$  は

$$\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 1 \quad (11.6.5)$$

を満たす。このように、面積座標  $\xi_i$  は要素内の任意の座標が与えられたときに図 11.6 での  $\xi_i$  が全体の面積に占める割合を意味する。

## 積分公式

次に要素行列を計算する前に、よく用いられる積分公式を導出する。

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 (1-\xi)^m \xi^n d\xi &= \int_0^1 \frac{(1-\xi)^m \xi^n}{m+n+1} \left( (n+1) + \frac{m}{1-\xi} - \frac{m\xi}{1-\xi} \right) d\xi \\
 &= \frac{1}{m+n+1} \left( (n+1) \int_0^1 (1-\xi)^m \xi^n d\xi + \int_0^1 m(1-\xi)^{m-1} \xi^n d\xi + \int_0^1 m(1-\xi)^{m-1} \xi^{n+1} d\xi \right) \\
 &= \frac{1}{m+n+1} \left( [(1-\xi)^m \xi^{n+1}]_0^1 - \int_0^1 m(1-\xi)^{m-1} \xi^{n+1} d\xi \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^1 m(1-\xi)^{m-1} \xi^n d\xi + \int_0^1 m(1-\xi)^{m-1} \xi^{n+1} d\xi \right) \\
 &= \frac{m}{m+n+1} \int_0^1 (1-\xi)^{m-1} \xi^n d\xi
 \end{aligned}$$

であるので、 $m$  回繰り返せば

$$\frac{m(m-1)\cdots 1}{(m+n+1)(m+n)\cdots(n+2)} \int_0^1 \xi^n d\xi = \frac{m!n!}{(m+n+1)!}$$

となる。よって、 $\xi_1 + \xi_2 = 1$  とすれば、

$$\int_0^1 \xi_1^m \xi_2^n d\xi_2 = \frac{m!n!}{(m+n+1)!} \tag{11.6.6}$$

が成り立つ。

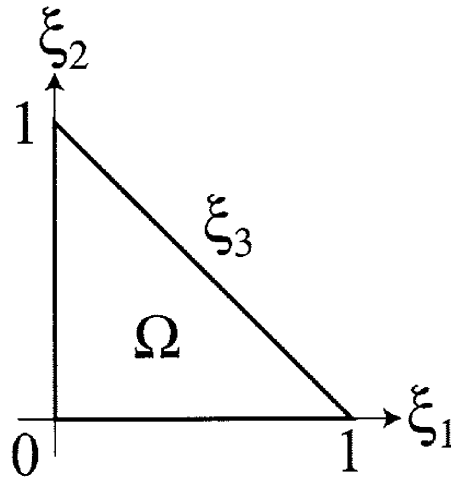


図 11.7: 面積座標の積分範囲

同様に  $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 1$  であるとき、積分範囲を図 11.7 の  $\Omega$  とすれば、

$$\begin{aligned}
 & \int \int_{\Omega} \xi_1^l \xi_2^m \xi_3^n d\xi_1 d\xi_2 \\
 &= \int_0^1 \xi_1^l \int_0^{1-\xi_1} \xi_2^m (1-\xi_1-\xi_2)^n d\xi_2 d\xi_1 \\
 &= \int_0^1 \xi_1^l \frac{m!n!}{(m+n+1)!} (1-\xi_1)^{m+n+1} d\xi_1 \\
 &= \frac{m!n!}{(m+n+1)!} \frac{l!(m+n+1)!}{(l+m+n+2)!} \\
 &= \frac{l!m!n!}{(l+m+n+2)!}
 \end{aligned}$$

を得る。途中、(11.6.6) 式を用いた。よって、

$$\int \int_{\Omega} \xi_1^l \xi_2^m \xi_3^n d\xi_1 d\xi_2 = \frac{l!m!n!}{(l+m+n+2)!} \quad (11.6.7)$$

が成り立つ。

#### 要素行列

(11.3.4) 式の左辺第 1 項と第 2 項を

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} dx dy \quad (11.6.8)$$

とおく。ここで、

$$dx dy = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi_1} & \frac{\partial y}{\partial \xi_2} \end{vmatrix} d\xi_1 d\xi_2 = 2s d\xi_1 d\xi_2 \quad (11.6.9)$$

であるので、要素行列  $K$  は

$$K = \frac{1}{4s} \begin{bmatrix} b_1^2 + c_1^2 & b_1 b_2 + c_1 c_2 & b_1 b_3 + c_1 c_3 \\ b_2 b_1 + c_1 c_2 & b_2^2 + c_2^2 & b_2 b_3 + c_2 c_3 \\ b_3 b_1 + c_3 c_1 & b_3 b_2 + c_3 c_2 & b_3^2 + c_3^2 \end{bmatrix} \quad (11.6.10)$$

となる。同様に (11.3.4) 式の左辺第 3 項を

$$M_{ij} = \int_{\Omega} (kd)^2 N_i N_j dx dy \quad (11.6.11)$$

とおく。 $(kd)^2$  も形状関数により補完する場合は

$$(kd)^2 = N_1 (kd)_1^2 + N_2 (kd)_2^2 + N_3 (kd)_3^2 \quad (11.6.12)$$

とおく。積分公式 (11.6.7) 式を用いれば、要素行列  $M$  は

$$M = \frac{s}{60} \begin{bmatrix} 6(kd)_i^2 + 2(kd)_j^2 + 2(kd)_k^2 & 2(kd)_i^2 + 2(kd)_j^2 + (kd)_k^2 & 2(kd)_i^2 + (kd)_j^2 + 2(kd)_k^2 \\ 2(kd)_i^2 + 2(kd)_j^2 + (kd)_k^2 & 2(kd)_i^2 + 6(kd)_j^2 + 2(kd)_k^2 & (kd)_i^2 + 2(kd)_j^2 + 2(kd)_k^2 \\ 2(kd)_i^2 + (kd)_j^2 + 2(kd)_k^2 & (kd)_i^2 + 2(kd)_j^2 + 2(kd)_k^2 & 2(kd)_i^2 + 2(kd)_j^2 + 6(kd)_k^2 \end{bmatrix} \quad (11.6.13)$$

となる。(11.3.4) 式の右辺は、(11.4.7) 式などになるがその際、 $\tilde{N}_{i\alpha}$  と  $\tilde{N}_{j\alpha}$  が必要となる。 $N_i = 1 - \xi$ ,  $N_j = \xi$ ,  $y(\xi) = y_i N_i + y_j N_j$  とおけば、

$$\begin{aligned} \tilde{N}_{i\alpha} &= \int_{y_j}^{y_i} N_i \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) dy \\ &= (y_i - y_j) \int_0^1 (1 - \xi) \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) d\xi \\ &= \frac{d}{\alpha\pi} \cos\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y_i + \frac{d}{2}\right)\right) + \left(\frac{d}{\alpha\pi}\right)^2 \frac{1}{y_i - y_j} \left(-\sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y_i + \frac{d}{2}\right)\right) + \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y_j + \frac{d}{2}\right)\right)\right) \end{aligned} \quad (11.6.14)$$

となる。同様に、

$$\tilde{N}_{j\alpha} = -\frac{d}{\alpha\pi} \cos\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y_j + \frac{d}{2}\right)\right) + \left(\frac{d}{\alpha\pi}\right)^2 \frac{1}{y_i - y_j} \left(\sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y_i + \frac{d}{2}\right)\right) - \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y_j + \frac{d}{2}\right)\right)\right) \quad (11.6.15)$$

である。これらの要素行列を全ての要素に対して計算し、結果を全体の行列  $A, B$  に代入すればよい。

## 11.6.2 2次要素

2次要素の場合は、1次要素の3つの節点に加え、それらの中点が加わり節点の数は6個となる。(図 11.8) 形状関数は2次の補完となり、面積座標で表せば

$$N_i(\xi_1, \xi_2) = a_i \xi_1^2 + b_i \xi_2^2 + c_i \xi_3^2 + d_i \xi_2 \xi_3 + e_i \xi_3 \xi_1 + f_i \xi_1 \xi_2 \quad (11.6.16)$$

となる。この形状関数は

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & a_5 & a_6 \\ b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_6 \\ c_1 & c_2 & c_3 & c_4 & c_5 & c_6 \\ d_1 & d_2 & d_3 & d_4 & d_5 & d_6 \\ e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ f_1 & f_2 & f_3 & f_4 & f_5 & f_6 \end{bmatrix} = I \quad (11.6.17)$$

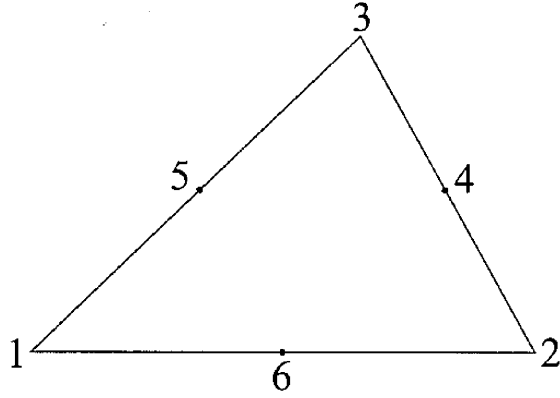


図 11.8: 2次要素

を満たすので、結局

$$\begin{cases} N_1 = \xi_1(2\xi_1 - 1) \\ N_2 = \xi_2(2\xi_2 - 1) \\ N_3 = (1 - \xi_1 - \xi_2)(1 - 2\xi_1 - 2\xi_2) \\ N_4 = 4(1 - \xi_1 - \xi_2)\xi_2 \\ N_5 = 4(1 - \xi_1 - \xi_2)\xi_1 \\ N_6 = 4\xi_1\xi_2 \end{cases} \quad (11.6.18)$$

を得る。後は、積分公式 (11.6.7) 式などを用いれば、同様に要素行列を計算できる。

## 11.7 ポイントコンタクト

前節までに、有限要素法による2次元電子系の数値解析法を説明した。境界要素法と比べ、有限要素法は連続に変化するポテンシャルを扱えるという利点がある。よって、本節では量子細線中にポイントコンタクトを導入した構造のコンダクタンスを計算する。ポイントコンタクトの形状としては、(11.7.1) 式で表される形状を用いた。(図 11.9)[38]

$$\bar{V}(x, y) = \frac{2md^2}{\hbar} V(x, y) = \frac{V_0}{2} \left( 1 + \cos\left(\frac{\pi x}{L_x}\right) \right) + E_0 \sum_{\pm} \left[ \frac{y - y_{\pm}(x)}{\Delta} \right]^2 \theta(\pm(y - y_{\pm}(x)))$$

$$y_{\pm}(x) = \pm \frac{W_0}{4} \left( 1 - \cos\left(\frac{\pi x}{L_x}\right) \right), \quad L_x = \begin{cases} L_1 & (-L_1 < x < 0) \\ L_2 & (0 < x < L_2) \end{cases}. \quad (11.7.1)$$

ただし、 $E_0 = 10^2$ ,  $V_0 = 0.7E_0$ ,  $L_1 = L_2 = W_0 = d$  で  $\Delta = d/4$  とした。

図 11.10 は、左のリードから基本モードで入射させた場合の、各モード  $i$  での透過確率である。 $kd = 10$  付近まで、全てのモードで透過確率が 0 となっている。これは、ポイントコンタクトの隙間に対して波長が長いからである。実際に  $kd = 10$  の時の波長は、 $\lambda = 2\pi/kd \approx 0.628d$  であり、ポイントコンタクトを基本モードで透過すると考えれば波

01 口 図 11.9 点接触の透波特性を示す。透波率  $T$  は、入射波の波数  $k$  と構造パラメータ  $d$  の積  $kd$  の関数として表される。透波率は、入射波の波数  $k$  と構造パラメータ  $d$  の積  $kd$  の関数として表される。透波率は、入射波の波数  $k$  と構造パラメータ  $d$  の積  $kd$  の関数として表される。

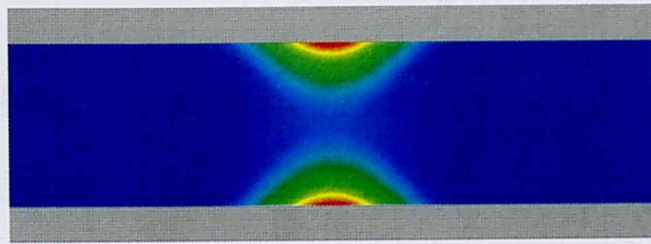


図 11.9: ポイントコンタクト

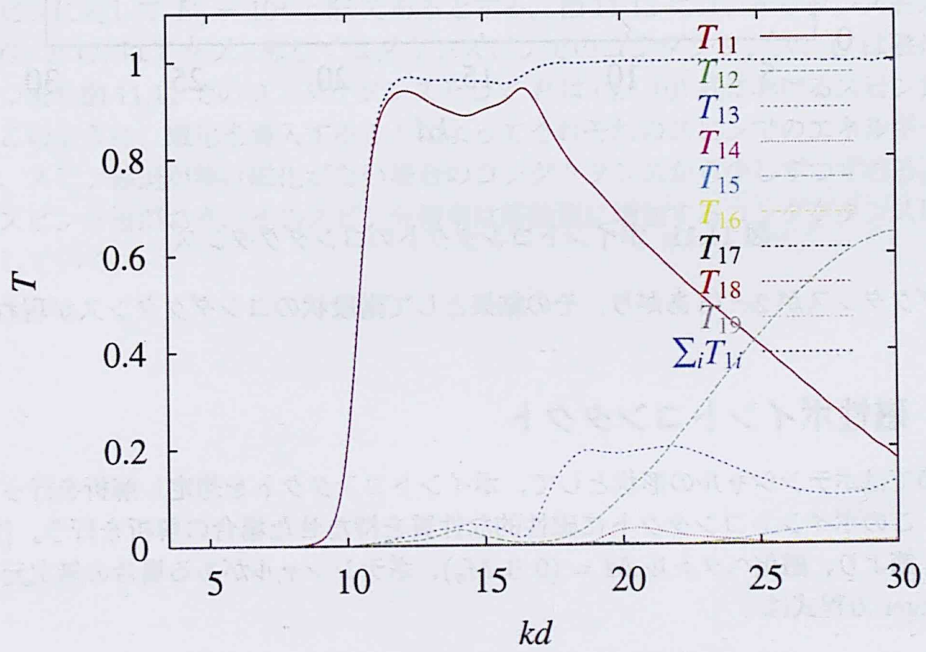


図 11.10: 基本モードを入射させた場合の透過スペクトル

長の  $1/2$  である  $0.314d$  程度の間隔を電子は感じているものと考えられる。また、図 11.10 は最初は基本モードのみで透過しているが、波数が高くなると他のモードでも透過する。これは、ポテンシャルに散乱されることによって異なるモードへの遷移が起こることを意味している。しかし、 $kd = 10$  以降では  $\sum_i T_{1i}$  はほぼ 1 となっており、入射した電子波が全て透過している。

図 11.11 は、ランダウアーの公式により求めたコンダクタンスである。ここで、 $T_n = \sum_m T_{nm}$  である。ポイントコンタクトの最も狭い隙間に関して、新たなモードが開くたび

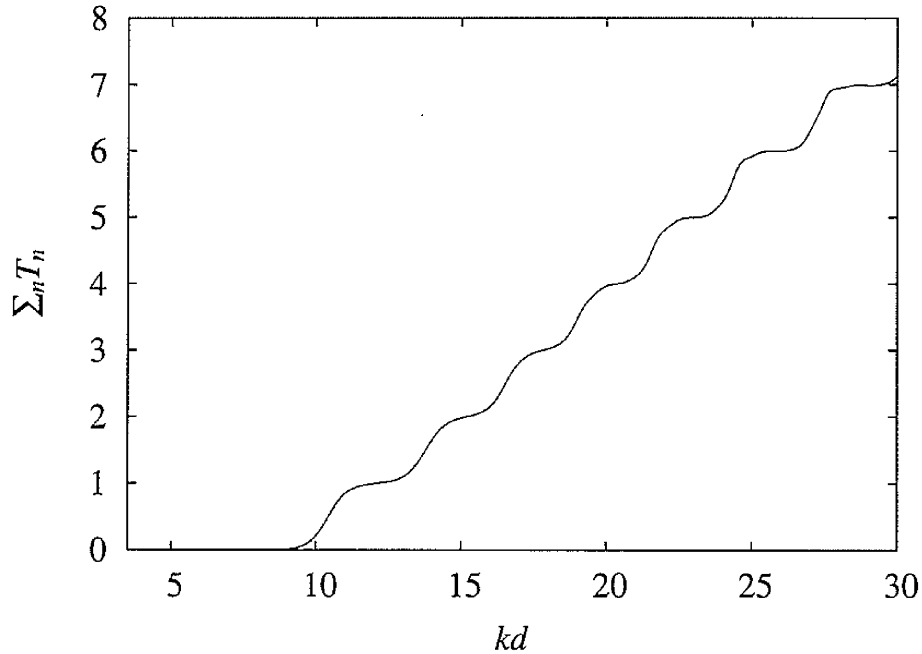


図 11.11: ポイントコンタクトのコンダクタンス

にコンダクタンスが  $2e^2/h$  あがり、その結果として階段状のコンダクタンスが現れる。

## 11.8 磁性ポイントコンタクト

11.7 節ではポテンシャルの形状として、ポイントコンタクトを想定し解析を行った。本節では、このポイントコンタクトに磁性的な性質を持たせた場合の解析を行う。[7] ここで 10.4.4 節より、磁化ベクトル  $M = (0, 0, M_z)$ 、ポテンシャルがある場合の無次元化した Schrödinger 方程式は

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_{\uparrow} = ((kd)^2 - V + M_z) \psi_{\uparrow} \\ -\nabla^2 \psi_{\downarrow} = ((kd)^2 - V - M_z) \psi_{\downarrow} \end{cases} \quad (11.8.1)$$

である。ポテンシャルの形状は 11.7 節とおなじ (11.7.1) 式とし、パラメータも同じものを用いる。一方、磁化  $M_z$  も (11.7.1) 式で与えられるものとし、その大きさは  $E_0 = 5^2$  とする。つまり、磁性ポイントコンタクトとして、その磁化を含めたポテンシャルがそれぞ



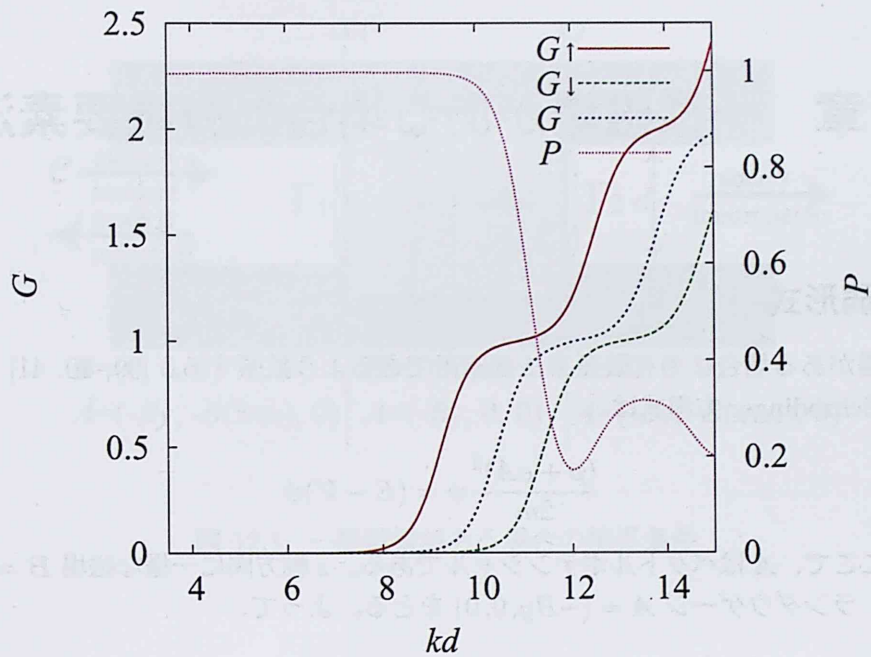


図 11.12: 磁性ポイントコンタクトのコンダクタンス

れのスピに対して  $E_0 = 10^2 \mp 5^2$  であるとする。図 11.12 にコンダクタンスを示す。ここで、 $G_{\uparrow}$  と  $G_{\downarrow}$  はアップ、もしくはダウンスピンでのコンダクタンス、 $G$  は磁化がない場合、つまり図 11.11 でのコンダクタンスそして  $P$  は (3.5.10) 式におけるスピ分極率である。このように、磁化を導入することによってそれぞれのスピでのエネルギーが変わるため、スピ縮退が解け磁化がない場合のコンダクタンスから少しずつずれる。それによってスピ分極がおき、そのスピ分極率は階段型に増加するコンダクタンスに対応して減少していく。

## 第12章 一様磁場がある場合の有限要素法

### 12.1 弱形式

一様磁場がある場合にも有限要素法を適用できるよう拡張する。[39, 40, 41] 一電子の磁場中の Schrödinger 方程式は

$$\frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m}\psi = (E - V)\psi \quad (12.1.1)$$

である。ここで、 $\mathbf{A}$  はベクトルポテンシャルである。 $z$  軸方向に一様な磁場  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  を印可し、ランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  をとる。よって、

$$\frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + 2ieB\hbar y \frac{\partial}{\partial x} + e^2 B^2 y^2 \right) \psi = (E - V)\psi \quad (12.1.2)$$

となる。

次に無次元化を行う。長さのスケールを  $d$  とすれば、(12.1.1) 式は

$$\left( -\hat{\nabla}^2 + 2i\hat{B}\hat{y} \frac{\partial}{\partial \hat{x}} + \hat{B}^2 \hat{y}^2 \right) \psi = (kd)^2 \psi \quad (12.1.3)$$

と書ける。ここで、 $\hat{x}d = x$ 、 $\hat{y}d = y$ 、 $\hat{B} = \frac{eB}{\hbar} d^2 = \frac{d^2}{l^2}$  であり  $l$  は磁気長、そして  $kd = \frac{2m(E-V)}{\hbar} d$  である。今後は、簡単のため  $\hat{\cdot}$  は省略して記述する。後は、磁場がない場合と同様に試行関数  $\bar{\psi}$  を乗じて、考えている領域  $\Omega$  で積分しガウスの定理を用いれば、

$$\int_{\Omega} \nabla \bar{\psi} \cdot \nabla \psi + 2iBy\bar{\psi} \frac{\partial}{\partial x} \psi + (B^2 y^2 - (kd)^2) \bar{\psi} \psi d\Omega = \int_{\Gamma} \bar{\psi} \nabla \psi d\Gamma, \quad (12.1.4)$$

を得る。

### 12.2 境界条件

次に、境界条件について説明する。図 12.1 は、想定する境界条件を表す。磁場は、考えている領域  $\Omega$  において  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  とし、リード線では零磁場とする。領域  $\Omega$  では、ベクトルポテンシャルはランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  をとる。このとき、リード線は零磁場であるが、ベクトルポテンシャルは連続につながってはならない。なぜなら、静電場の場合には

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{j} \quad (12.2.1)$$

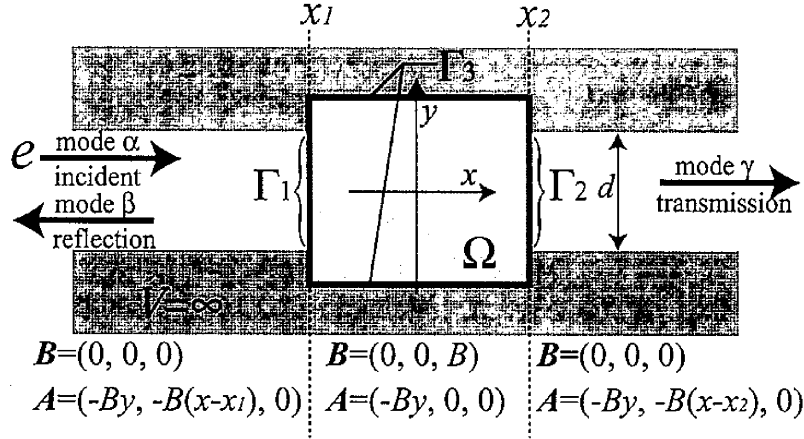


図 12.1: 一様磁場がある場合の境界条件

であるが

$$\begin{aligned}\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \mu \mathbf{j} \\ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} &= \mu \mathbf{j} \\ \nabla^2 \mathbf{A} &= -\mu \mathbf{j}\end{aligned}\quad (12.2.2)$$

なので、ベクトルポテンシャルを連続に接続しないと、境界上で電流が発生してしまう。よって、左のリード線で  $\mathbf{A} = (-By, -B(x-x_1), 0)$ 、右のリード線で  $\mathbf{A} = (-By, -B(x-x_2), 0)$  とする。このため、リード線の固有関数に対してゲージ変換する必要が生じる。 $\mathbf{A} = (0, 0, 0)$  から、 $\mathbf{A}' = (-By, -B(x-x_1), 0)$  へのゲージ変換を考える。

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi \quad (12.2.3)$$

より、

$$\nabla \chi = (-By, -B(x-x_1), 0) \quad (12.2.4)$$

であるので、

$$\chi = -B(x-x_1)y \quad (12.2.5)$$

となる。したがって、 $\mathbf{A}'$  の波動関数  $\psi'$  へのゲージ変換は、 $\psi' = \psi e^{(-\frac{i}{\hbar}e\chi)}$  より、無次元化して表すと

$$\psi' = e^{iB(x-x_1)y} \psi \quad (12.2.6)$$

となる。右のリードでも同様にゲージ変換を行う。よって、境界条件は

$$\Gamma_1 : \psi = \left( \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) e^{ik_\alpha x} + \sum_{\beta} r_{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) e^{-ik_\beta x} \right) e^{iB(x-x_1)y} \quad (12.2.7)$$

$$\Gamma_2 : \psi = \left( \sum_{\gamma} t_{\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) e^{ik_\gamma x} \right) e^{iB(x-x_2)y} \quad (12.2.8)$$

$$\Gamma_3 : \psi = 0, \quad (12.2.9)$$

となる。

## 12.3 解の信頼性

### 12.3.1 解の収束性

有限要素法の解は、微分方程式を直接解いた場合と違い、弱形式の積分方程式を解いた解であり弱解である。よって、得られた解が必ずしも正しい解と一致しているとは限らない。そこでまず最初に、節点数を変えても解が変わらないかどうかを調べる。(12.1.3)式ではランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  をとったため、左辺に  $\hat{B}^2 \hat{y}^2$  という項が現れる。そのため、 $y$  が大きくなるにつれ振動が激しくなり、十分な計算精度が確保できないことが予想される。そこで、ランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  を採用したときに特に精度が悪化するであろう形状として、図 12.2 のような十字型の系の計算を行う。パラメータとして、

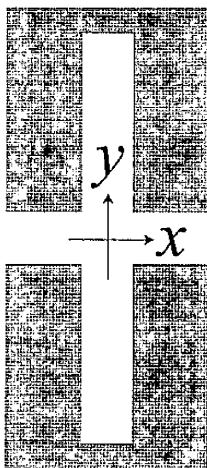


図 12.2: 十字型量子細線

波数  $kd = 10$ 、磁場  $B = 1 \sim 5$ 、節点数  $N_s = 600 \sim 7000$  とし、一次要素、二次要素の場合を計算した。図 12.3、12.4 は一次要素、二次要素での節点数に対する透過確率である。電子は、左のリードより基本モードで入射し、透過確率は全てのモードでの透過確率の合計を  $T$  とした。まず、一次要素の場合についてみていく。零磁場  $B = 0$  の場合には節点数 3000 程度でほぼ収束している。このとき、この系の面積が 9 であり、全ての要素が同じ大きさの直角二等辺三角形として一つの辺の長さを見積もれば  $\sqrt{(2 \times \frac{9}{3000})} \approx 0.0775$  となる。また、波長が  $\lambda = \frac{2\pi}{kd} \approx 0.628$  であるので、 $\frac{0.628}{0.0775} \approx 8.1$  よりだいたい波長の 8 分の 1 程度に離散化すれば十分であることが分かる。 $B = 1$ 、弱磁場の場合も節点数が少ない間は激しく振動しているが、5000 程度の節点数で十分に収束している。しかし、それより磁場が強くなると 7000 程度の節点数をとったとしても、収束していない。また細かい振動が見られるため、波動関数が激しく振動していると考えられる。

つぎに、二次要素の場合について試みる。一次要素の場合と比べて、かなり改善しており  $B = 0, 1, 2, 3$  あたりまではほぼ収束している。しかし、それより磁場が強くなるとやはり収束していない。

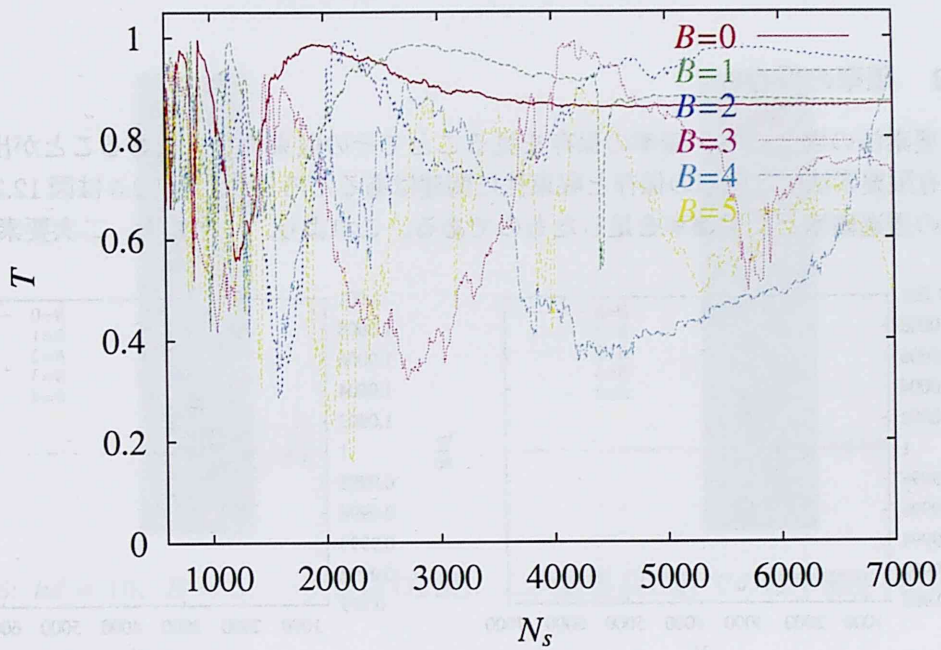


図 12.3: 一次要素での透過確率の収束性

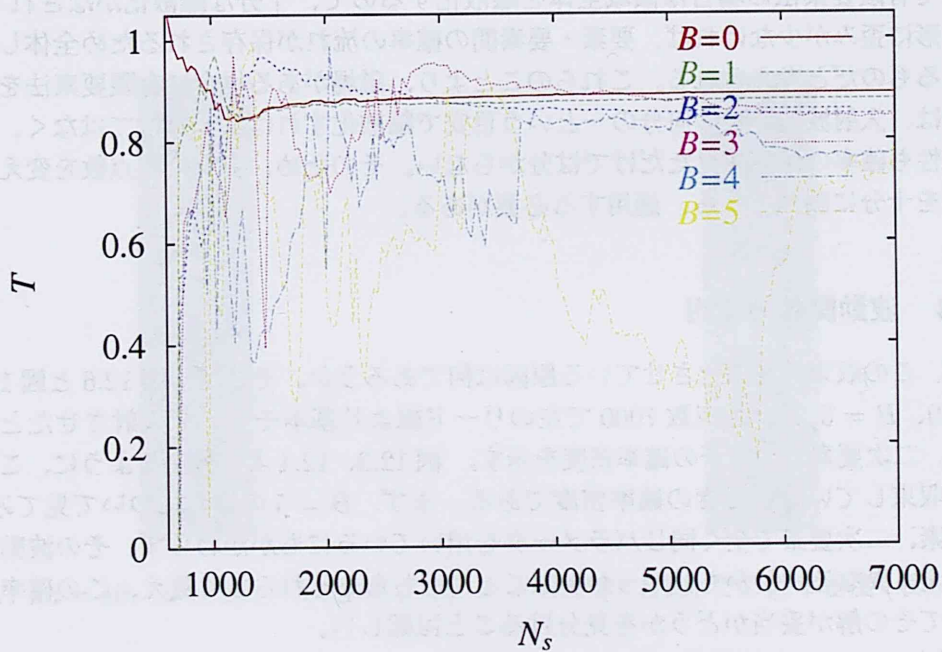


図 12.4: 二次要素での透過確率の収束性

このように、ランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  をとったときには、 $y$  方向に長くなっている構造に対してはある程度大きな磁場になると十分な収束性が得られないことが分かる。

### 12.3.2 確率の保存

境界要素法の場合には、確率の保存を見ることでその収束性を見積もることが出来た。では、有限要素法では確率の保存と収束性に関連はあるだろうか。図 12.5 は図 12.3、12.4 の場合の透過確率と反射確率を足したものである。これより、一次要素、二次要素どちら

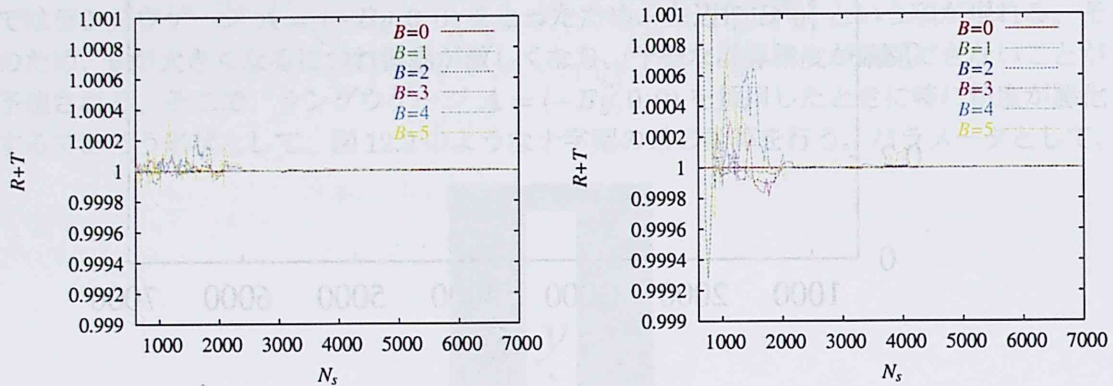


図 12.5: 一次要素 (左図)、二次要素 (右図) での確率の保存性

の場合も節点数 2000 程度で 0.02% 以下という十分な保存を示している。つまり、有限要素法の場合には確率の保存よりその収束性を見積もることは出来ない。これは、境界要素法と比べて有限要素法の場合には領域全体を離散化するので、十分な離散化がなされており、要素の形に歪みが少なければ、要素・要素間の確率の流れが保存されるため全体として保存しているものだと考えられる。これらのことより、磁場がある場合に有限要素法を適用する場合は、入射波の波長の何分の一という目安で離散化すればよいわけではなく、またその収束性も確率の保存を見ただけでは分からない。そのため、実際に節点数を変えてその収束性を十分に調べてから、適用する必要がある。

### 12.3.3 波動関数の位相

では、この収束性を悪化させている原因は何であろうか。そこで、図 12.6 と図 12.7 に、 $kd = 10$ 、 $B = 5, 20$ 、節点数 7000 で左のリード線より基本モードで入射させたときの一次要素、二次要素での電子の確率密度を示す。図 12.3、12.4 より分かるように、これらは十分に収束していないときの確率密度である。まず、 $B = 5$  の場合について見てみると、一次要素、二次要素で全く同じパラメータを用いているにもかかわらず、その波動関数の様子は全く異なる。しかも、やっかいなことにどちらもそれらしく見え、この確率密度だけを見てその解が妥当かどうかを見分けることは難しい。

つぎに、 $B = 20$  と強磁場の場合についてみていく。古典的なサイクロトロン半径  $r_c$  は

$$r_c = \frac{mv}{eB} = \frac{\hbar k}{eB} = kl^2 \quad (12.3.1)$$



図 12.6:  $kd = 10$ 、 $B = 5$ 、一次要素 (左図)、二次要素 (右図) での確率密度 (収束していない)



図 12.7:  $kd = 10$ 、 $B = 20$ 、一次要素 (左図)、二次要素 (右図) での確率密度 (収束していない)

である。ただし、 $l = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$  は磁気長である。これを、無次元化した場合で考えると

$$\frac{r_c}{d} = kd \frac{l^2}{d^2} = \frac{kd}{\hat{B}} \quad (12.3.2)$$

となる。よって、この場合のサイクロトロン半径は  $10/20 = 1/2$  となる。この磁場の強さだと、ほぼエッジ状態に入り始めており、古典的にははだいたい  $1/2$  程度の半径でサイクロトロン運動をし、障壁との境界に沿って進んでいく様子が期待される。しかし、図 12.7 は一次要素、二次要素どちらの場合も波動関数が全体に広がっておらず、途中まで入ってそのまま透過していってしまう。つまり、強磁場の場合は確率密度を見れば明らかにおかしいことが分かる。

この原因としてゲージ変換で導入された位相の影響が予想される。そこで、図 12.8 に、図 12.7 での波動関数の位相を示す。これをみると、 $y$  座標の絶対値が大きくなるにつれ位

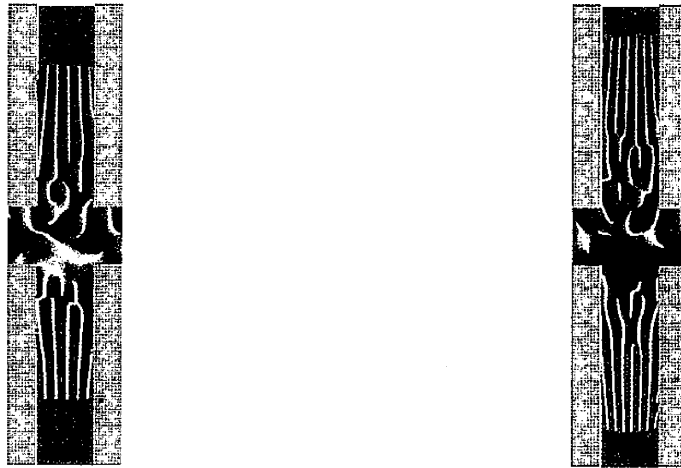


図 12.8:  $kd = 10$ 、 $B = 20$ 、一次要素 (左図)、二次要素 (右図) での位相

相の変化が大きくなることがよくわかる。これは、ランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  が位相に直に現れているためと考えられる。つまり、磁場が強くなるほど、そして  $y$  座標が大きくなるほど  $x$  座標に対して位相は激しく変化する。特にこの十字型の形状の場合には  $y$  方向に長いので、この節点数では井戸の奥で波動関数を十分な精度で補完することが出来なくなり、波動関数が全体に広がらない状況を引き起こしたものと考えられる。

さて収束性が悪化する原因に見当がついたところで、もう一度図 12.3 に戻って一次要素での収束性について考察を行う。零磁場の場合には離散化の目安として、波長の  $8$  分の  $1$  程度まで離散化すれば十分であることが分かった。磁場がある場合にはそのままではそれを当てはめることは出来ないので、ゲージ変換での位相  $e^{iBxy}$  をふくめて、平面波  $e^{ikdx}$  に位相をかけ、 $e^{i(kd+By)x}$  の形を取ると仮定して、 $kd + By$  を実効的な波数として見積もる。

図 12.2 の井戸の奥の  $y$  座標は  $4$  である。よって、 $B = 1$  のときに実効的な波数は  $10 + 4 = 14$  となり、節点数  $6000$  で実効的な波数の波長の  $8$  分の  $1$  程度となる。実際に、図 12.2 をみるとその近くで収束している。つぎに、 $B = 2$  のときは波数は  $10 + 4 * 2 = 18$  となり、節点数  $7000$  で波長の  $1/6.88$  程度となる。これは、零磁場で換算すると節点数  $2100$  程度となり、 $B = 0$  のグラフはその節点数では収束していないことと一致する。さらに、 $B = 2$



のときは、節点数 7000 で波長の 1/5.53 程度となり、零磁場換算で 1450 程度の節点数となる。この節点数だと、 $B = 0$  は振動しており収束していない。

このように、 $kd + By$  を実効的な波数として考えれば、磁場がある場合の離散化の程度の大まかな見積もりが出来ることがわかる。ただし、これは図 12.2 という単純な形状の場合で、より複雑な形状の場合には難しいかもしれない。

## 12.4 ゲージによる違い

これまでランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  を用いて、その場合に特に精度が低下する例として図 12.2 の形状の計算を行った。次に、異なるゲージを用いて図 12.2 の形状の計算を行う。図 12.9 にベクトルポテンシャル  $\mathbf{A} = (-aBy, (1-a)Bx, 0)$  での境界条件を示

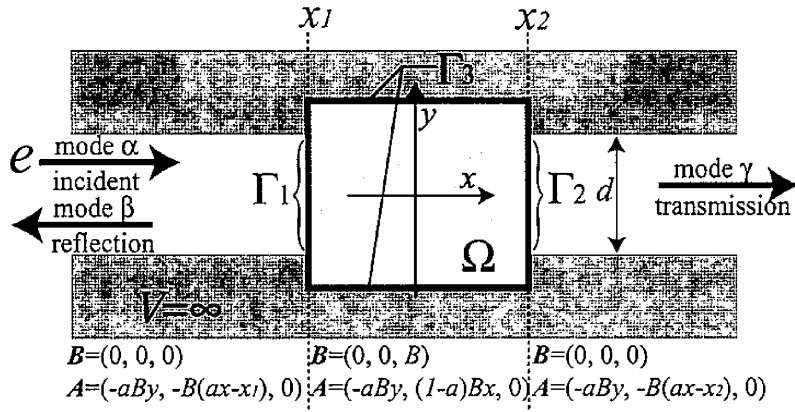


図 12.9: ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A} = (-aBy, (1-a)Bx, 0)$  の場合の境界条件

す。 $a$  は任意の定数で、 $a = 0$  でランダウゲージ  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ 、 $a = 1/2$  で対象ゲージ  $\mathbf{A} = (-1/2By, 1/2Bx, 0)$  となる。このベクトルポテンシャルと連続につなぐため、左のリードで  $\mathbf{A} = (-aBy, -B(ax-x_1), 0)$  とし、右のリードで  $\mathbf{A} = (-aBy, -B(ax-x_2), 0)$  というゲージをとる。(12.1.1) 式に  $\mathbf{A} = (-aBy, (1-a)Bx, 0)$  を代入して

$$\frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + 2ieB\hbar \left( -ay \frac{\partial}{\partial x} + (1-a)x \frac{\partial}{\partial y} \right) + e^2 B^2 (a^2 y^2 + (1-a)^2 x^2) \right) \psi = (E-V)\psi \quad (12.4.1)$$

を得る。長さのスケール  $d$  で無次元化すれば、

$$\left( -\nabla^2 + 2iB \left( -ay \frac{\partial}{\partial x} + (1-a)x \frac{\partial}{\partial y} \right) + B^2 (a^2 y^2 + (1-a)^2 x^2) \right) \psi = (kd)^2 \psi \quad (12.4.2)$$

となる。ただし、 $\hbar$  は省略した。また、左のリード線の波動関数  $\psi_1$  と右のリード線の波動関数  $\psi_2$  は

$$\begin{aligned} \psi'_1 &= e^{iB(ax-x_1)y} \psi_1 \\ \psi'_2 &= e^{iB(ax-x_2)y} \psi_2 \end{aligned} \quad (12.4.3)$$

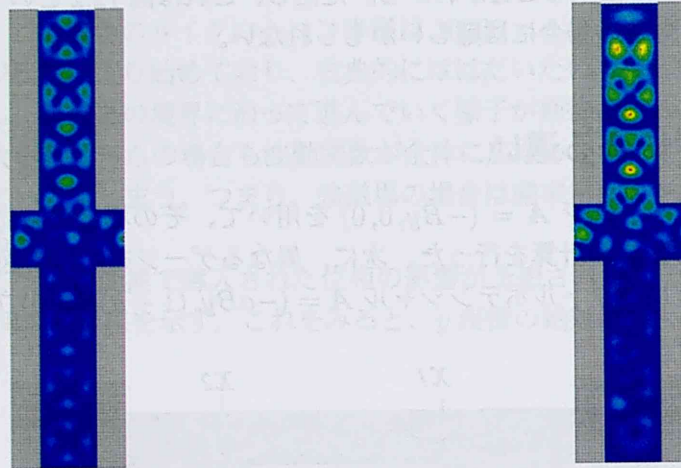


図 12.10:  $kd = 10$ ,  $B = 20$ , 二次要素,  $a = 0$ (左図),  $a = 0.5$ (右図) での確率密度

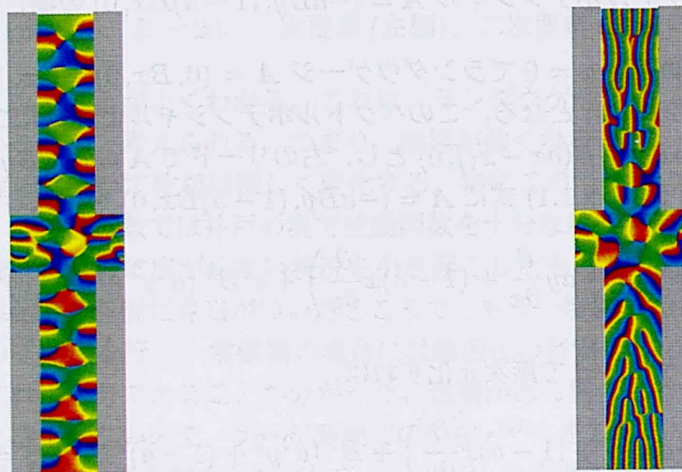


図 12.11:  $kd = 10$ ,  $B = 20$ , 二次要素,  $a = 0$ (左図),  $a = 0.5$ (右図) での位相

とゲージ変換する。後は、同様に計算できる。

図 12.10、12.11 に  $kd = 10$ 、 $B = 20$  でランダウゲージ  $(0, Bx, 0)$  と対称ゲージ  $(-1/2By, 1/2Bx, 0)$  での確率密度と位相を示す。確率密度をみると、ランダウゲージ  $(-By, 0, 0)$  をとった場合である図 12.7 と比べ、波動関数は全体に広がっている。また、位相は (12.4.3) 式のゲージ変換の際の位相が直接的に現れていることがよくわかる。このようにゲージの取り方で結果は大きく代わる。そのため、実際に計算を行うにはその形状に合わせて、位相の変化が大きくなるようなゲージを選択する必要がある。ここでは十字型の系の計算を行ったが、この場合には  $A = (0, Bx, 0)$  のゲージを用いれば、現実的な要素数で十分な収束性を得ることが出来る。

## 12.5 任意形状量子ドット

次に、任意形状の量子ドットの計算を行う。

$$r(\theta) = r_{max} + \sum_{n=1}^N a_n \frac{a_{max}}{2} \cos(n\theta + \pi\varphi_n) \quad (12.5.1)$$

量子ドットの形状としては、(12.5.1) 式によりランダムに形状を生成した。[42] 現実の量子ドットは、必ずしも円形ではなく界面が荒れており複雑な形状をしている。メゾスコピック系では、系の形状が伝導に大きく寄与するため、そのような複雑な形状を取り込んだ計算が必要となる。(12.5.1) 式の  $r_{max}$  は変形前の円形ドットの半径で、 $a_{max}$  は変形の強さを表すパラメータである。これらのパラメータを適切にとることで、現実の量子ドットに近い形状を得ることが出来る。ここでは、 $r_{max} = 1.2d$ 、 $a_{max} = 0.2d$ 、 $N = 8$  とし  $a_n$ 、 $\varphi_n$  には  $[0 : 1]$  の一様乱数を与えランダムな形状を生成した。(図 12.12)

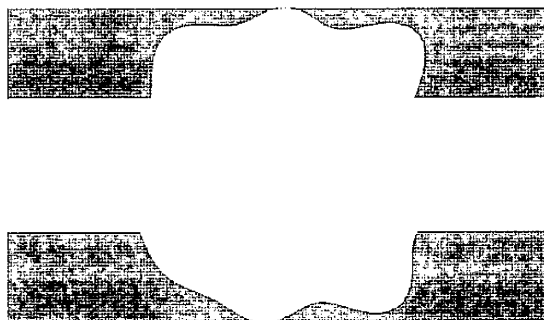


図 12.12: ランダムな形状の量子ドット

図 12.13 にこの形状のコンダクタンスの計算結果を示す。

磁場が弱い領域ではランダムな形状に対応して、複雑に振動している。しかし、磁場が強くなっていくとエッジ状態が形成され形に寄らなくなるので、振動が小さくなっていく様子が分かる。また、コンダクタンスの離散化により階段状のコンダクタンスとなっているが、磁場が強くなるとそれが全体的に高い波数の方へシフトしている。これは、磁場によって波動関数が端の方へ押し込まれ、それによって伝導モードの数が減るためである。

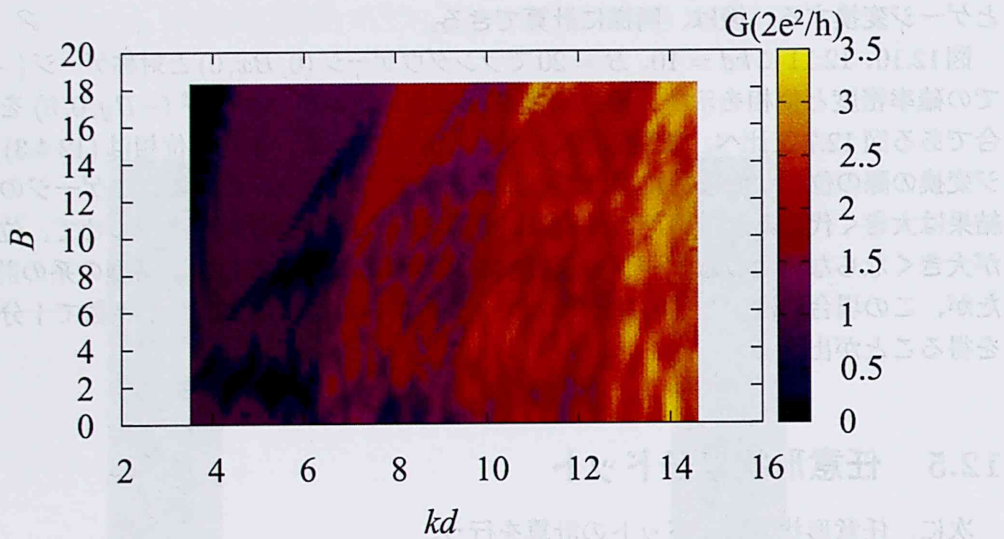


図 12.13: ランダムな形状量子ドットのコンダクタンス

また、波数と磁場に対して一次関数的に谷となっている構造がいくつか見られる。これはドットのいくつかの場所で共鳴が起きており、その半径が (12.3.2) 式の古典的なサイクロトロン半径  $r_c = kd/B$  と一致した箇所で現れているものだと考えられる。

## 12.6 ABリング

次に、図 12.14 に示す AB リング型の計算結果を示す。ここで、外側の円の半径は  $1.2d$ 、内側の円の半径は  $0.7d$  とした。

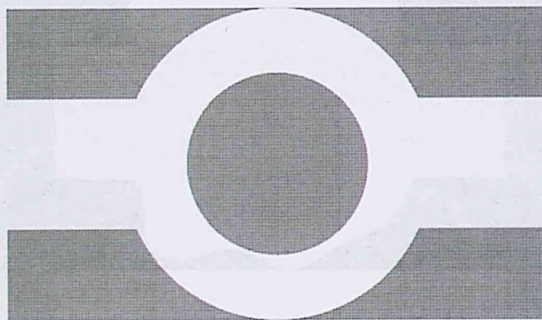


図 12.14: AB リング

また、磁場は系全体に印可し  $B = 0 \sim 40$ 、波数は  $kd = 10$  とした。この場合のコンダクタンスを図 12.15 に示す。明らかに AB 振動が現れていることが分かる。また、磁場が強くなるにつれてピークが鋭くなっている。5.3 節で見たように、磁場中の AB リングに

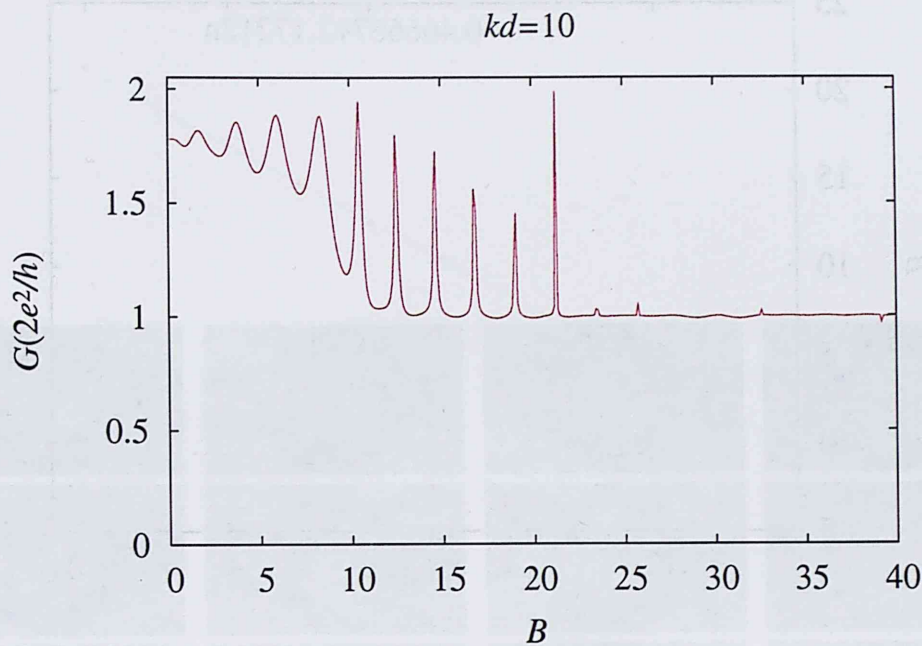


図 12.15:  $kd = 10$ ,  $B = 0 \sim 40$  でのコンダクタンス

は AB 振動が現れ、その振動は

$$G = G_0 + \hat{G} \cos(2\pi \frac{\phi}{\phi_0} + \bar{\phi}) \quad (12.6.1)$$

で表される。ここで、 $\phi$  はリングを貫く磁束で、 $\phi_0 = h/e$  は磁束量子である。無次元化したパラメータに直すと

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{eB\pi r^2}{2\pi\hbar} = \frac{r^2 d^2}{l^2 d^2} = \frac{1}{2} B r^2 \quad (12.6.2)$$

となる。ここで、 $r$  はリングの半径である。よって、磁場に対するピークの周期は  $2/r^2$  となる。図 12.16 にコンダクタンスのピークを示す。またこれらのピークを、 $2\pi n = 2\pi(B/T + \bar{\phi})$  とし、最小二乗法によりフィッティングした結果も示してある。非常によい一致を示している。ここで、 $1/T \approx 2.17$ 、 $\bar{\phi} \approx -0.466$  であった。これより磁束が貫く半径は  $r \approx 0.960$  と見積もられる。つまり、リングのちょうど中間あたりの大きさとなっている。

式 (12.6.1) で表される AB 振動は、リングは擬一次元系とみなせる非常に狭い量子細線で出来ており、磁場もリングには印可されていない場合を想定している。しかし、ここで行った計算は図 12.14 に示されるようになら幅のある細線であり、また磁場もリング内に印可されている。そのため、式 (12.3.2) の古典的なサイクロトン半径  $r_c = kd/B$  がリングの内側の半径と比べて十分に大きな間は、サイクロトン運動によりリングの量子細線でのモードが制限されることはなく、AB 振動を示す。しかし、より磁場が強くなるとピークが鋭くなり、 $\cos$  型の振動でなくなる。これは、サイクロトン半径が外側の半径  $r = 1.2d$  よりも小さくなる、つまり  $B = 10/1.2 \approx 8.33$  あたりからリングを回り続けるような軌道が現れ、それによって共鳴がおきリングでの確率密度が高くなる。そのため、ピークが強調されて、鋭いピークになるのではないかと考えられる。

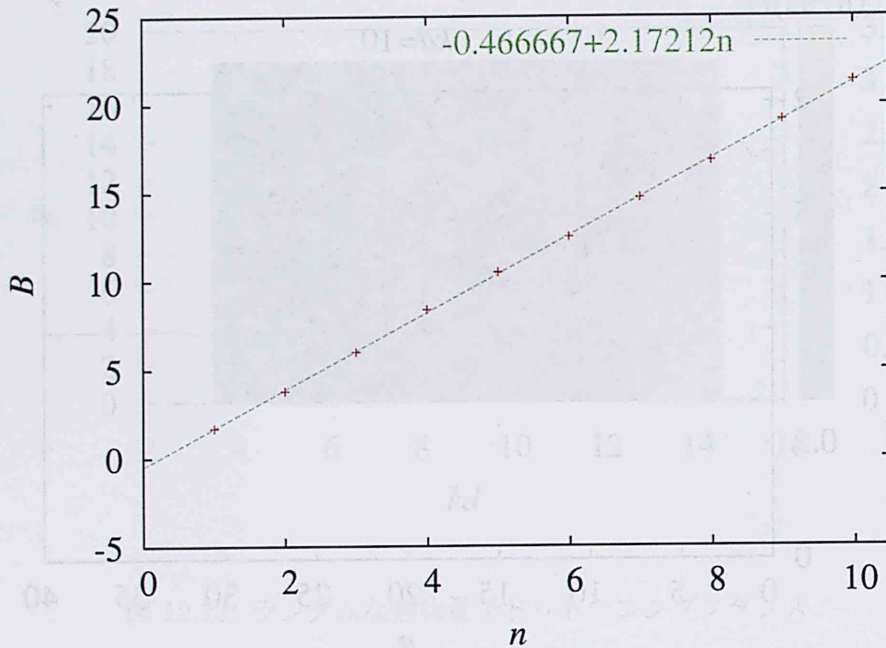


図 12.16: コンダクタンスのピーク

図 12.17、12.18、12.19、12.20 に弱磁場 ( $B = 0 \sim 2.3$ ) と強磁場 ( $B = 19 \sim 21.3$ ) での電子の確率密度と位相を示す。入射モードは基本モードで、波数は  $kd = 10$ 、ベクトルポテンシャルはランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  とした。

まず、図 12.17、12.18 の弱磁場の場合について見てみると、磁場が強くなるにつれリングの上での確率密度は高くなるが、それ以外は余り変化が無く、共鳴している様子も見られない。次に位相について見てみると、 $B = 0$  ではリングの上部分に山が 3 つあるが、磁場を強くしていくと少しずつずれていきピークである  $B = 1.7$  あたりでちょうど山が 4 つとなる。この時に、リングの上部分を通った電子と下部分を通った電子の位相がそろい、干渉が起こる AB 振動をよく表している。このように弱磁場の場合は磁場による変化は比較的穏やかである。

ところが図 12.19、12.20 の強磁場になると劇的に変化する。確率密度を見ると、ピーク  $B = 19.1$  と  $21.3$  においてリング部分で非常に高くなっている。これは、強磁場ではリングの半径がサイクロトロン半径よりも小さくなり、リングを回り続ける軌道が現れ共鳴が強められるためだと考えられる。ピーク以外では波動関数は全体に広がっており、共鳴を起こしていない。位相に関しては、AB 振動をよく表している。ピークの時にリングの上部分と下部分の境目での位相が左右とも  $\pi$  もしくは  $-\pi$  となっていることがよく分かる。ピーク以外では位相がずれており、それによりリング部での共鳴は起こらない。

このように、AB リングにおいては波動関数の絶対値のみならず、位相の解析も有効である。

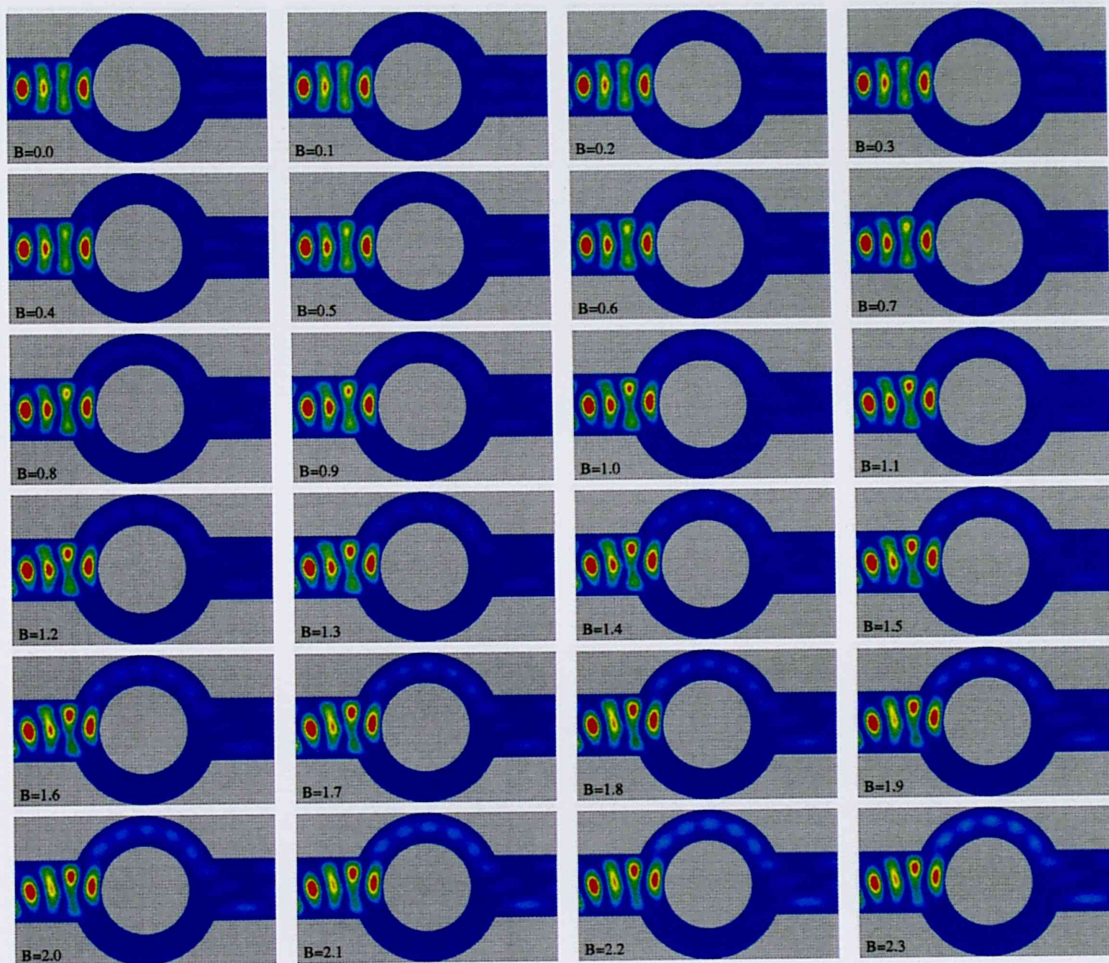


図 12.17:  $B = 0 \sim 2.3$  での確率密度

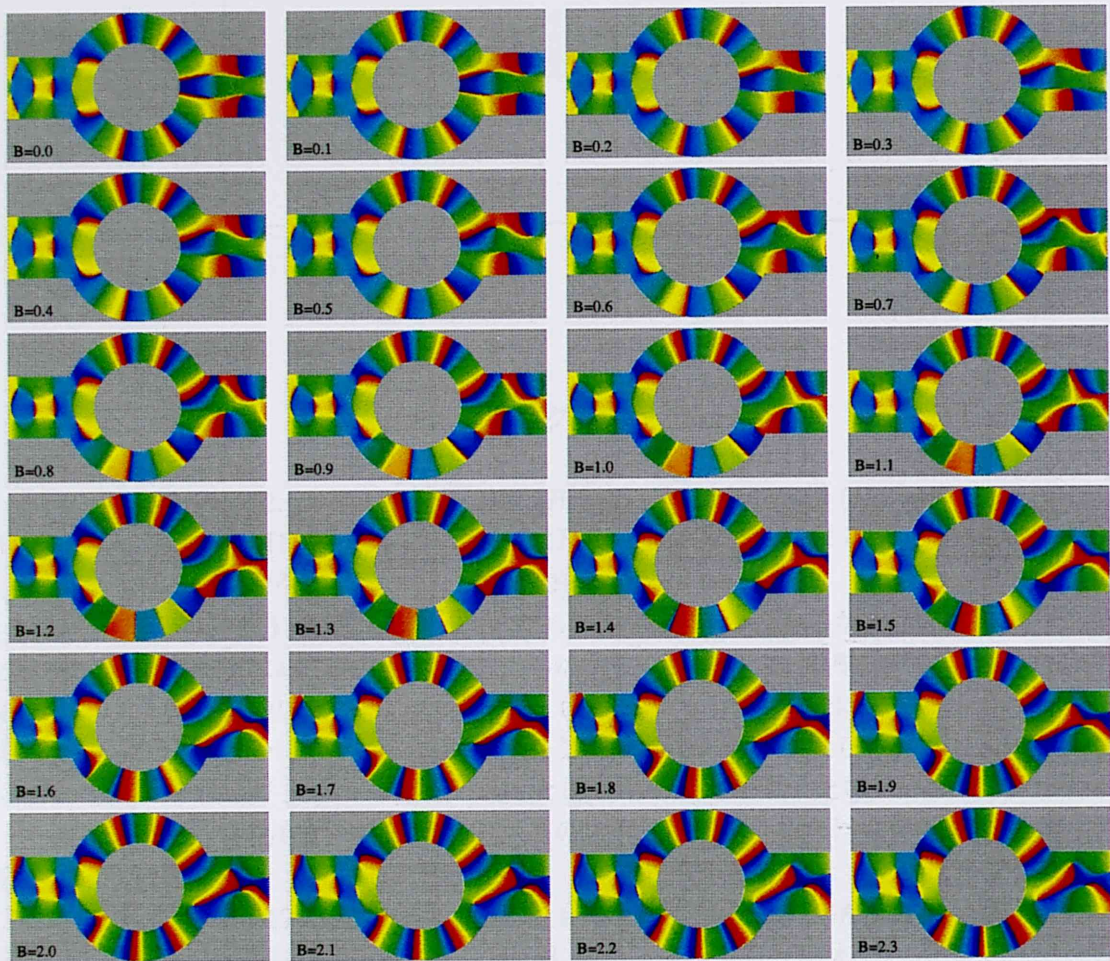


図 12.18:  $B = 0 \sim 2.3$  での位相



## 12.7 ポイントコンタクトの形成

### 12.7.1 ゼーマン効果多光子過程で成る点接触

最後に、ポイントコンタクトに一般化を施し、各種の結果を示す。ポイントコンタクトの形成は、磁束管と異なって図 119 である。(12.13) 式の  $\nu$  が多光子過程  $\nu = 0.7E_0$ ,  $E_0 = \hbar\omega = 10^6$  eV で  $\nu = 0.7$  である。

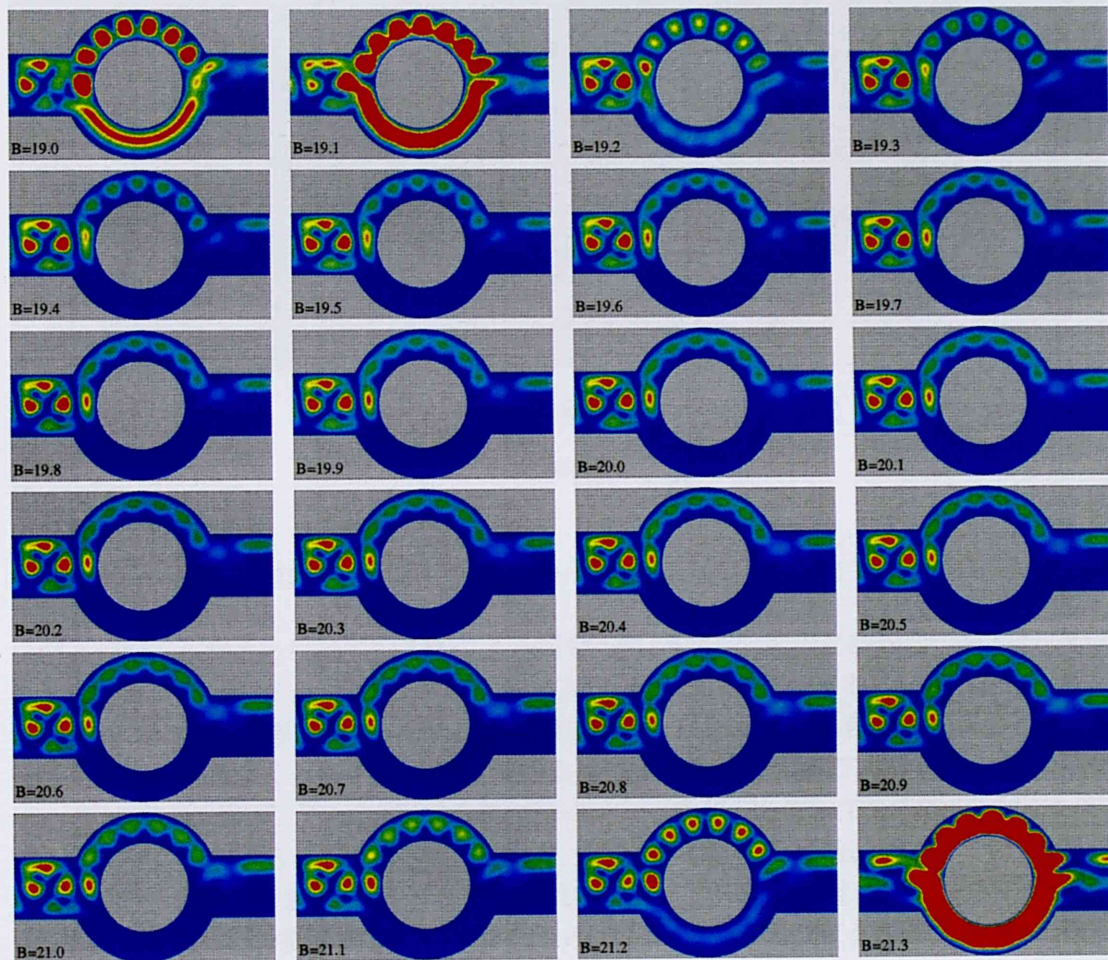


図 12.19:  $B = 19 \sim 21.3$  での確率密度

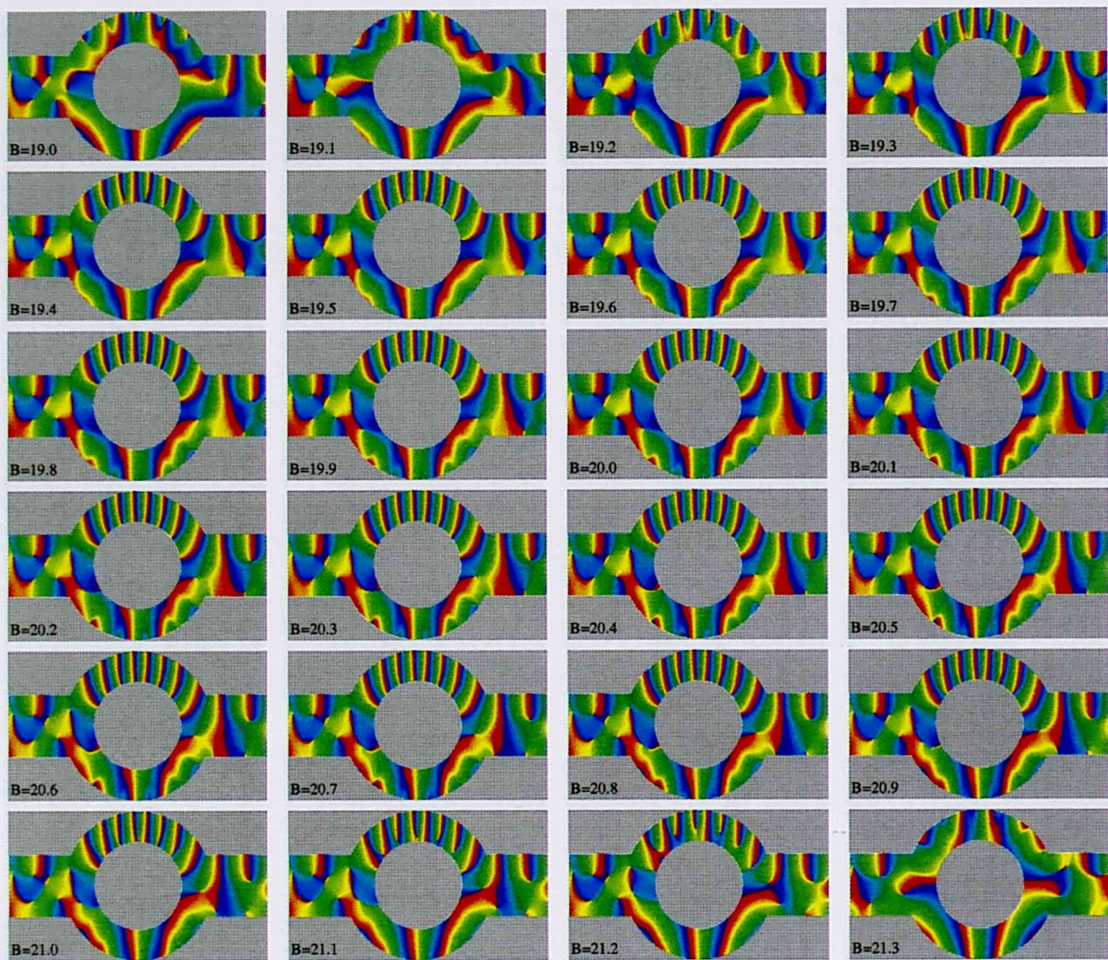


図 12.20:  $B = 19 \sim 21.3$  での位相

## 12.7 ポイントコンタクト

### 12.7.1 ゼーマンエネルギーを考慮しない場合

最後に、ポイントコンタクトに一様磁場を印可した場合の結果を示す。ポイントコンタクトの形状は、11.7節と同じで図11.9である。(11.7.1)式のパラメータは  $E_0 = 5^2$ ,  $V_0 = 0.7E_0$ ,  $L_1 = L_2 = W_0 = d$  で  $\Delta = d/4$  とした。

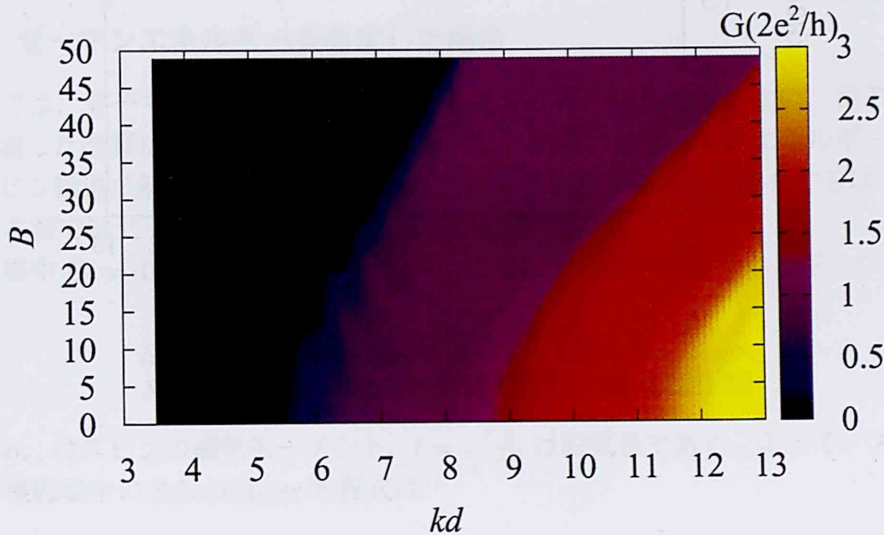


図 12.21: 一様磁場中ポイントコンタクトのコンダクタンス

図 12.21 は、波数  $kd$  と磁場  $B$  を変えた場合のコンダクタンスである。ポイントコンタクトによってコンダクタンスは波数に対して階段状に増加するが、磁場が増加すると、磁場と波数に対して線形に減少していく。これは、QPC の最も細い部分を通る電子の伝導モードが磁場によって制限されるためであると考えられる。つまり、(12.3.2) 式のサイクロトロン半径を固定した場合に対応し、 $B = \frac{d}{r_c} kd$  より磁場と波数に比例する。また、コンダクタンスが 0 から 1 へと増加する境界、つまり基本モードが透過し始める境界に注目すると、 $B = 10$  から 20 あたりの境界が乱れている。この構造を見るため、図 12.22 に図 12.21 の  $B = 20$  での横断図を示す。これを見ると、確かにコンダクタンスがあがり始める境界でいくつかの小さなピークやディップが見られる。

そこで、図 12.23 に最初のディップ部分である  $kd = 6.4$  での確率密度を示す。これから、入射した電子は上の壁に沿って進み、ポイントコンタクトを通過できずにその形状に沿って下の壁へと進む。そして、下の壁に沿って反射波となり元のリード線に戻っていく様子が分かる。これは、古典的なスキッピング軌道を考えてわかりやすい。つまり、上の壁に沿ってスキッピング運動しながら進んできた電子は、スキッピング軌道によりポイントコンタクトの穴を飛び越え下の壁に進み、そのままスキッピング運動しながら帰っていく。この波数では、そのような軌道に対応しているため反射が強くなったものだと考えられる。

一方、コンダクタンスが上がりきった点である  $kd = 6.9$  での確率密度を図 12.24 に示す。これを見ると、 $kd = 6.4$  の場合とほとんど波数は変わっていないにも関わらず、ほぼ

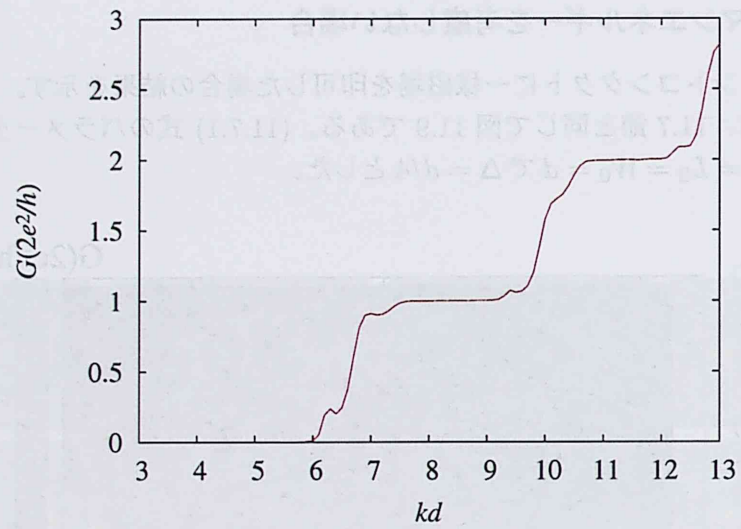


図 12.22: 図 12.21 の  $B = 20$  でのコンダクタンス

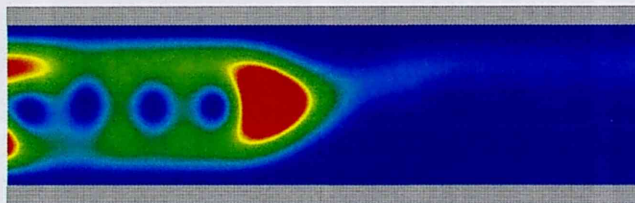


図 12.23:  $kd = 6.4$ ,  $B = 20$ , 入射モード  $\alpha = 1$  での確率密度

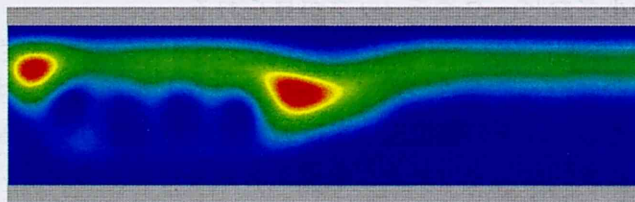


図 12.24:  $kd = 6.9$ ,  $B = 20$ , 入射モード  $\alpha = 1$  での確率密度

全て透過している。この場合には、ポイントコンタクトの穴を飛び越えない軌道に対応しており、それによってポイントコンタクトを通過したものだと考えられる。

このように、磁場がそれほど強くなくエッジ状態が完全には形成されていない場合は、コンダクタンスにスキッピング軌道に起因する構造が現れる。しかしながら、図 12.21 を見ると分かるようにさらに磁場が強くなると完全にエッジ状態が形成されるため、このような構造は消えてしまう。

## 12.7.2 ゼーマンエネルギーを考慮した場合

これまでは、ゼーマンエネルギーをフェルミエネルギーに含めてしまい、電子のスピン状態を考慮した計算は行ってこなかった。しかし、実際にはゼーマンエネルギーによって電子のスピン縮退が解け、アップスピンとダウンスピンとで異なる伝導をするはずである。そこで、本節ではゼーマンエネルギーを含めた計算を行う。

一様磁場中  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  のハミルトニアンには以下のゼーマンエネルギーが加わる。

$$E_z = -\mathbf{m}_s \cdot \mathbf{H} = \mu_B \sigma_z \frac{B}{\mu_0} = \frac{\hbar}{2m} eB \sigma_z = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \sigma_z \quad (12.7.1)$$

ここで、 $\mathbf{m}_s$  はスピンの磁気モーメント、 $l = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$  は磁気長である。よって、スピンを考慮した一様磁場中の Schrödinger 方程式は

$$\left( \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \pm \frac{\hbar^2}{2ml^2} \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} = E \psi_{\uparrow, \downarrow} \quad (12.7.2)$$

となる。(12.1.3) 式と同様にスケーリングを行えば、

$$\begin{cases} (-\nabla^2 + 2iBy \frac{\partial}{\partial x} - B + B^2 y^2) \psi_{\uparrow} = (kd)^2 \psi_{\uparrow} \\ (-\nabla^2 + 2iBy \frac{\partial}{\partial x} + B + B^2 y^2) \psi_{\downarrow} = (kd)^2 \psi_{\downarrow} \end{cases} \quad (12.7.3)$$

となる。(12.7.3) 式に対して、境界要素法を適用する。

図 12.25 にゼーマンエネルギーを考慮した場合のコンダクタンスとスピン分極率を示す。パラメータは、図 12.22 と同じである。ここで、 $G_{\uparrow} = G_{\uparrow, \uparrow} + G_{\downarrow, \uparrow}$ 、 $G_{\downarrow} = G_{\uparrow, \downarrow} + G_{\downarrow, \downarrow}$  で、 $P = |(G_{\uparrow} - G_{\downarrow}) / (G_{\uparrow} + G_{\downarrow})|$  である。また、 $G$  はゼーマンエネルギーを考慮しない場合、つまり図 12.22 のコンダクタンスである。このように、ゼーマン分離によって  $G$  から  $G_{\uparrow}$  と  $G_{\downarrow}$  は少しずつづれる。それによって、ダウンスピンへのスピン分極が生じる。興味深いのは、そのスピン分極率が 1、1/3、1/5 と  $n = 1, 2, 3, \dots$  とすれば  $1/(2n-1)$  で階段状に減少していくことである。このような構造は、11.8 節の磁性ポイントコンタクトにおいても見られた。

また、 $G_{\downarrow}$  に注目してみると、コンダクタンスがあがった直後に  $G$  や  $G_{\uparrow}$  には見られない乱れが見られる。

そこで、その乱れのピーク部分である  $kd = 6.1$  での波動関数の確率密度を示すと図 12.26 となる。この波数  $kd = 6.1$  では、1 番目のモードのみが存在しており、2 番目のモード  $2 \times \pi \approx 6.28$  はまだ存在していない。しかし、磁場がかかっている領域では、(12.7.3) 式よりゼーマンエネルギーによってエネルギーがあがり 2 番目のモードが存在する。そのた

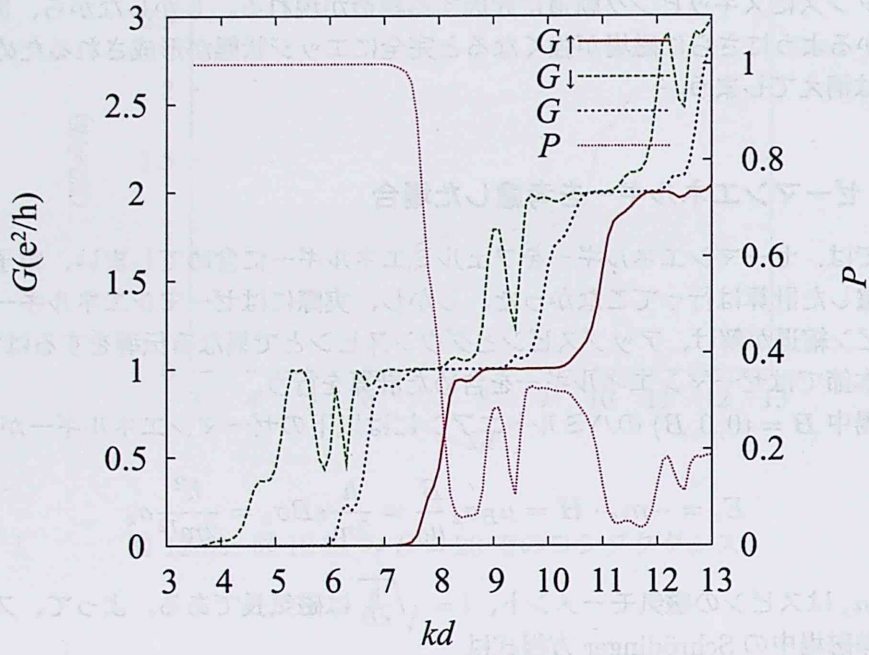


図 12.25:  $B = 20$  でのコンダクタンスとスピン分極率

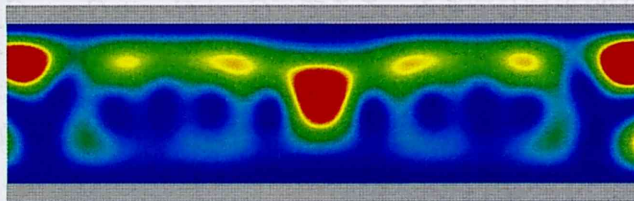


図 12.26:  $kd = 6.1$ 、入射モード  $\alpha = 1$ 、ダウンスピンで入射した場合のダウンスピンでの確率密度  $|\psi_1|^2$

め、基本モードで入射してきた電子は、ポイントコンタクトによって散乱されいくらかが2番目のモードとなり左のリード線へと戻ってくる。そのとき、リード線には磁場がかかっていないためリード線の内部では2番目のモードが存在できず、リード線との境界部分で2番目のモードは0となる。それによって、ポイントコンタクトとリード線との境界部分でモードのマッチングがうまくいかずに反射が起き、図 12.25 のコンダクタンスに現れたものだと考えられる。ただし、実験ではこのように磁場をシャープに印可することはほとんどないと思われるので、このような構造は現れないと考えられる。

## 第13章 ラシュバスピ軌道相互作用がある 場合の有限要素法

### 13.1 弱形式

近年、2次元電子系でのスピン状態を操作する効果として、ラシュバスピ軌道相互作用が注目されている。[43] ラシュバスピ軌道相互作用は、2次元電子系に印可された外部電場により系の対象性が乱れ、それにより生じる相対論的な効果である。xy面内を伝導する系において、ラシュバスピ軌道相互作用は

$$H_{RSO} = \frac{\alpha}{\hbar} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \hat{z} \quad (13.1.1)$$

と表せる。ここで、 $\alpha$ は外部電場に依存した定数、 $\boldsymbol{\sigma}$ はパウリのスピン行列、 $\mathbf{p}$ は運動量、 $\hat{z}$ はz軸方向の単位ベクトルである。よって、ラシュバスピ軌道相互作用を含めたSchrödinger方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} + \frac{\alpha}{\hbar} (p_y \sigma_x - p_x \sigma_y) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = (E - V) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (13.1.2)$$

となる。長さのスケール  $d$  で無次元化すれば、

$$-\hat{\nabla}^2 \psi_{\uparrow, \downarrow} - i\hat{\alpha} \left( \frac{\partial}{\partial \hat{y}} \pm \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \right) \psi_{\downarrow, \uparrow} = (kd)^2 \psi_{\uparrow, \downarrow}, \quad (13.1.3)$$

と表せる。ここで、 $\hat{\nabla} = d\nabla$ 、 $\hat{\alpha} = \frac{2m^*d}{\hbar^2}\alpha$ 、 $\hat{x} = \frac{x}{d}$ 、 $\hat{y} = \frac{y}{d}$ 、 $(kd)^2 = \frac{2m^*d^2}{\hbar^2}(E - V)$ とした。ただし、今後は $\hat{\cdot}$ を省略して書く。スピン縮退が解けるので、波動関数はスピノルとなる。また、(13.1.3)式の左辺第2項がラシュバ効果に相当し、波動関数のスピンの反対になる。

つぎに、任意の形状に対して(13.1.3)式を数値計算する方法を検討する。既に、強束縛近似法による解析は行われており、量子細線中にポイントコンタクトを設けることにより高いスピン分極率が得られることが知られている。[43] ただし、強束縛近似法は系を強く離散化した手法であり、電子はそれぞれのサイトで局在しているものと考え、サイト間を飛び移ることによって系を伝導する場合を想定している。一方、境界要素法や有限要素法は系全体に波動関数が広がっている場合を想定している。メソスコピック系は系全体でコヒーレントであるので、後者の方がより現実に即した解析手法であると考えられる。そこで、本研究では境界要素法や有限要素法を用いた解析を行う。

しかしこの場合、境界要素法は(13.1.3)式のグリーン関数が分からないので直接適用することはできない。そこでラシュバスピ軌道相互作用がない場合のグリーン関数を用いて、逐次的に積分を実行すれば境界要素法を適用できるが、その場合にはラシュバ項を含



んだ体積積分の項が現れる。そのため体積積分の評価法や、逐次計算の収束性などを考慮すると精度良く計算できない可能性がある。

そこで、本研究では (13.1.3) 式を有限要素法により解く。[44] (13.1.3) 式に試行関数  $\bar{\psi}_{\uparrow,\downarrow}$  を乗じて考えている領域  $\Omega$  で積分し、ガウスの定理を適用すれば

$$\int_{\Omega} \nabla \bar{\psi}_{\uparrow,\downarrow} \cdot \nabla \psi_{\uparrow,\downarrow} - (kd)^2 \bar{\psi}_{\uparrow,\downarrow} \psi_{\uparrow,\downarrow} - i\alpha \bar{\psi}_{\uparrow,\downarrow} \left( \frac{\partial}{\partial y} \pm i \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_{\uparrow,\downarrow} d\Omega = \sum_n^2 \int_{\Gamma_n} \bar{\psi}_{\uparrow,\downarrow} \frac{\partial}{\partial n} \psi_{\uparrow,\downarrow} d\Gamma_n. \quad (13.1.4)$$

を得る。

ただし、波動関数はアップスピンとダウンスピンで2種類あるので、係数行列の大きさはスピンを考えない場合と比べて4倍となる。(13.1.4) 式の左辺第1,2項と右辺は (11.1.4) 式と同様に計算でき、それらは全体の行列のスピンに対する対角成分に入る。第3項は非対角成分に入り、それがスピントリップを表す。

## 13.2 境界条件

図 13.1 に境界条件を示す。ラッシュバ効果は考えている領域  $\Omega$  でのみ  $\alpha \neq 0$  とし、リー

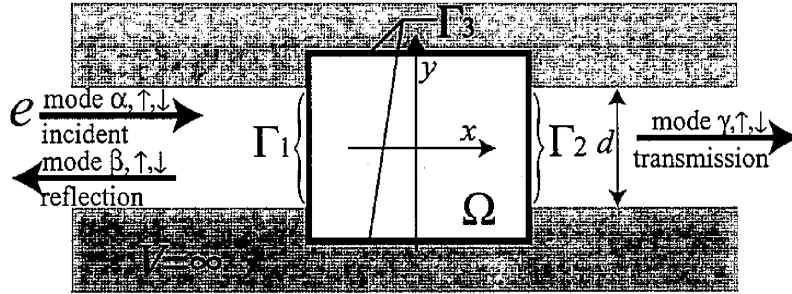


図 13.1: ラッシュバ効果がある場合の境界条件

ド線では  $\alpha = 0$  とする。また、電子は左のリードより  $\alpha$  モードで、 $z$  方向のスピンが  $\pm \frac{\hbar}{2}$  の固有値を持つとしたときのアップ、もしくはダウンスピンで振幅1で入射するものとする。アップスピンを+、ダウンスピンを-とおけば、 $\delta_{\pm,\pm'}$  は入射するスピンを  $\pm$  とし、 $\pm'$  が入射するスピンと同じスピンを取るときのみ1となり、ほかは0とする。これらより、境界条件は

$$\Gamma_1 : \psi_{\pm'} = \delta_{\pm,\pm'} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) e^{ik_{\alpha}x} + \sum_{\beta} r_{\alpha\beta,\pm\pm'} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) e^{-ik_{\beta}x} \quad (13.2.1)$$

$$\Gamma_2 : \psi_{\pm'} = \sum_{\gamma} t_{\alpha\gamma,\pm\pm'} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) e^{ik_{\gamma}x} \quad (13.2.2)$$

$$\Gamma_3 : \psi_{\pm'} = 0, \quad (13.2.3)$$

となる。

### 13.3 量子細線モデル

まず最初に、図 13.2 のようにリード線と同じ幅の量子細線のモデルを解析する。ラシュバ項の大きさ  $\alpha$  は考えている系のみラシュバ項があるものとし  $\alpha = 0.4$ 、リード部では  $\alpha = 0$  とする。

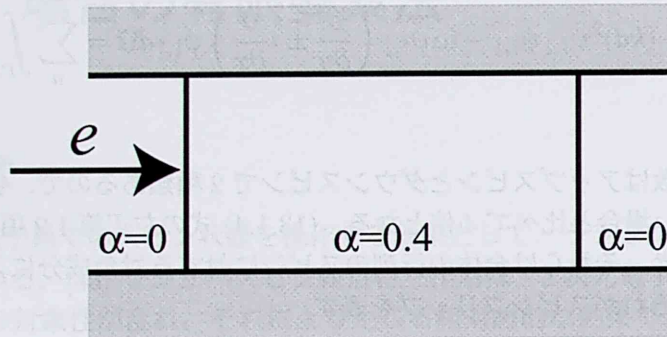


図 13.2: 量子細線モデル

図 13.3 に、この場合の透過確率を示す。ここで、 $T_{n,\uparrow,\downarrow}$  はモード  $n$ 、アップスピンで入

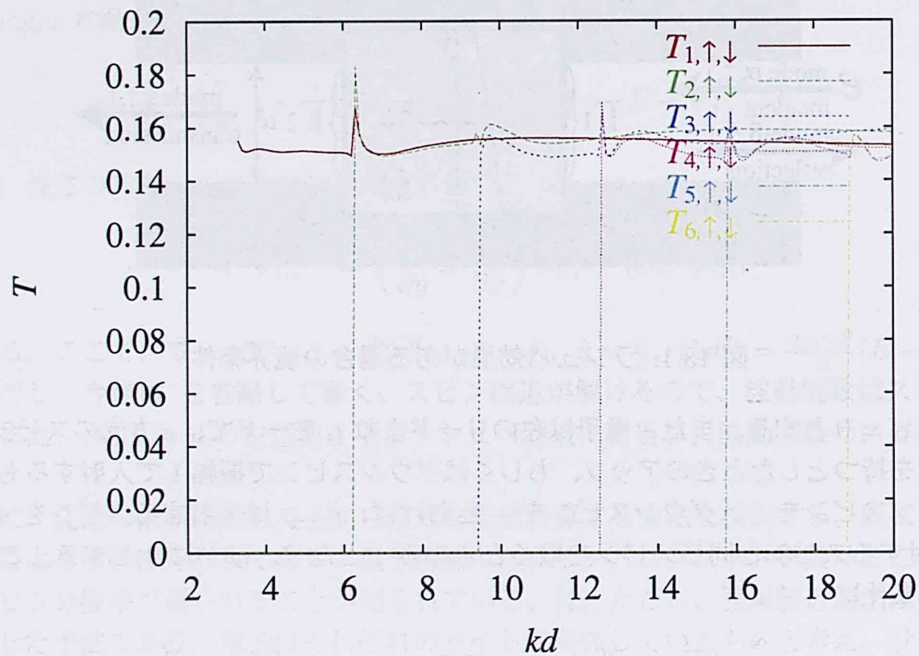


図 13.3:  $\alpha = 0.4$  でのそれぞれの入射モード  $n$  に対する透過確率  $T_{n,\uparrow,\downarrow}$

射し、ダウンスピンで透過する透過確率を示す。図 13.3 では、 $T_{n,\uparrow,\downarrow}$  のみを示したが、他の透過確率との関係は以下の関係が成り立つことが分かった。

$$T_{n,\uparrow,\uparrow} = T_{n,\downarrow,\downarrow}, \quad T_{n,\uparrow,\downarrow} = T_{n,\downarrow,\uparrow} \quad (13.3.1)$$

つまり、この場合にはスピン分極が起こらない。この関係は、 $\alpha$  を大きくしても成り立つ。また、スピン反転する割合は図 13.3 を見てみると、モードの立ち上がり付近が乱れること以外は波数  $kd$  によらずほぼ一定である。その割合はほぼラシュバ項の大きさ  $\alpha$  で決まる。

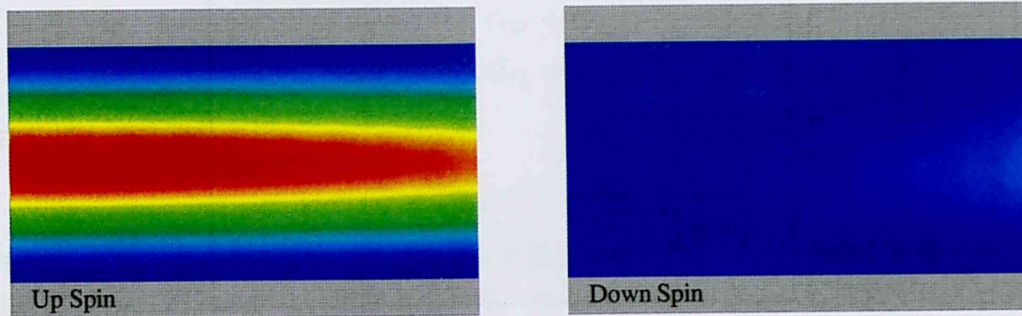


図 13.4:  $kd = 15$ 、基本モード、アップスピンで入射した場合の確率密度 (左図がアップスピン、右図がダウンスピン)

図 13.4 に、 $kd = 15$ 、基本モード、アップスピンで入射した場合の確率密度を示す。ラシュバ項によって、系の内部で少しずつスピン反転していく様子がわかる。

### 13.4 ポイントコンタクト

次に、量子細線中にポイントコンタクトを導入した場合の解析を行う。ポイントコンタクトの形状は、11.7 節と同じ形状を用いた。ただし、ラシュバ効果は図 13.5 において四

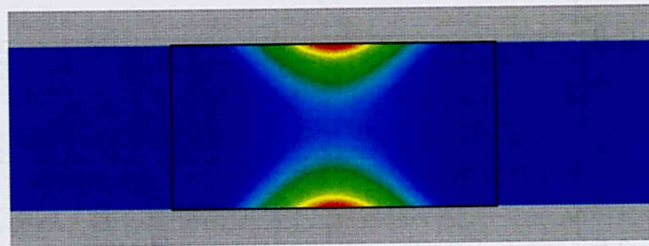


図 13.5: ポイントコンタクト

角の枠で囲まれている領域のみ存在し、ほかの領域では  $\alpha = 0$  とした。

図 13.6 は、ラシュバ項の大きさ  $\alpha = 0.4$  でのそれぞれの方向から観測したスピンにおけるコンダクタンスである。 $G_{\uparrow\downarrow}$  はアップスピンで入射した電子が、ダウンスピンで透過する場合のコンダクタンスであり、入射モード  $\alpha$ 、透過モード  $\gamma$  としたとき

$$G_{\uparrow\downarrow} = \frac{2e^2}{h} \sum_{\alpha\gamma} \frac{k_\gamma}{k_\alpha} |t_{\alpha\beta,\uparrow\downarrow}|^2 \quad (13.4.1)$$

で表される。また、 $G_\uparrow$ 、 $G_\downarrow$  はそれぞれ

$$G_\uparrow = G_{\uparrow\uparrow} + G_{\uparrow\downarrow}, \quad G_\downarrow = G_{\downarrow\downarrow} + G_{\downarrow\uparrow} \quad (13.4.2)$$

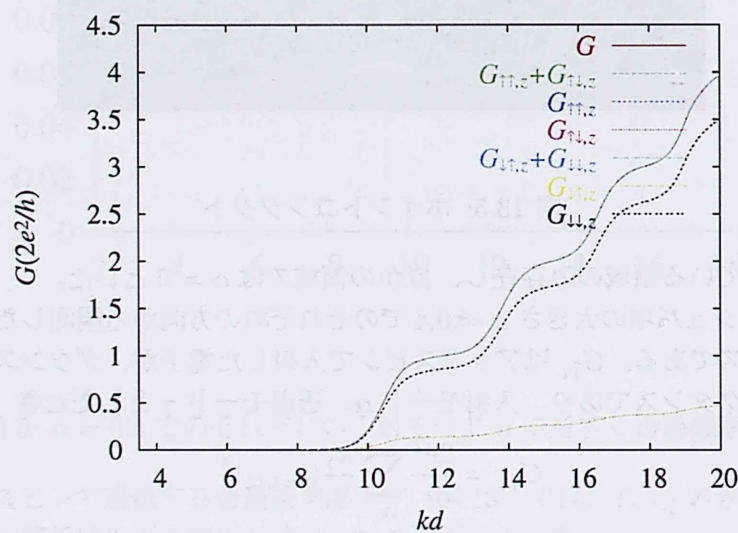
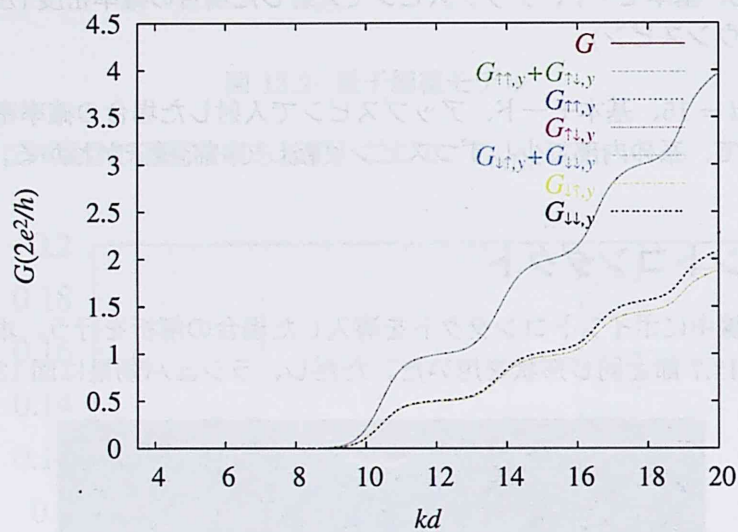
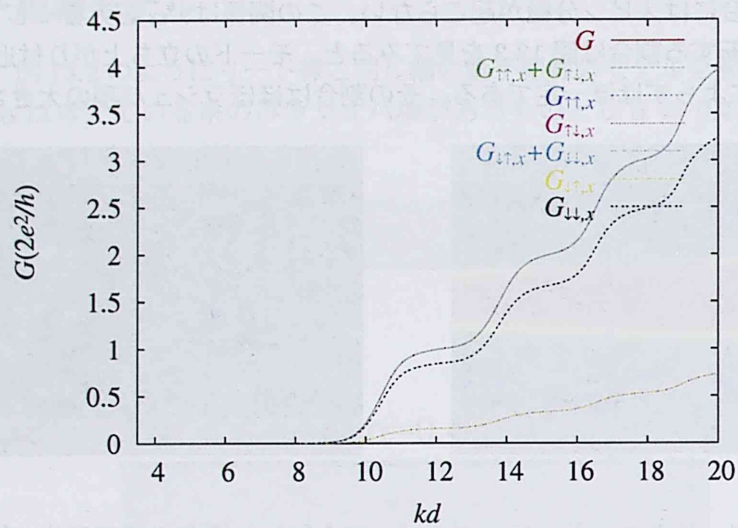


図 13.6:  $\alpha = 0.4$  での各方向のスピンの対するコンダクタンス

であり、 $G$  はラシュバ効果がない場合での透過確率である。

まず、図 13.6 より、 $\alpha = 0.4$  ではスピンの観測方向にかかわらず次の関係が成り立つことがわかる。

$$G_{\uparrow\uparrow} = G_{\downarrow\downarrow} \quad (13.4.3)$$

$$G_{\uparrow\downarrow} = G_{\downarrow\uparrow} \quad (13.4.4)$$

さらに、この関係より

$$G = G_{\uparrow} = G_{\downarrow} = G_{\uparrow\uparrow} + G_{\uparrow\downarrow} = G_{\downarrow\uparrow} + G_{\downarrow\downarrow} \quad (13.4.5)$$

も成り立つ。つまり、どちらかのスピン状態しか持たない完全に分極した電子を入射した場合、ラシュバ効果がない場合と比べて、全体のコンダクタンスは変えずにスピンがある程度混ざり合った状態で伝導する。逆に、スピンが混ざり合った分極していない電子を入射させた場合のコンダクタンスはアップスピンでもダウンスピンでも同じである。つまり、スピントリップは起こるがアップからダウンスピン、ダウンからアップスピンへの確率が同じなので、打ち消しあってしまいスピン分極は起きない。さらに、アップからアップスピンで透過する確率とダウンからダウンスピンで透過する確率も等しいので、磁化ベクトルがある場合と違ってその差からスピン分極した電子を得ることも出来ない。このように、 $\alpha$  が小さな場合はラシュバ効果によるスピン分極は期待できない。

次に、(3.5.10) 式に従い、スピン分極率を

$$P = \left| \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}} \right| \quad (13.4.6)$$

と定義する。このときのスピン分極率は図 13.7 となる。このように、スピンの向き、波数にかかわらず 0 となる。

次に、図 13.6 のスピンの向きによる違いに注目する。まず、 $x$  方向と  $z$  方向はほとんど変わらない。スピントリップするコンダクタンス  $G_{\uparrow\downarrow}$ 、 $G_{\downarrow\uparrow}$  の割合も少なく、あまりスピントリップせずに入射したスピンでそのまま透過していく。

これに対して、 $y$  方向はスピントリップする割合がかなり高く、スピントリップせずそのまま透過する確率と同程度の大きさとなっている。

$\alpha = 0.4$  では、スピン分極はほぼ見られなかった。次に、ラシュバ項の大きさを大きくした場合の結果を示す。図 13.8 は  $\alpha = 1.0$  での各方向から観測したスピンのコンダクタンスである。 $x$ 、 $z$  方向に関しては  $\alpha = 0.4$  の場合と同様に (13.4.3) 式、(13.4.4) 式の関係が成り立っている。しかし、 $y$  方向に関しては  $G_{\uparrow\uparrow}$  と  $G_{\downarrow\downarrow}$ 、 $G_{\uparrow\downarrow}$  と  $G_{\downarrow\uparrow}$  が重なっておらず、それぞれ少しだけずれている。そこで、スピン分極率を表すと図 13.9 となる。 $x$ 、 $z$  方向は 0 であるが、 $y$  方向に関しては  $kd = 9.15$  付近で 0.06 近くのスピン分極が得られている。

図 13.10 と図 13.11 に基本モードで、図 13.12 と図 13.13 に 2 番目のモードで入射した場合の確率密度を示す。波数は両方とも  $kd = 9.15$  である。これを見ると、基本モードで入射した場合も 2 番目のモードで入射した場合も、 $|\psi_{\uparrow,\uparrow}|^2$  と  $|\psi_{\downarrow,\downarrow}|^2$ 、 $|\psi_{\uparrow,\downarrow}|^2$  と  $|\psi_{\downarrow,\uparrow}|^2$  がほぼ上下対称な確率密度を示しており、スピンに関して対称である。この場合のスピン分極率は  $P \approx 0.06$  であるため、波動関数にすればその差はほとんど現れてこない。しかし注意深く見ると、基本モードで入射した場合の  $|\psi_{\uparrow,\downarrow}|^2$  と  $|\psi_{\downarrow,\uparrow}|^2$  はポイントコンタクトの右側部分の波動関数の振幅の大きさが若干異なっている。

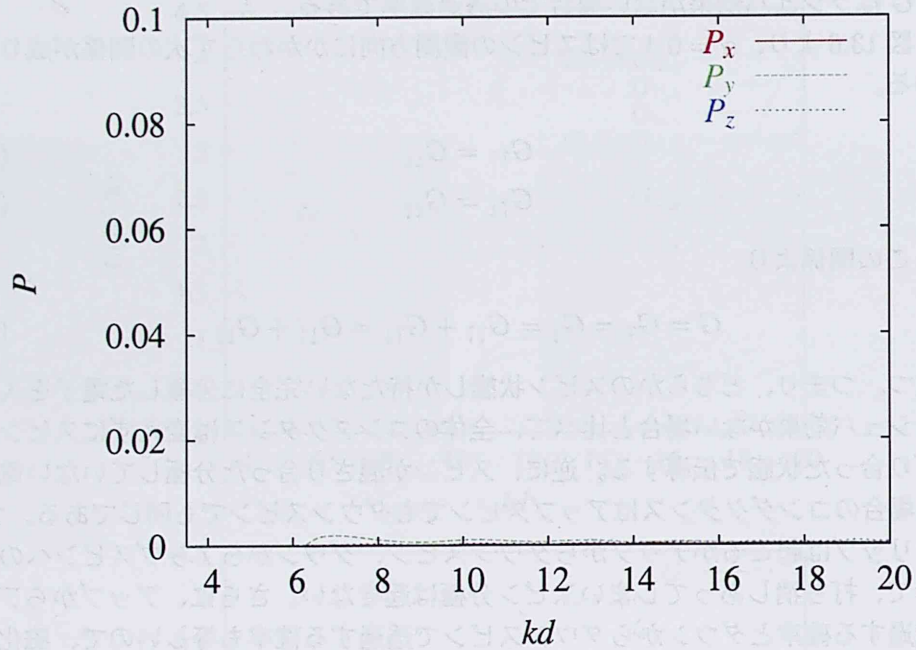


図 13.7:  $\alpha = 0.4$  での各方向に対するスピン分極率

そこで、この差を強調して考えると以下のように解釈できる。(13.1.2) 式のハミルトニアンを非摂動  $H_0$  と摂動  $H'$  とに分けて考える。

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{\hbar} p_x \sigma_y + V \quad (13.4.7)$$

$$H' = \frac{\alpha}{\hbar} p_y \sigma_x \quad (13.4.8)$$

ここでリード線は  $x$  方向に取り付けられており、 $p_y$  は  $p_x$  よりも十分に小さいので、 $H'$  を摂動とみなせるとした。

波動関数  $\psi(x, y)$  を変数分離して  $\psi(x, y) = \psi(x)\psi(y)$ 、ポテンシャルを  $V(x, y) = V(x) + V(y)$ 、エネルギーを  $E_{\pm} = E_{\pm, x} + E_{\pm, y}$  とすれば非摂動部分の Schrödinger 方程式は

$$\frac{p_x^2}{2m} \psi_{\pm}(x) \pm i \frac{\alpha}{\hbar} p_x \psi_{\mp}(x) = (E_{\pm, x} - V(x)) \psi_{\pm}(x) \quad (13.4.9)$$

$$\frac{p_y^2}{2m} \psi_{\pm}(y) = (E_{\pm, y} - V(y)) \psi_{\pm}(y) \quad (13.4.10)$$

となる。ここで、アップスピンを +、ダウンスピンを - とした。量子細線を想定し、 $V(x) = 0$ 、 $V(y)$  は幅  $d$  の井戸型ポテンシャルとすれば、

$$E_{n, \pm, y} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{d} \right)^2 \quad (13.4.11)$$

である。また、 $x$  方向の波数を  $k_x$ 、 $\sigma_y$  の固有関数を  $\chi_{\pm}$  とおけば、

$$\psi_{\pm}(x) = \exp(ik_x x) \chi_{\pm} \quad (13.4.12)$$

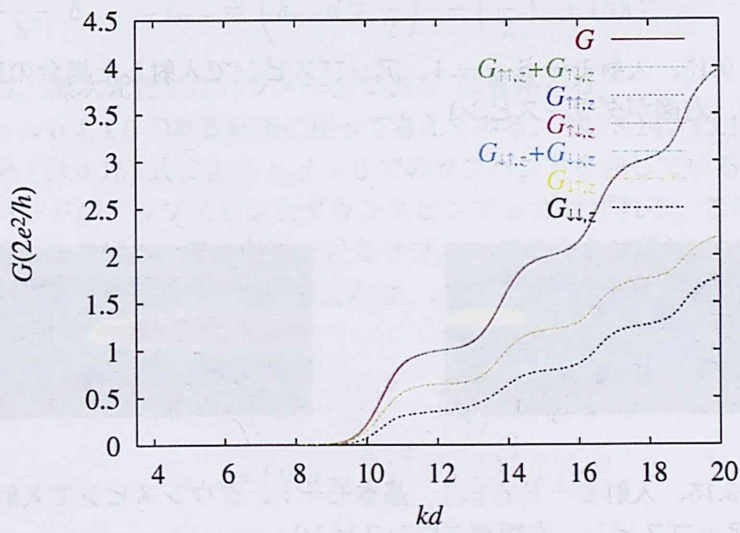
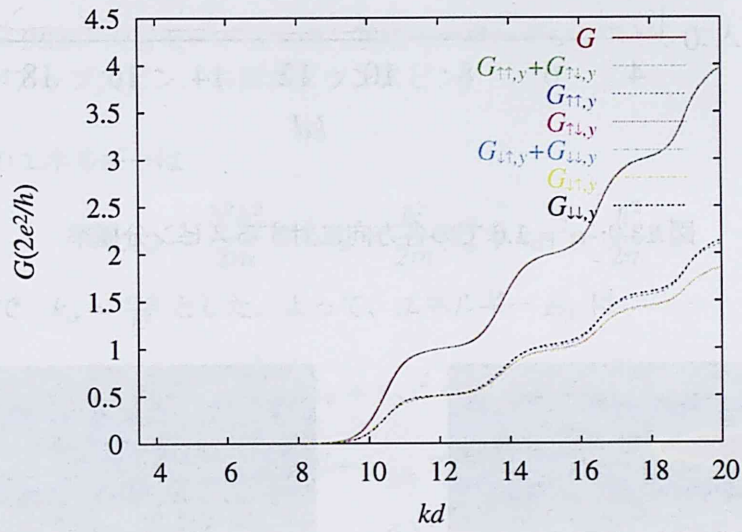
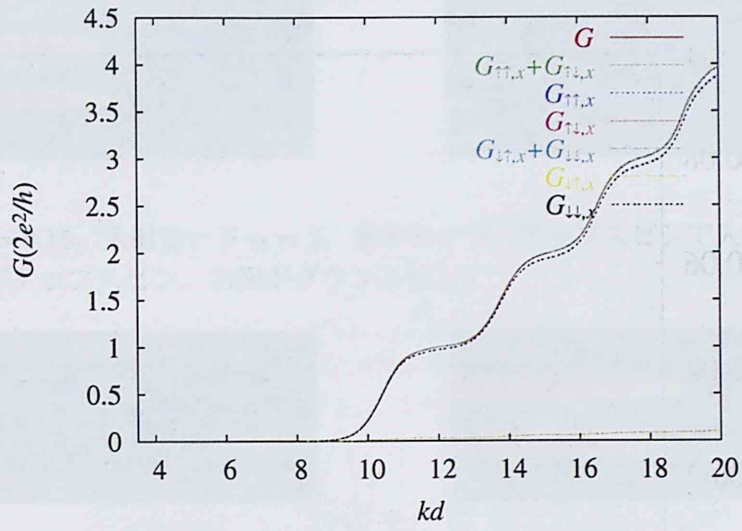


図 13.8:  $\alpha = 1.0$  での各方向のスピンの対するコンダクタンス

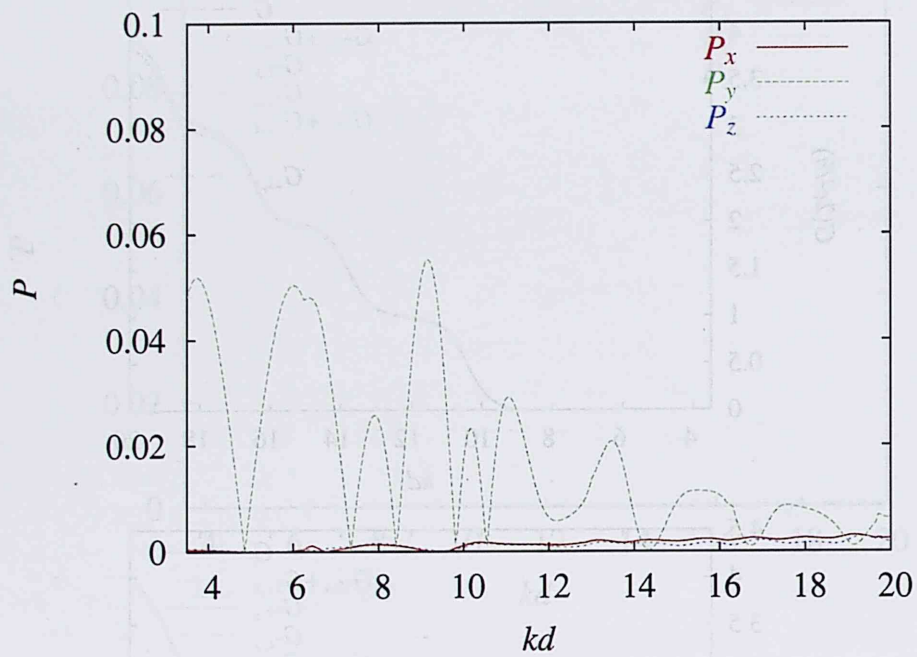


図 13.9:  $\alpha = 1.0$  での各方向に対するスピン分極率

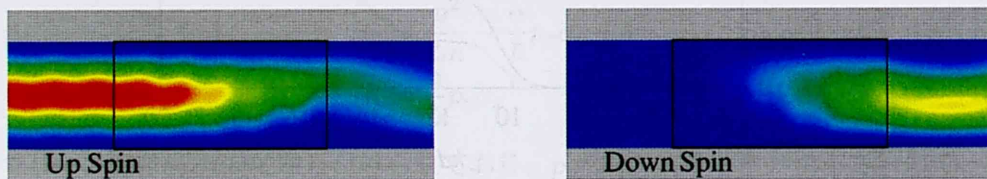


図 13.10:  $kd = 9.15$ 、入射モード  $\alpha = 1$ 、アップスピンで入射した場合の確率密度 (左図がアップスピン、右図がダウンスピン)

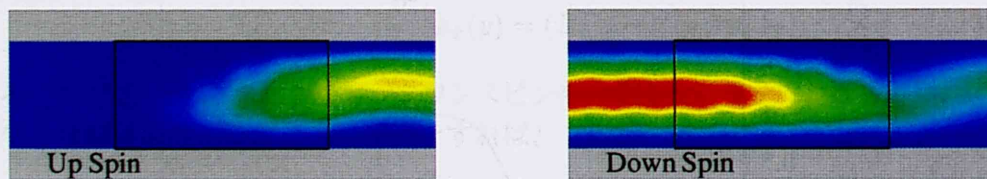


図 13.11:  $kd = 9.15$ 、入射モード  $\alpha = 1$ 、基本モード、ダウンスピンで入射した場合の確率密度 (左図がアップスピン、右図がダウンスピン)



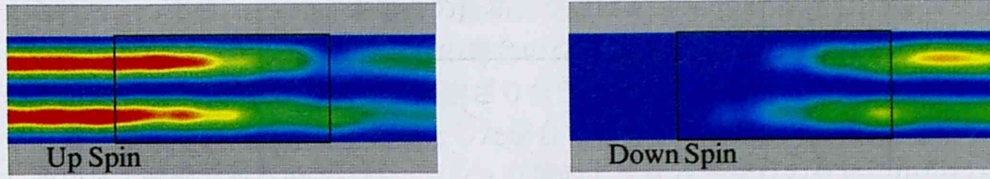


図 13.12:  $kd = 9.15$ 、入射モード  $\alpha = 2$ 、基本モード、アップスピンで入射した場合の確率密度 (左図がアップスピン、右図がダウンスピン)

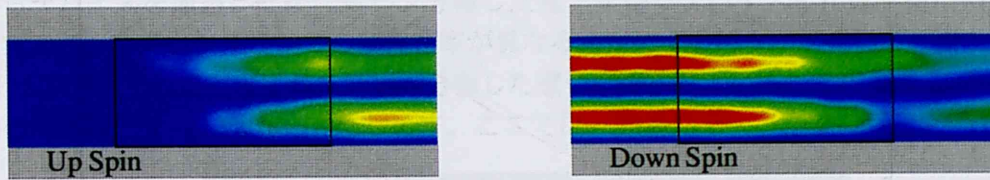


図 13.13:  $kd = 9.15$ 、入射モード  $\alpha = 2$ 、基本モード、ダウンスピンで入射した場合の確率密度 (左図がアップスピン、右図がダウンスピン)

より、 $x$  方向のエネルギーは

$$E_{n,\pm,x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \mp \alpha k_x = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x \mp k_\alpha)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} k_\alpha^2 \quad (13.4.13)$$

となる。ここで、 $k_\alpha = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$  とした。よって、エネルギー  $E_\pm$  は

$$E_{n,\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( (k_x \mp k_\alpha)^2 - k_\alpha^2 + \left( \frac{n\pi}{d} \right)^2 \right) \quad (13.4.14)$$

となる。これを、無次元化したエネルギー  $\epsilon_{n,\pm}$  で表せば、

$$\frac{2md^2}{\hbar^2} E_{n,\pm} = \epsilon_{n,\pm} = \left( k_{n,x}d \mp \frac{\hat{\alpha}}{2} \right)^2 - \left( \frac{\hat{\alpha}}{2} \right)^2 + (n\pi)^2 \quad (13.4.15)$$

となる。以降は、無次元化したパラメータで表し<sup>^</sup>は省略する。

さて、再び  $\alpha = 0.4, 1.0$  の計算結果に戻って考えてみる。図 13.14、13.15 は  $\alpha = 0.4, 1.0$  での非摂動部分 (13.4.15) 式による  $k_x d > 0$  でのサブバンドを表している。ラシュバ効果により、サブバンドがアップスピンとダウンスピンで  $\alpha$  だけずれる。このずれによって、図 13.15 では異なるスピン、モードにおけるサブバンドの交点が見られている。対して、図 13.14 では交点はない。一般的に最初の交点は、 $\epsilon_{2,+}$  と  $\epsilon_{1,-}$  のサブバンドにおいて存在する。このとき、

$$\begin{aligned} \epsilon_{2,+} &= \left( k_x d - \frac{\alpha}{2} \right)^2 - \left( \frac{\alpha}{2} \right)^2 + (2\pi)^2 \\ \epsilon_{1,-} &= \left( k_x d + \frac{\alpha}{2} \right)^2 - \left( \frac{\alpha}{2} \right)^2 + (\pi)^2 \end{aligned} \quad (13.4.16)$$

であるので、その交点は

$$k_x d = \frac{3\pi^2}{2\alpha} \quad (13.4.17)$$

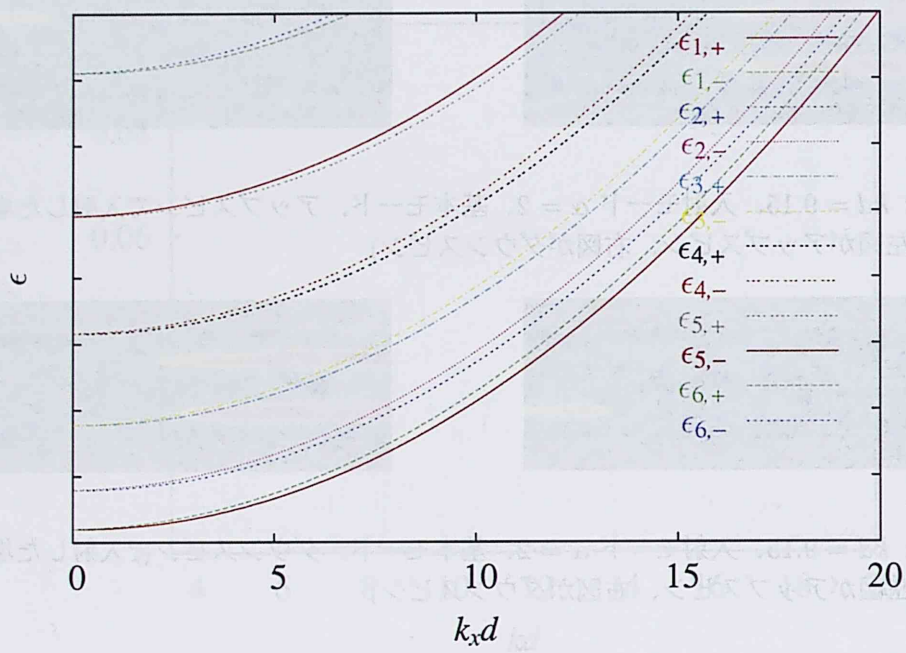


図 13.14:  $\alpha = 0.4$  での非摂動サブバンド

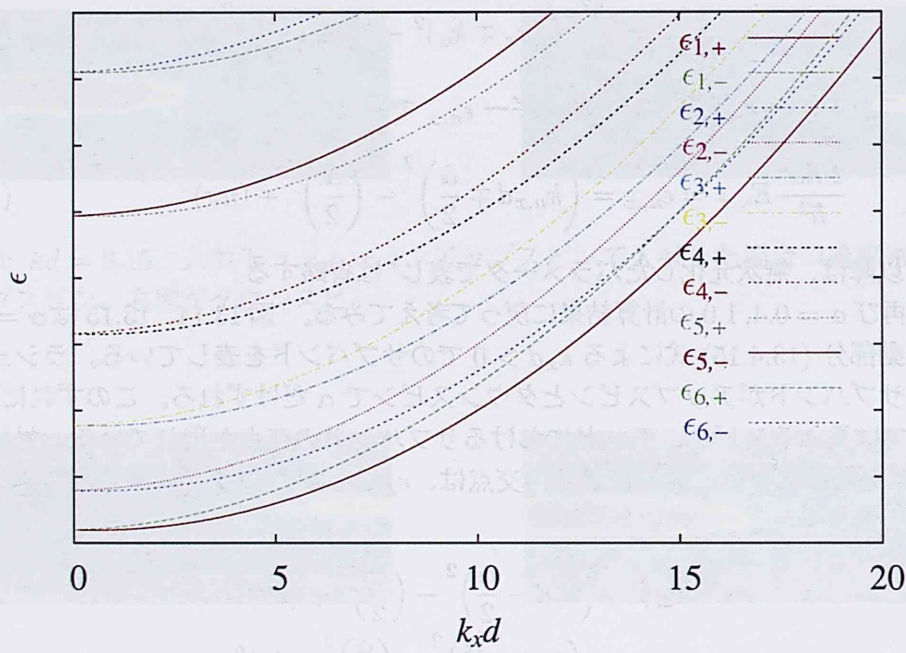


図 13.15:  $\alpha = 1.0$  での非摂動サブバンド

で与えられる。つまり、 $\alpha = 0.4$  の場合の最初の交点は  $k_x d \approx 37$  に存在し、 $kd = 3.5 \sim 20$  の間には存在しない。対して、 $\alpha = 1.0$  の場合の交点は  $k_x d \approx 14.8$  に存在する。この交点において、非摂動項  $H'$  によりスピンの混ざり合う。ただし、これらの交点はポイントコンタクトを考慮しない、系が量子細線とした場合での交点である。

もし系が量子細線である場合には、ラシュバ項の大きさ  $\alpha$  や交点の有無にかかわらずスピン分極は生じない。なぜなら、アップスピンからダウンスピンへの遷移確率とダウンスピンからアップスピンへの遷移確率が等しいため、それらが打ち消しあってしまうスピン分極した電子は得られない。つまり、スピンフィルターのようなスピン分極していない電子からデバイスを通じた後にスピン分極した電子を得るデバイスを作成するためには、アップスピンとダウンスピンでの遷移確率が異なるようにする何らかの機構が必要となる。

図 13.8 ではそれが実現され、スピン分極した電子が得られている。この理由を説明するための簡単なモデルを図 13.16 にしめす。ここでは、簡単にモードが 2 つのみある場合を

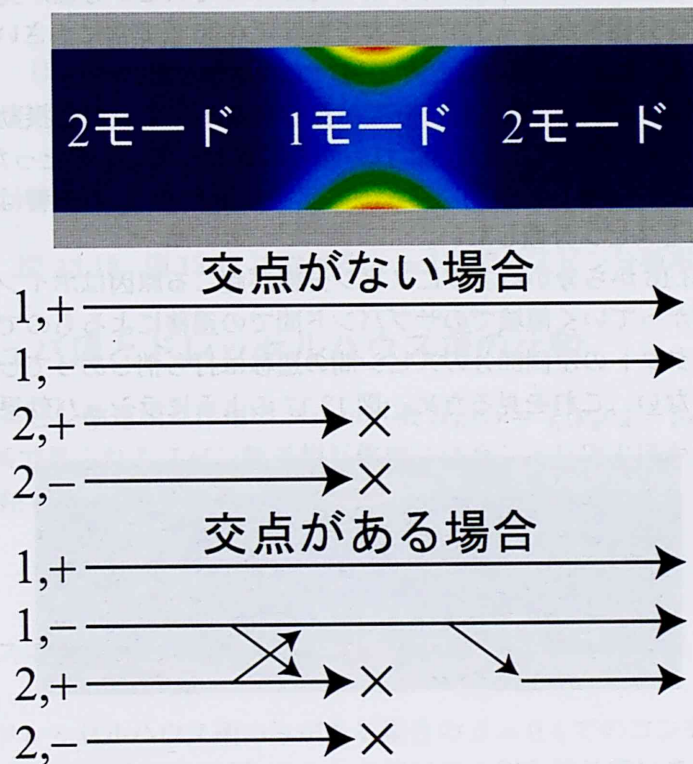


図 13.16: 交点がある場合とない場合における伝導モード

想定して説明する。あるフェルミエネルギー  $E$  をもって入射した電子は左のリード線ではモードが 2 つあるが、ポイントコンタクトにより徐々に幅が狭まり (13.4.11) 式の  $d$  が小さくなる。そのため  $y$  方向のエネルギーが大きくなり、 $E = E_x + E_y$  より  $x$  方向のエネルギーは小さくなる。サブバンドに沿って下がっていき、ついにはバンドの底よりも下がるとそのモードでは伝導できなくなる。そのため、図 13.16 ではポイントコンタクトにおいてモードが 1 つのみ存在するとする。

まず、最初にサブバンドに交点がない場合から見ていこう。基本モードはすべての領域

で存在するので、そのまま透過する。一方、2番目のモードはポイントコンタクトにより制限されて、全反射し透過しない。

次に、交点がある場合についてみる。アップスピンの基本モードと、ダウンスピンの2番目のモードは交点とは関係ないので交点がない場合と同様である。対して、ダウンスピンの基本モードとアップスピンの2番目のモードはポイントコンタクトにより、幅が狭まりサブバンドに沿って下がっていく。そして、交点においてスピンの混ざり合う。ただし、この時点ではアップからダウンスピン、ダウンからアップスピンへの遷移確率が等しいのでスピン分極は起こらない。その後、2番目のモードは伝導できなくなりこの時点で2番目のモードは空になる。ポイントコンタクトの最も狭い部分を通過し、徐々に幅が広がっていきと再び交点を通過する。このとき、ダウンスピン基本モードは存在するが、2番目のモードは存在しないのでダウンスピンからアップスピンへの遷移のみが起こる。これにより、スピン分極した電子が得られる。

これが、 $\alpha = 0.4$  ではスピン分極せず、 $\alpha = 1.0$  のみでスピン分極が見られた理由である。ただし、スピン分極率が  $\alpha = 1.0$  で最大でもほぼ 0.06 と非常に小さいため、図 13.10、13.11、13.12、13.13 にはその差はほとんど現れていなかった。

一方、図 13.9 では  $y$  方向のみスピン分極が見られるが、これは非摂動ハミルトニアン (13.4.7) 式において  $\sigma_y$  が現れており、この固有関数として  $\chi_{\pm}$  をとった。そのため、 $y$  方向スピンのみスピン分極し、摂動ハミルトニアンに現れる  $\sigma_x$  の影響は小さいのでほかの方向ではほとんどスピン分極しない。

ところで、図 13.16 から分かるようにスピン分極が起こる原因はポイントコンタクトの右側部分の幅が広がっていく領域でのサブバンド間での遷移によるものであると考えられる。ポイントコンタクトの左側部分のスピン間の遷移は打ち消しあってしまうため、スピン分極には影響しない。これを見るため、図 13.17 のようにラシュバ効果をポイントコン

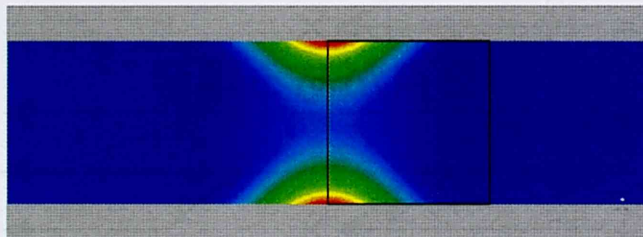


図 13.17: ポイントコンタクト、四角部分のみラシュバ効果を適用

タクトの右側部分のみに適用する。

図 13.18 は、このときのスピン分極率である。確かに、この場合にもスピン分極が起こることがわかる。このように、ラシュバ効果によるスピン分極では、幅の広がっていく形状がスピン分極に大きな役割を果たすと考えられる。

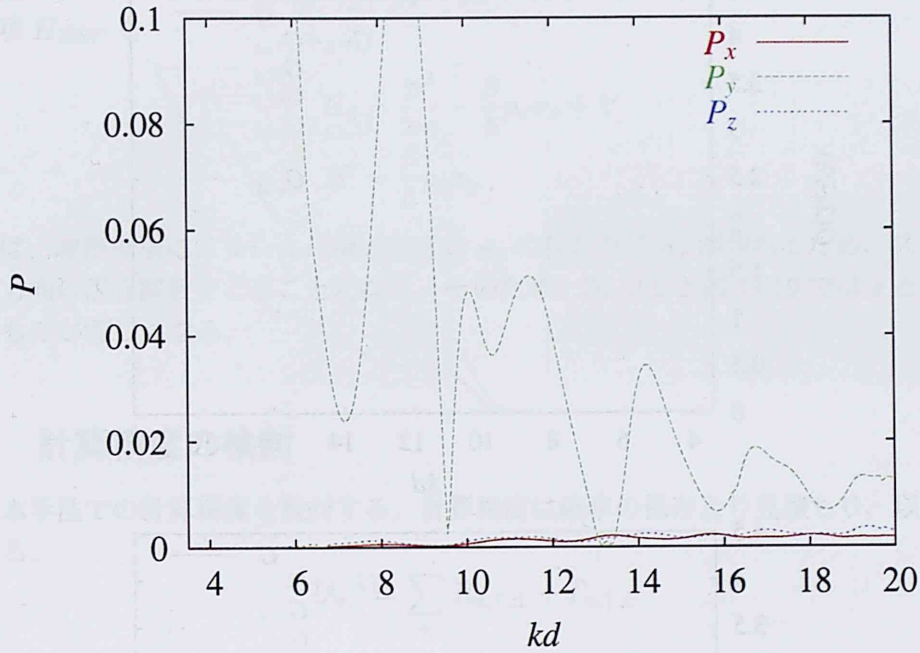


図 13.18: 図 13.17 における  $\alpha = 1.0$  でのスピン分極率

### 13.5 ラシュバ項とドレッセルハウス項の比較

これまで、スピン軌道相互作用のラシュバ項  $H_{RSO} = \frac{\alpha}{\hbar}(p_y\sigma_x - p_x\sigma_y)$  のみを見てきた。2次元電子系で見られるスピン軌道相互作用にはラシュバ項のほか、以下のドレッセルハウス項が存在することが知られている。

$$H_{DSO} = \frac{\beta}{\hbar}(-p_x\sigma_x + p_y\sigma_y) \quad (13.5.1)$$

ドレッセルハウス項  $H_{DSO}$  は、結晶構造の反転対称性の破れに起因するスピン軌道相互作用である。

図 13.19 は、ドレッセルハウス項のみがある場合の  $\beta = 0.4$  でのコンダクタンスである。ラシュバ項のみがある場合である図 13.6 と非常に良く似た振る舞いを示している。ここで、ラシュバ項のコンダクタンスを  $G_R$ 、ドレッセルハウス項のコンダクタンスを  $G_D$  とすれば、

$$G_{R,\uparrow\uparrow,(x,y)} = G_{R,\downarrow\downarrow,(x,y)} = G_{D,\uparrow\uparrow,(y,x)} = G_{D,\downarrow\downarrow,(y,x)} \quad (13.5.2)$$

$$G_{R,\uparrow\downarrow,(x,y)} = G_{R,\downarrow\uparrow,(x,y)} = G_{D,\uparrow\downarrow,(y,x)} = G_{D,\downarrow\uparrow,(y,x)} \quad (13.5.3)$$

$$G_{R,\uparrow\uparrow,z} = G_{R,\downarrow\downarrow,z} = G_{D,\uparrow\uparrow,z} = G_{D,\downarrow\downarrow,z} \quad (13.5.4)$$

$$G_{R,\uparrow\downarrow,z} = G_{R,\downarrow\uparrow,z} = G_{D,\uparrow\downarrow,z} = G_{D,\downarrow\uparrow,z} \quad (13.5.5)$$

なる関係があることがわかる。つまり、図 13.6 と図 13.19 の  $x$  と  $y$  方向スピンのコンダクタンスを入れ替えたものが等しくなっている。

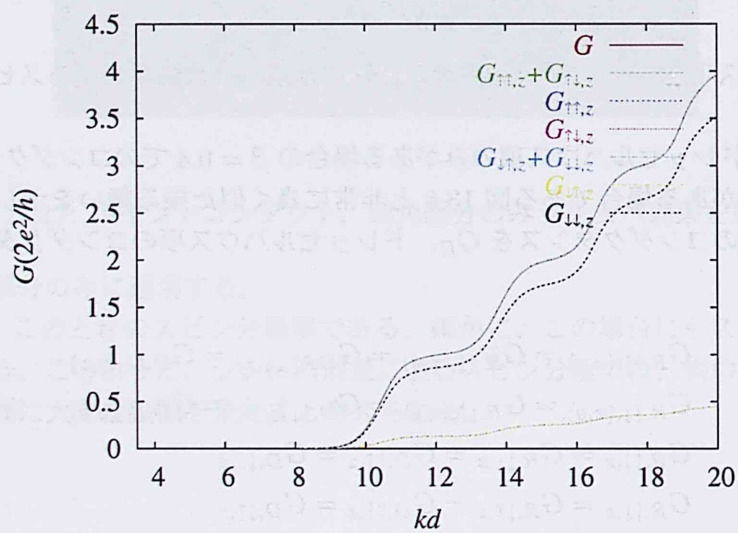
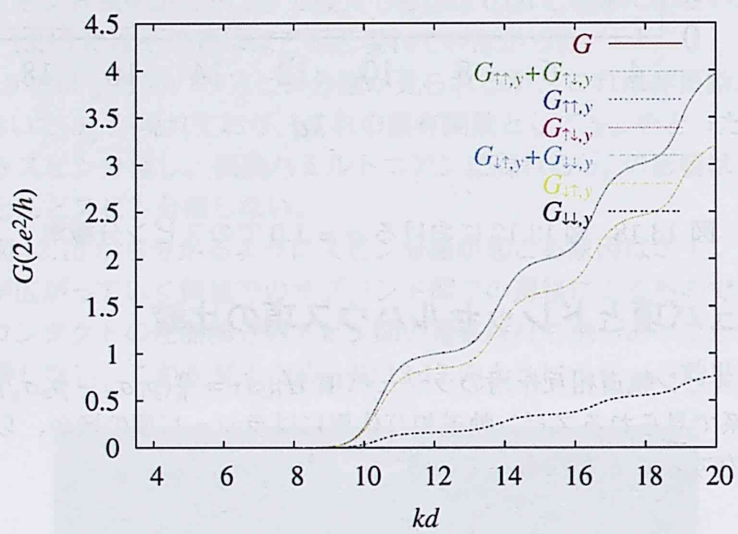
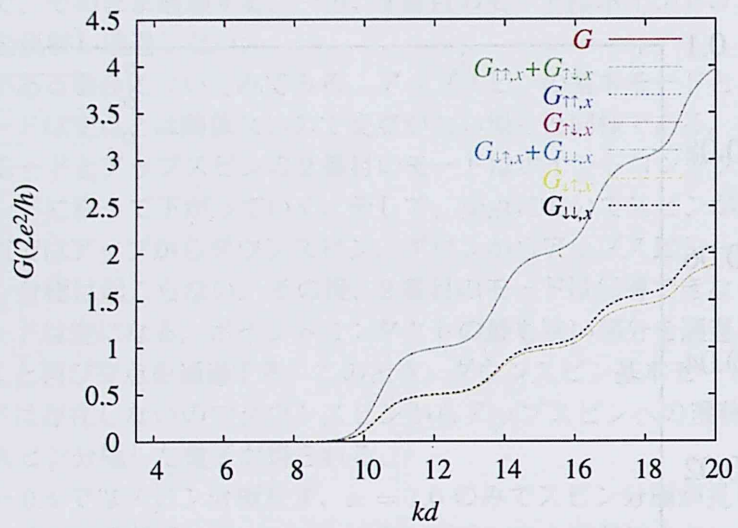


図 13.19:  $\beta = 0.4$  での各方向のスピンの対するコンダクタンス

これは、ラシュバ項のときと同様に  $p_y$  が  $p_x$  よりも十分に小さいと考えて、ドレッセルハウス項  $H_{DSO}$  を

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{\beta}{\hbar} p_x \sigma_x + V \quad (13.5.6)$$

$$H' = \frac{\beta}{\hbar} p_y \sigma_y \quad (13.5.7)$$

とおけば、非摂動項にはラシュバ項のときの  $\sigma_y$  の代わりに  $\sigma_x$  が現れるため、スピンに対して  $x$  方向の固有関数をとることになる。そのため、図 13.6 と図 13.19 では  $x$  と  $y$  を入れ替えたものが等しくなる。

### 13.6 計算精度の検討

次に本手法での計算精度を検討する。計算精度は確率の保存より見積もり、以下の式で評価する。

$$U_{n,\uparrow} = \sum_{\pm} R_{n,\uparrow,\pm} + T_{n,\uparrow,\pm} \quad (13.6.1)$$

ここで、 $n$  は入射モード、 $+\uparrow$ 、 $-\downarrow$  である。図 13.20 に量子細線モデルで計算したコンダクタンス (図 13.3) での確率の保存  $U$  を示す。このようにモードの立ち上がり付近で

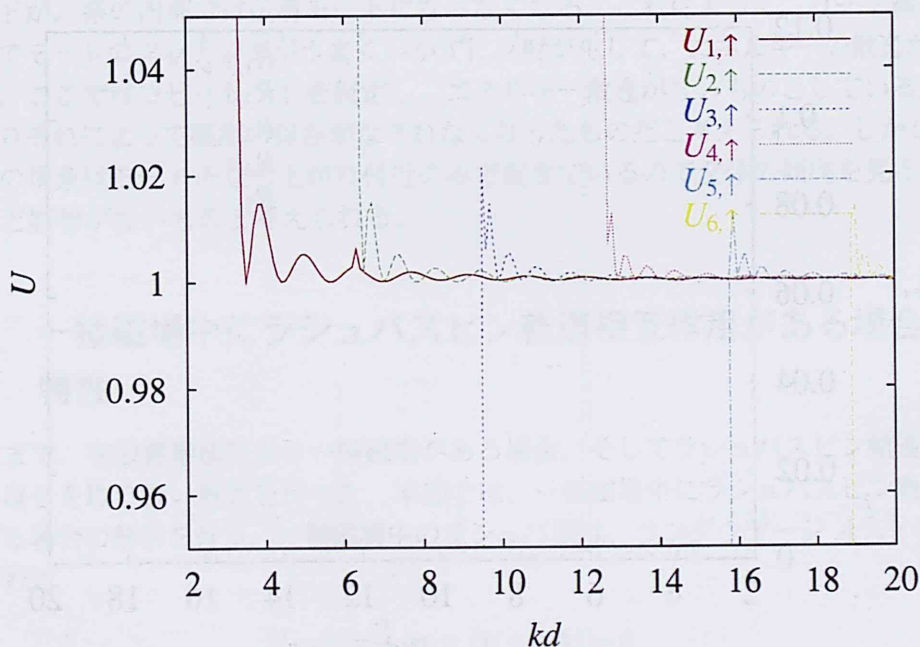


図 13.20: アップスピンの入射した場合のそれぞれの入射モードに対する確率の保存

確率の保存が十分になされていない箇所があり、それによって図 13.3 での透過確率が乱れたものと考えられる。図 13.21 にそのピークの 1 つである入射モード  $n=2$ 、 $kd=6.3$  での確率密度を示す。これを見ると、ポイントコンタクトなど散乱されるものが全くない

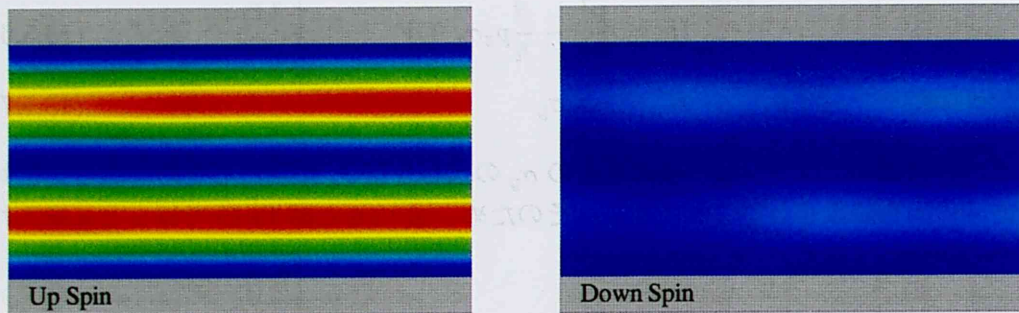


図 13.21:  $kd = 6.3$ 、基本モード、アップスピンで入射した場合の確率密度 (左図がアップスピン、右図がダウンスピン)

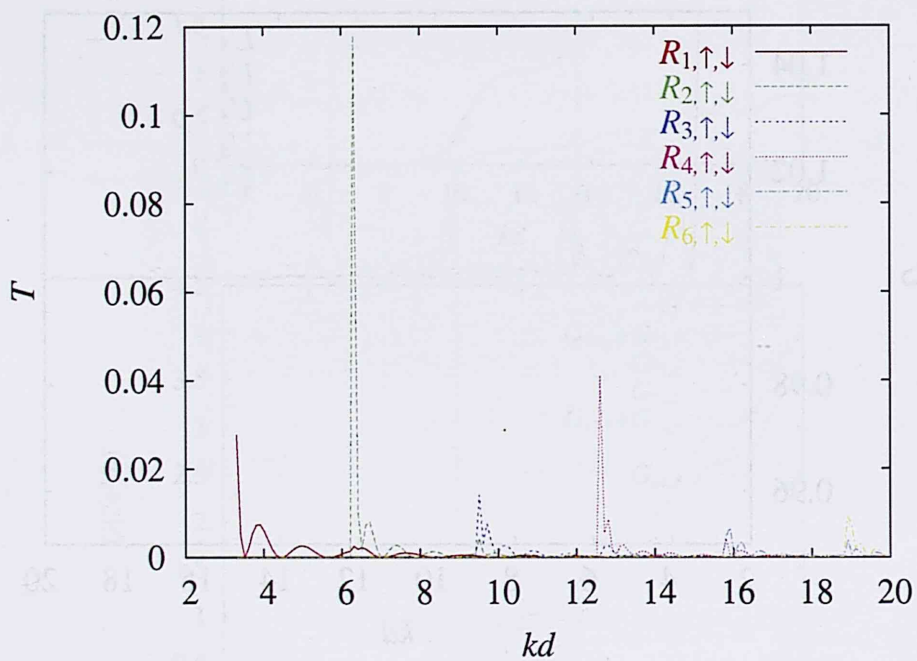


図 13.22:  $\alpha = 0.4$  でのそれぞれの入射モード  $n$  に対する反射確率  $R_{n,\uparrow,\downarrow}$



にも関わらず、2番目のモードでの反射がかなり多いことが分かる。そこで、図 13.22 にこの場合での反射確率を示す。このように、この反射確率のピークが、図 13.20 での精度が低下している箇所と一致しており、実際には存在しない反射が起こるために、精度が低下したものだと思われる。これは以下のように解釈できる。図 13.22 のピークに注目してみると、そのピークは全てモードの立ち上がり付近で、新たに伝導モードになったモードで入射した場合に最も大きくなる。つまり、 $k_x$  が非常に小さく、 $k_y$  が大きな場合である。この場合、(13.4.13) 式は

$$E_{n,\pm,x} \approx \mp \alpha k_x \quad (13.6.2)$$

となる。よって、(13.4.14) 式は

$$E_{n,\pm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \mp 2k_x k_\alpha + \left( \frac{n\pi}{d} \right)^2 \right) \quad (13.6.3)$$

となり、スケーリングした (13.4.15) 式は

$$\frac{2md^2}{\hbar^2} E_{n,\pm} = \epsilon_{n,\pm} = \mp 2k_{n,x} d\hat{\alpha} + (n\pi)^2 \quad (13.6.4)$$

となる。つまり、アップスピンとダウンスピンとでエネルギーが  $\mp 2k_{n,x} d\hat{\alpha}$  だけ異なる。そのため、ゼーマンエネルギーを考慮した場合と同様のことが起こる。つまり、リード線では  $\alpha = 0$  であるため伝導モードにならなかったモードが、系の内部ではエネルギーが  $2k_{n,x} d\hat{\alpha}$  だけあがるため伝導モードとなる。また、その逆にリード線では伝導モードであるモードが、系の内部では伝導モードにならなくなる。これによって、リード線と系の境界部分でモードのマッチングがうまくいかずに反射が生じて、エネルギーの散逸が起こる。しかし、ここではコヒーレントを仮定し、エネルギー散逸がないものとしているため矛盾が起こりそれによって確率の保存がなされなくなったものだと考えられる。しかしながら、これらの現象はモードの立ち上がり付近のみで起きているので全体の傾向を見ることにはほとんど影響がないものと考えられる。

## 13.7 一様磁場中にラシュバスピン軌道相互作用がある場合の伝導特性

これまで、有限要素法により一様磁場がある場合、そしてラシュバスピン軌道相互作用がある場合を取り扱い解析を行った。本節では、一様磁場中にラシュバスピン軌道相互作用がある場合の解析を行う。一様磁場中のラシュバ項は、ランダウゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  を用いれば

$$\begin{aligned} H_{RSO} &= \frac{\alpha}{\hbar} (\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})) \cdot \hat{z} \\ &= \frac{\alpha}{\hbar} (p_y \sigma_x - (p_x - eBy) \sigma_y) \end{aligned} \quad (13.7.1)$$

となる。また、スピンを考慮した一様磁場中  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  のハミルトニアンには (12.7.1) 式のゼーマンエネルギーが加わる。

$$E_z = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \sigma_z \quad (13.7.2)$$

よって、一様磁場中にラシュバ項がある場合の Schrödinger 方程式は

$$\begin{aligned} & \left( \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{\alpha}{\hbar} (p_y \sigma_x - (p_x - eBy) \sigma_y) + V + \frac{\hbar^2}{2ml^2} \sigma_z \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \\ & \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i \frac{\hbar^2}{ml^2} y \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar^2}{2ml^4} y^2 + V \pm \frac{\hbar^2}{2ml^2} \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} + \alpha \left( -i \frac{\partial}{\partial y} \pm \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{y}{l^2} \right) \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} = E \psi_{\uparrow, \downarrow} \end{aligned} \quad (13.7.3)$$

となる。長さのスケール  $d$  で無次元化すれば、

$$\left( -\nabla^2 + i2y\hat{B} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} + \hat{\alpha} \left( -i \frac{\partial}{\partial y} \pm \left( \frac{\partial}{\partial x} - i\hat{B}y \right) \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} = \left( (kd)^2 - (\hat{B}^2 y^2 \pm \hat{B}) \right) \psi_{\uparrow, \downarrow} \quad (13.7.4)$$

となる。ここで、 $\hat{\alpha} = \frac{2md}{\hbar^2} \alpha$ 、 $\hat{B} = \frac{d^2}{l^2}$ 、 $(kd)^2 = \frac{2md^2}{\hbar^2} (E - V)$  とした。今後は $\hat{\cdot}$ を省略して記述する。左辺第2項の波動関数のスピンはほかの項と比べ逆になっており、係数行列の非対角部分に入る。

あとは、これまでと同様に有限要素法を適用できる。系の形状として任意形状の量子ドット (図 12.12) を使い、計算を行った。

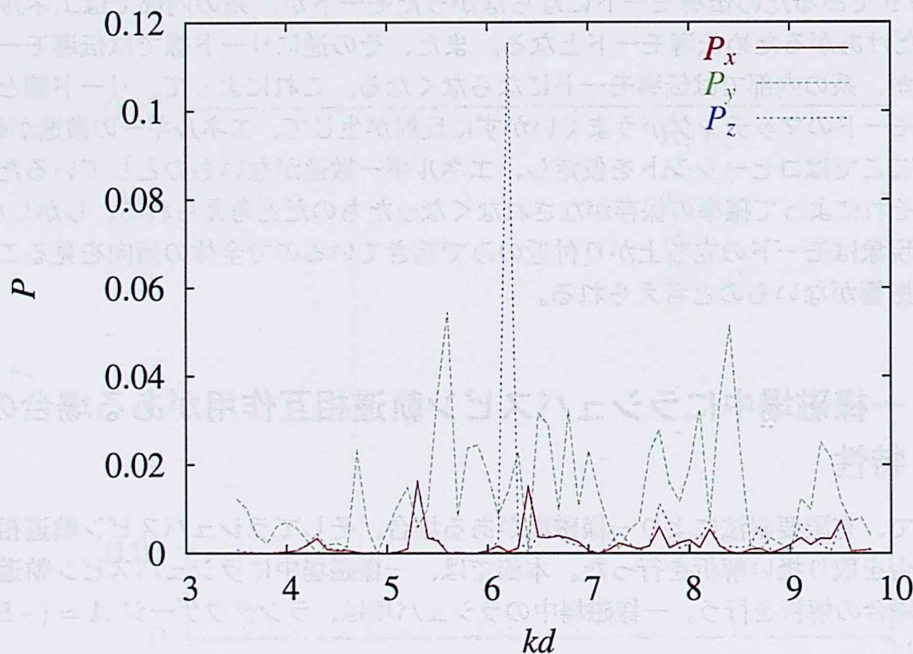


図 13.23:  $B = 0$ 、 $\alpha = 0.5$  での各方向のスピンに対するスピン分極率

図 13.23、13.24 にラシュバ項の大きさ  $\alpha = 0.5$ 、磁場  $B = 0$  と 1 でのスピン分極率を示す。乱雑な形状に対応して、複雑な振動を示している。また零磁場の場合には  $y$  方向のスピン分極率が高いが、 $B = 1$  の場合には  $x$  と  $z$  方向のスピン分極率のほうが高くなっている。これは、磁場がない場合にはラシュバ項の  $\frac{\alpha}{\hbar} p_y \sigma_x$  の項を摂動とし、 $-\frac{\alpha}{\hbar} p_x \sigma_y$  の項を

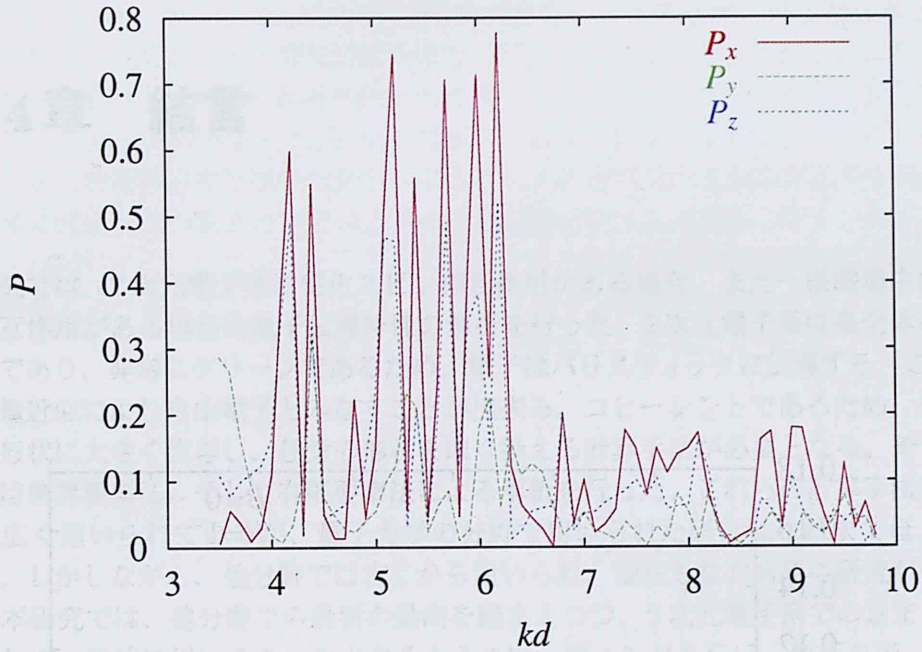


図 13.24:  $B = 1$ ,  $\alpha = 0.5$  での各方向のスピンの対するスピン分極率

非摂動として捉えていたため、 $y$  方向のスピン分極率のみが高くなっていったが、磁場がある場合には  $-\frac{\alpha}{\hbar}(p_x - eBy)\sigma_y$  となり  $B$  や  $y$  によるので  $\sigma_y$  を単純に非摂動と考えることができず、 $x$  と  $y$  方向のスピンの混ざった形で現れる。それに加え、(12.7.1) 式のゼーマンエネルギーが加わり、その  $\sigma_z$  により  $z$  方向のスピンの対しても作用する。そのため、各方向に混ざった形でスピン分極が起こる。

ただし、この結果に関してはあまり深く議論することは出来ない。図 13.25 にこれらの計算結果の精度を示す。ここで、計算精度は確率の保存より見積もり、すべてのモード、スピンで平均して以下の式で評価した。

$$U = \frac{1}{2M(kd)} \sum_{m,\pm,\pm'}^{M(kd)} |R_{m,\pm,\pm'} + T_{m,\pm,\pm'} - 1| \quad (13.7.5)$$

$M(kd)$  は波数  $kd$  での伝導モード数で、 $\pm$  は入射スピン、 $\pm'$  は反射、透過スピンである。

このように、 $B = 0$  の場合については、ほぼ信頼できる精度内に収まっているが、 $B = 1$  の場合には、最大で 17% 程度の誤差が生じている。この原因として、12.7.2 節や 13.6 節で見たようにモードの立ち上がり付近で、ゼーマンエネルギーやラシュバ項によって、リード線と系の内部とで可能な伝導モードの数が異なる状況が起きる。その時に、モードのマッチングがうまくいかずにリード線との境界部分で反射が起き、精度が低下する。改善する方法としては、磁場やラシュバ効果をステップ関数的にシャープに印可するのではなく、なだらかに印可する。または、磁場やラシュバ効果を印可した場所と印可していない場所との境界を、ポテンシャルなどで制限することによってその影響がなるべく少なくなるようにする方法などが考えられる。

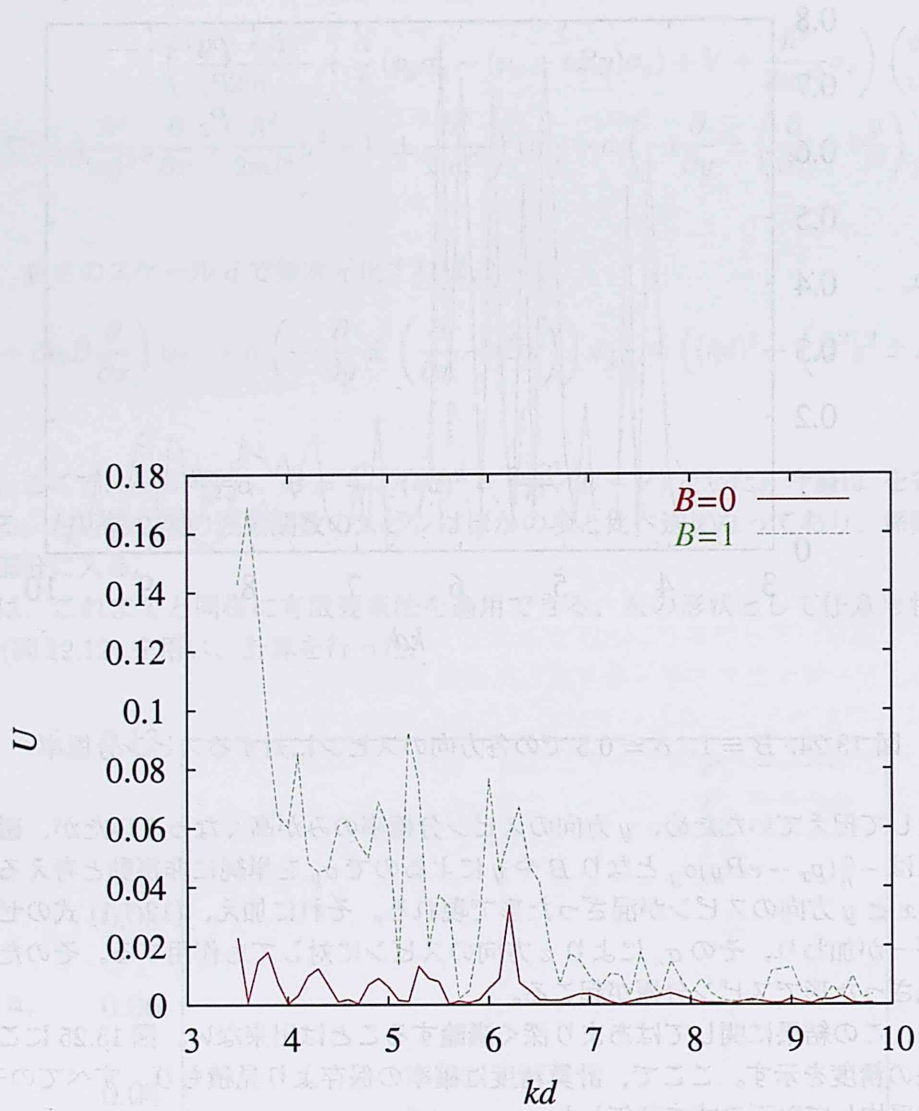


図 13.25:  $B = 0, 1$ ,  $\alpha = 0.5$  での (13.7.5) 式より見積もった計算精度

## 第14章 結言

本研究では、2次元電子系に磁化スピン相互作用がある場合、また一様磁場中にスピン軌道相互作用がある場合の量子伝導特性の解析を行った。2次元電子系は系全体がコヒーレントであり、非常にクリーンであるため、電子はバリスティックに伝導する。この場合、有効質量近似により自由電子とみなすことが出来る。コヒーレントであるため、伝導特性は系の形状に大きく依存し、任意の形状を取り扱える計算手法が必要となる。そこで、本研究では境界要素法、そして有限要素法による解析を行った。これらの計算手法は他の分野では広く用いられているが、量子力学の分野で用いられた研究はこれまでほとんどなかった。しかしながら、他分野では古くから用いられ、現在もなお活発に研究が行われている。本研究では、他分野での最新の動向を踏まえつつ、2次元電子系でのさまざまな実験に対して一般的に用いることの出来るようにコーディングを行い、解析を行った。

まず、境界要素法により磁化スピン相互作用がある場合の解析を行った。2次元電子系に磁化を導入すると、電子のスピン縮退がとけ、スピン状態に依存した伝導特性が期待される。また、磁化の形状や配置を変えることにより、その伝導特性を制御できる可能性がある。そこで、まず任意形状の磁化を取り扱えるよう境界要素法を拡張し、解析を行った。系を磁化が一定とみなせる領域に分割し、それぞれの領域で境界積分方程式を立てそれらをセルフコンシステンスになるよう連立して解く。この手法により任意形状の磁化を取り扱うことができ、磁化の内部でスピントリップが起こる様子を視覚的に理解することが出来る。また、共鳴が起こりやすい形状を作成し、それによって効率よくスピン反転を起こせる可能性を示した。

しかし、この手法は磁化の形状が大きな場合や、多数の磁化がある場合、また磁化が連続的に変化している場合には系内部での境界が増え、要素数が多くなり、多くのメモリーを必要とする。また、場合によっては領域と領域との境界で見掛けの固有振動が生じて、精度が低下する可能性がある。ただし、これらは系が複雑な場合でのみ起こり、一般の単純な系では十分な精度で解析を行うことが出来る。

つぎに、境界要素法により点状の磁性散乱体がある場合の解析を行った。点状の磁性散乱体を十分に小さなものとみなし、デルタ関数で近似することによって、体積積分を評価する。これにより、散乱体1つを1つの節点であらわすことができ、多くの散乱体がある場合も取り扱うことが出来る。この点状磁性体は、それひとつでは大きなスピン分極を期待することは出来ないが、これを規則的に配置することによって特定の波数で共鳴を起こし、それによって大きなスピン分極を得ることが出来る。特に、格子状に3層配置した場合にすべてのスピンが反転するという非常に興味深い結果を得た。また、磁化の大きさも大きければよいわけではなく、より効率よくスピン分極を起こすには適当な大きさにする必要があることがわかった。このように、点状の磁性散乱体を格子状に多数配置すると共鳴によりさまざまな興味深い現象が期待できる。

そこで、点状磁性散乱体を格子状に配置したスピフィルターを提案し解析を行った。点状散乱体を格子状に配置すると、散乱体の数が増えるにつれ可能な共鳴モードの数が増えることによって、バンドが形成される。この散乱体に磁性的な性質を持たせることによって、磁化によるゼーマン分離がおき、バンドの幅や位置がすこしずれる。それによって、両方のスピンのスピ分極率が1となる結果が得られた。つまり、磁化の向きや配置などを一切換えることなく、フェルミエネルギーを変えるだけで、任意のスピンの電子を分極させることが出来る。これらの計算を現実的な時間で行うため、専用計算機と並列計算により計算の加速を行い、実行している。

このように、2次元電子系に磁化を導入すれば、その配置によってスピンを制御することが出来る。しかし、半導体中への強磁性体の導入はまだ課題が多く、あまり多くの実験は行われていない。

そこで、このような磁性体を用いないスピンの制御としてラシュバスピ軌道相互作用が期待されている。ラシュバスピ軌道相互作用は外部電場による対象性の乱れに起因する効果で、その強度を電場により制御できる。そのため、これまでの半導体エレクトロニクスで用いられてきた技術を有効に活用できる。本研究では、任意形状の系に一様磁場、そしてラシュバスピ軌道相互作用がある場合の解析を行った。

これらの解析には、有限要素法を用いた。有限要素法は、境界要素法よりもさらに広く分野で用いられている数値解析法であるが、やはり量子力学の分野ではほとんど用いられていない。そこで本研究では、まず一様磁場を取り扱えるよう有限要素法を拡張した。有限要素法では、境界要素法と違い系全体を離散化する。そのため歪の少ない要素を用いて十分な数の要素数で離散化すれば、要素間での確率の流れが保存し、全体として確率の保存が成り立つ。そのため、実際には異なる解であっても確率の保存が成り立つことがあり、その適用には確率の保存だけではなく、要素数に対する収束性も見ることがある。また、磁場がある場合には用いるゲージと系の形状によっては、位相が大きく変化することがある。そのため、ゲージは系の形状に合わせて選択する必要がある。これらのことをふまえて、ゼーマンエネルギーを考慮した一様磁場中ポイントコンタクトや磁性ポイントコンタクトの解析を行い、それぞれでスピフィルターが実現されることを示した。

次に、有限要素法によりラシュバ効果がある場合のポイントコンタクトの解析を行った。ポイントコンタクトが広がる領域において、異なるサブバンド、スピン間の遷移が起こり、それがスピンに対して一方向の遷移であるため、スピン分極していない電子からスピン分極した電子を得ることが出来ることを示した。さらに、一様磁場がある場合でのラシュバ効果の解析では、ゼーマンエネルギーが加わることによりスピン分極が全方向に対して見られることを示した。また、磁場がない場合と比べて高い分極率が得られる可能性があることを見た。ただし、磁場がある場合は計算結果の収束性が悪く、さらにラシュバ効果がある場合にはスピンを考慮しなくてはならないため2倍の要素数が必要となり、状況はより悪化する。

今後の課題として、磁場がある場合の計算精度の改善があげられる。磁場がある場合には、ゲージによっては部分的に位相の変化が激しくなる。そこで、変化の激しくなる部分でより多くの要素をとることが必要となる。また、形状関数や要素の形状をより適したものをを用いることによって改善すると考えられる。

## 謝辞

本研究に関わる全ての面で終始ご指導をいただきました植田毅准教授に心より感謝の意を表したいと思います。また、たびたび有意義なご助言をいただいた大高一雄名誉教授に感謝いたします。

本研究は、文部科学省 21 世紀 COE プログラムより海外渡航費用の補助や、RA への採用など経済的な支援をしていただきました。関係者の方々に感謝します。

また、松嶋和宏君、日置亨君ならびに研究室のみなさんには様々な面で大変お世話になりました。本当にありがとうございました。

## 関連図書

- [1] J. C. Slonczewski, Conductance and exchange coupling of two ferromagnets separated by a tunneling barrier, *Phys. Rev. B*, vol. 39, pp.6995-7002 (1989)
- [2] R. M. Potok, J. A. Folk, C. M. Marcus, V. Umansky, Detecting Spin-Polarized Currents in Ballistic Nanostructures, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, pp.266602 (2002)
- [3] J. A. Folk, R. M. Potok, C. M. Marcus, V. Umansky, A Gate-Controlled Bidirectional Spin Filter Using Quantum Coherence, *Science*, Vol. 299, pp.679-682 (2003)
- [4] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, L. P. Kouwenhoven, Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot, *Nature*, vol. 430, pp.431-435 (2004)
- [5] J.F. Song, Y. Ochiai, J.P. Bird, Fano resonances in open quantum dots and their application as spin filters, *Applied Physics Letters* Vol.82 No.25, 2003, pp.4561-4563
- [6] Supriyo Datta, Biswajit Das, Electronic analog of the electro-optic modulator, *Appl. Phys. Lett.* 56, pp.665-667 (1990)
- [7] H. Imamura, N. Kobayashi, S. Takahashi, S. Maekawa: Conductance Quantization and Magnetoresistance in Magnetic Point Contacts, *Phys. Rev. Lett.* Vol.84 No.5, 2000, pp.1003-1006
- [8] 家 泰弘, 加藤 真由美, 遠藤 彰, 人工磁気周期構造と 2次元電子系, *日本物理学会誌*, vol. 53, pp.750-757 (1998)
- [9] Masahiro Hara, Akira Endo, Shingo Katsumoto, Yasuhiro Iye, Transport in Two-Dimensional Electron Gas with Isolated Magnetic Barriers, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 71, No. 2, pp.543-549 (2002)
- [10] Supriyo Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995)
- [11] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* 17, 975 (1962)
- [12] B.J. van Wees, H. van Houten, C.W.J. Beenakker, J.G. Williamson, L.P. Kouwenhoven, D. van der Marel and C.T. Foxon, Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. Lett.* 60, 848 (1988)



- [13] R. Landauer, Electrical Resistance of Disorderd One-dimensional Lattices, IBM. Res. Dev. 1, 863 (1969)
- [14] M. Büttiker, Four-Terminal Phase-Coherent Conductance, Phys. Rev. Lett. 57, 1761 (1986)
- [15] 高橋 康, 物理数学ノート I, 講談社 (1992)
- [16] 近角聰信, 強磁性体の物理 (上)(下), 裳華房 (1978)
- [17] 太田恵造, 磁気工学の基礎 (I)(II), 共立全書 (1999)
- [18] 宮崎照宣, スピントロニクス, 日刊工業新聞社 (2004)
- [19] T.R. McGuire, P.I. Potter, Anisotropic Magnetoresistance in Ferromagnetic 3d Alloys, IEEE Trans. Magn. Mag-11, No.4, 1018 (1975)
- [20] A. Fert, I.A. Campbell, Two-Current Conduction in Nickel, Phys. Rev. Lett. 21, 1190 (1968)
- [21] 安藤 恒也, 量子効果と磁場, 丸善 (1995)
- [22] M. Abramowitz and Irene A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, (Dover, New York, 1972), pp.-358-360.
- [23] R.P. van Gorkmon, Arne Brataas, Gerrit E.W. Bauer, Negative Domain Wall Resistance in Ferromagnets, Phys. Lev. Lett. 83, 4401 (1999)
- [24] Alexandre M. Zagoskin, Quantum Theory of Many-Body Systems, Spiringer (1998)
- [25] Yuu Miyagawa, Tsuyoshi Ueta, Numerical study of ballistic electron transport in the presence of magnetic moment islands, Proc.2nd Quantum Transport Nano-Hana International Workshop,IPAP Conf.Series 5, pp.85-90
- [26] 夏目雄平, 植田毅, 計算物理 II, 朝倉書店 (2002)
- [27] L. Ramdas Ram-Mohan, Finite Element and Boundary Element Application in Quantum Mechanics, Oxford University Press (2002)
- [28] Tsuyoshi Ueta, Quantum-Mechanical Analysis of Scattering of an Electron Beam in Magnetic Fields by a Finite Height Potential by means of BEM, Electronics and Communications in Japan, Part II, Vol. 85 , No.3, 2002, pp.1-8.
- [29] 小林 昭一, 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会 (2000)
- [30] 宮川 悠, 植田 毅, 任意形状の磁気モーメントによる電子波散乱の境界要素解析, 計算数理工学論文集, vol. 5, pp.139-144 (2005)
- [31] J. Kondo, Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys, Prog. Theor. Phys. Vol. 32, pp.37-49 (1964)

- [32] Tsuyoshi Ueta, Statistical Properties of Quantum Transport through Two-Dimensional Random-Shaped Quantum Dots, *Trans. IEICE Japan*, J82-C-I, pp.414-420 (1999)
- [33] Tsuyoshi Ueta, Boundary Element Method for Electron Transport in the presence of pointlike scatterers in magnetic fields, *Phys. Rev. B* 60 no.11 (1999) pp.8213-821
- [34] 宮川悠, 植田毅, 点状磁性散乱体が存在する場合の境界要素法, 計算数理工学コンファレンス論文集, 2004年7月, Vol.4, No. 04-07901
- [35] Yuu Miyagawa, Tsuyoshi Ueta, Numerical study of ballistic electron transport in the presence of pointlike magnetic scatterers, *Thin Solid Films*, 505, pp.57-59 (2005)
- [36] Craig S. Lent, David J. Krikner, The quantum transmitting boundary method, *J. Appl. Phys* 67, pp.6353-6359 (1990)
- [37] 谷口 康男, FEMのための要素自動分割, 森北出版 (1992)
- [38] T. Ando, Quantum point contacts in magnetic fields, *Phys. Rev. B* 44, pp.8017-8027 (1991)
- [39] Manhua Leng, Craig S. Lent, Quantum transmitting boundary method in a magnetic field, *J. Appl. Phys* 76, pp.2240-2248 (1994)
- [40] Koichi Hirayama, Yasuhiro Honma, Yoshio Hayashi, Masanori Koshiba, A Novel Finite-Element Formulation for the Analysis of the Energy Levels of a Quantum Cavity in a Magnetic Field, *IEEE Photonics Technology Letters*, Vol.10, No.10, pp.1359-1361 (1998)
- [41] Yongjiang Wang, Jian Wang, Hong Guo, Magnetoconductance of a stadium-shaped quantum dot: A finite-element-method approach, *Phys. Rev. B*, vol.49, pp.1928-1934 (1994)
- [42] Klaus M. Frahm, Dima L. Shepelyansky, Quantum Localization in Rough Billiards, *Phys. Rev. Lett.* 78, pp.1440-1443 (1997)
- [43] 江藤 幹雄, 量子ポイントコンタクトを用いたスピン注入の方法, *固体物理*, Vol.40, pp.955-961 (2005)
- [44] Yuu Miyagawa, Tsuyoshi Ueta, FEM for Schrödinger equation with Rashba effect, *Journal of Computational and Applied Mathematics* (in press)