計算数理工学論文集 Vol. 10 (2010 年 12 月)，論文 No. 03-101210 JASCOME

局所ゲージ変換を用いた磁場中電子の新たな有限要素法

NOVEL FEM WITH PEIERLS PHASE FOR ELECTRON WAVES IN MAGNETIC FIELDS

植田　毅 [1)]、宮川　悠 [2)]

Tsuyoshi UETA and Yuu MIYAGAWA

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

The finite element method has already been extended for analyses of transport properties of the electron wave of two-dimensional electron systems in magnetic fields. Not a few proposals of the new formulation or improvement have been reported, whereas there exists almost no report of the application to the analysis of a realistic system. In the present paper, it is pointed out that analyses with FEM of conventional formulation do not give accurate results in case of a large system or of a strong magnetic field and that the selected gauge influences numerical results greatly. Furthermore, the conceptually new finite element method which solves the difficulty fundamentally is proposed. The formulation in which matrix elements in the absence of a magnetic field are multiplied by the Peierls phase is very simple. In order to show its predominancy, the numerical examples of the proposed formulation are presented.

Key Words: Two-dimensional Electron Systems, Magnetic Fields, Magnetic Translation Operator, Finite Element Method, Peierls Phase

1. はじめに

絶縁体-半導体ヘテロ界面に形成される 2 次元電子系において、デバイスの構造のサイズを超えるバリスティックな伝導が実現されている。このような電子系を用いたデバイスの設計においては複雑な形状の系内での電子波の振舞いを厳密に解析することが不可欠である。また、外界からの制御パラメータの一つとして磁場が用いられるため、磁場中での電子波の解析をする必要がある [(1)]。

これまで、磁場中の電子波の解析にモードマッチング法 [(2)]、差分法、強束縛近似 [(1)]、有限要素法 [(3, 4)]、境界要素法 [(4, 5)] などが用いられてきた。複雑な形状の系の解析には境界要素法が最も便利であり、磁場が印加された場合にも拡張され、多くの成果をあげてきた [(6, 7)]。

しかしながら、系内でポテンシャルの変化がある場合やスピン軌道相互作用、ラシュバ効果 [(8)] がある場合には境界要素法による解析は困難であり、有限要素法も磁場中の電子波のために拡張され、[(9, 10)] 改良されてきた [(11)]。磁場中電子波の有限要素法の定式化と簡単な計算例の報告は多いが、それを用いた物理現象の解析 [(9)]、現実的デバイスの特性の解析の報告は少ない。

2010 年 9 月 30 日受付，2010 年 11 月 10 日受理

本論文では、磁場中の電子波解析に有限要素法が用いられない原因を指摘し、それを解消する全く新しい定式化を行う。文献 (11) の計算例と同じ系の数値計算結果を示し、本論文で提案する手法の簡便性、優位性を示す。

2. これまでの定式化とその問題点

ベクトルポテンシャルが $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ であるとき、電子波はシュレディンガー方程式

$$\frac{1}{2m}\left\{(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}-q\boldsymbol{A})^2+V(\boldsymbol{r})\right\}\psi=E\psi \tag{1}$$

に従う。m、q、E はそれぞれ電子の有効質量、電荷、エネルギーである。$\hbar$、i はそれぞれプランク定数 h を 2π で割った定数および虚数単位である。

2 次元電子系を x-y 平面にとり、強さ B の一様磁場が z 軸正方向に印加されているとすると、ベクトルポテンシャルは $\boldsymbol{A}=B\,(-(1-s)y,sx,0)$（$s$ は任意の実数）と選べる。これまでの定式化では

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi+\mathrm{i}\frac{qB\hbar}{m}\left\{-(1-s)y\frac{\partial\psi}{\partial x}+sx\frac{\partial\psi}{\partial y}\right\} +\frac{q^2B^2}{2m}\left\{(1-s)^2y^2+s^2x^2\right\}\psi=\{E-V(\boldsymbol{r})\}\psi \tag{2}$$

と展開して、左辺の第 2 、3 項を磁場が印加されることによ

り付加されるポテンシャルとして扱う。すなわち、局所的に波数の変化する電磁波と同様な定式化を行う。

解析領域を小さな領域（有限要素）に分割し、j 番目の節点の座標を $\boldsymbol{r}_j$ とする。j 番目の節点でのみ値が 1、他の全ての節点では値が 0、つまり

$$N_j(\boldsymbol{r}_k) = \begin{cases} 1 & j = k \\ 0 & j \neq k \end{cases} \tag{3}$$

を満たし、節点 j を囲む節点との間を線形につなぐ $\boldsymbol{r}$ の連続実関数を j 番目の節点における形状関数（補間関数）$N_j(\boldsymbol{r})$ とする。

形状関数 $N_j(\boldsymbol{r})$ を用いて領域内の波動関数を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_j N_j(\boldsymbol{r})\psi_j \tag{4}$$

と展開し、これを試行関数とする。このとき、汎関数

$$\mathcal{L} = \boldsymbol{\psi}^{\dagger}\left(\mathsf{K}-\mathsf{M}\right)\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\psi}^{\dagger}\boldsymbol{Q} \tag{5}$$

を $\boldsymbol{\psi}^{\dagger}$ で変分することにより、$\{\psi_i\}$ についての連立方程式

$$\left(\mathsf{K}-\mathsf{M}\right)\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{Q} \tag{6}$$

を得る。ここで、$\boldsymbol{\psi}$ を各節点の波動関数 ψ_i を第 i 成分とする列ベクトルとして定義した。また、行列 K、M およびベクトル $\boldsymbol{Q}$ は以下のように定義される。

$$\mathsf{K}_{jk} = \int_{\mathrm{V}_{jk}} \left(\frac{\partial N_j}{\partial x}\frac{\partial N_k}{\partial x} + \frac{\partial N_j}{\partial y}\frac{\partial N_k}{\partial y} \right) d\boldsymbol{r} \tag{7}$$

$$\begin{aligned} \mathsf{M}_{jk} = {} & E\int_{\mathrm{V}_{jk}} N_j N_k d\boldsymbol{r} \\ & -\mathrm{i}\frac{qB\hbar}{m}\sum_l \left\{ -(1-s)y_k \int_{\mathrm{V}_{jk}} N_j N_l \frac{\partial N_k}{\partial x} d\boldsymbol{r} \right. \\ & \qquad \left. + s x_k \int_{\mathrm{V}_{jk}} N_j N_l \frac{\partial N_k}{\partial y} d\boldsymbol{r} \right\} \\ & -\sum_l \left[V(\boldsymbol{r}_l) + \frac{q^2B^2}{2m}\left\{ (1-s)^2 y_l^2 + s^2 x_l^2 \right\} \right] \\ & \qquad \times \int_{\mathrm{V}_{jk}} N_j N_k N_l d\boldsymbol{r} \end{aligned} \tag{8}$$

$$Q_j = \sum_k q(\boldsymbol{r}_k) \int_{\mathrm{S_N}} N_j N_k dS \tag{9}$$

ここで、v_{jk} は節点 j と節点 k を共に含む要素内での積分であることを示す。また、$\int_{\mathrm{S_N}}$ は境界上で波動関数の法線方向微分の値が与えたれた部分の面積積分であり、$q(\boldsymbol{r})$ は境界上で与えられた境界面外向き法線方向微分の値である。

この定式化を用いると、単純な差分法を用いているときから指摘されていたことではあるが、行列 M の最後の項は系が大きな場合、磁場が強い場合に非常に大きくなる可能性がある。その振舞いは s、すなわちベクトルポテンシャルのゲージの取り方に依存する。

文献 (11) では、横幅 $2d$、縦 d の長方形量子ドット (Fig.1) について、境界上で波動関数が 0 となる境界条件の固有値問題を計算例として、4 種のベクトルポテンシャルの場合について解析している。エネルギー固有値の低い 3 つについて、$kd = \sqrt{2mE}d/\hbar$ で定義される無次元化した波数の値を文献 (11) の Table I に示し、「要素数を増やすとゲージによらず同じ値に収束する」と述べている。しかし、その Table I を見ると、要素数 1250 の場合においても、固有波数の小数点第 3 桁目はゲージのよって異なっている。

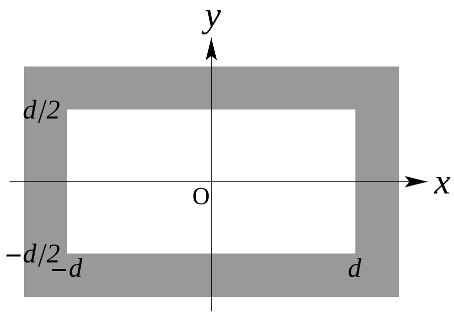

Fig. 1　The rectangular quantum dot investigated in ref.(11)

また、ベクトルポテンシャル依存性が明瞭になる計算例として、Fig.2 に示す x 方向に幅 d、y 方向 $8d$ の長方形領域の中央、左右に幅 d のエミッタ $(x < -d/2)$ とコレクタ $(x > d/2)$ を取り付けた十字構造を考える。エミッタ、コレクタ部分の境界条件の取り扱いは文献 (9) の II-B 節の取り扱いに従う。ただし、ここでは計算を簡便にするために、エミッタ、コレクタ部分には磁場がかかっていないものとし、これらの部分のベクトルポテンシャルはそれぞれ磁場がかかっている部分と連続になるようなゲージにとる。

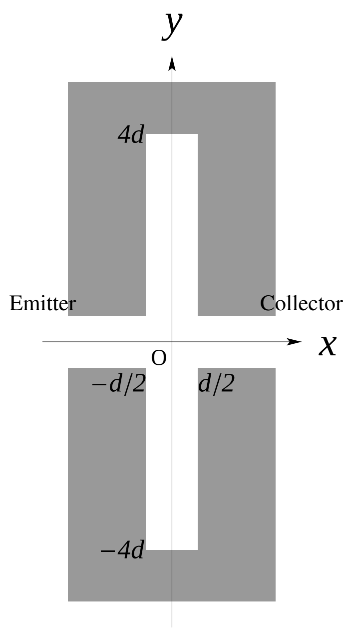

Fig. 2　The geometry of a cross-shaped conductor.

磁場がかかっている部分のゲージを $\boldsymbol{A} = (-By, 0, 0)$ として、エミッタから $kd = 10$ の基本モード波が入射した場合の透過率 T、反射率 R を磁場 $\tilde{B} \equiv qBd^2/\hbar = 0 \sim 5$ に対して、

接点数 N_s を変化させて計算した。確率保存則から $T+R=1$ を満たさなければならないが、計算結果では $N_s \geq 2000$ に対しては、$|T+R-1|$ の誤差は 0.02%以下になっている。し

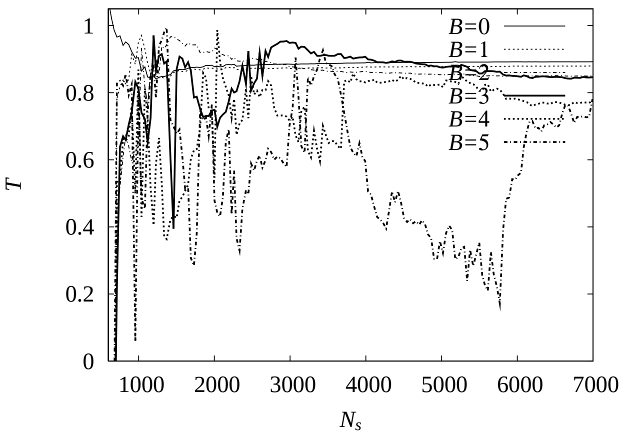

Fig. 3　The convergence characteristic of the transmission probability.

かしながら、Fig.3 に示すように、$\tilde{B}=0$ の場合、透過率 T は $N_s=3000$ で一定値に収束しているが、磁場が大きくなると N_s を大きくしても透過率 T はほとんど収束していないことが分かる。$N_s=3000$ のとき、接点間の距離が 1/8 波長になっており、$\tilde{B}=0$ の場合の収束は理解できる。磁場がかかっている場合の収束の悪さの原因を見るために、$\tilde{B}=20$ の場合の確率密度 $|\psi|^2$ と波動関数の位相 $\mathrm{Im}\,(\ln\psi)$ を Fig.4 に示す。この場合、電子のサイクロトロン半径 r_{c} とエミッタ

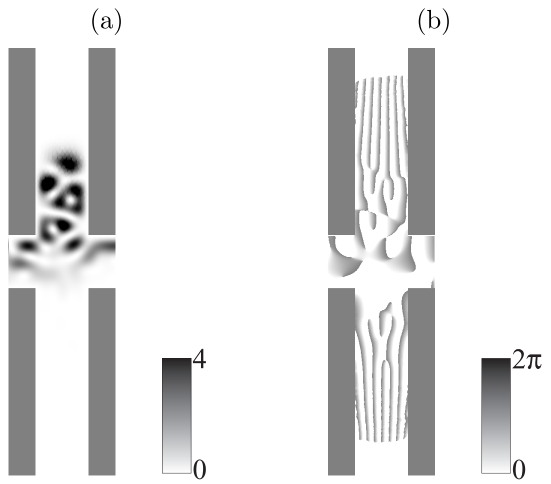

Fig. 4　Density plots of the probability density (a) and the phase (b) of a wave function for $kd=10$ and $\tilde{B}=20$ in $\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$, which is an insufficient convergence case.

の幅 d の比は $r_{\mathrm{c}}/d=kd/\tilde{B}=0.5$ であり、電子の古典軌道からすると、確率密度は系全体に広がるものと考えられるが、Fig.4 (a) では系の端まで広がっていないことが分かる。また、$|\psi|^2$ は $|y|$ が大きくなっても激しい変化はしないが、位相は $|y|$ が大きくなると激しく変化していることがわかる。この場合、$|y|$ が大きくなったときに激しく変化する位相を正しく表現できていないことが原因で収束していないと考えられる。

そこで、ベクトルポテンシャルを $\boldsymbol{A}=B/2(-y,x,0)$、$\boldsymbol{A}=B(0,x,0)$ とした場合の計算結果を Fig.5, 6 に示す。$\boldsymbol{A}=B(0,x,0)$ の場合には、このような系でも計算精度の良い境界要素法で計算した透過率および波動関数が非常によく一致している。また、Fig.6 (b) では位相は $|y|$ が大きくなろうとも激しく振動していない。これらの結果から、原点から離れたところでの位相の激しい変化が収束を悪くしていることが分かる。 実際、$\boldsymbol{A}=(0,Bx,0)$ から $\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$ にゲー

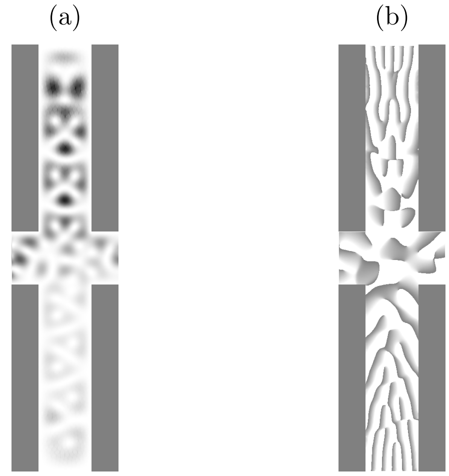

Fig. 5　Density plots of the probability density (a) and the phase (b) for $kd=10$ and $\tilde{B}=20$ for $\boldsymbol{A}=B/2(-y,x,0)$.

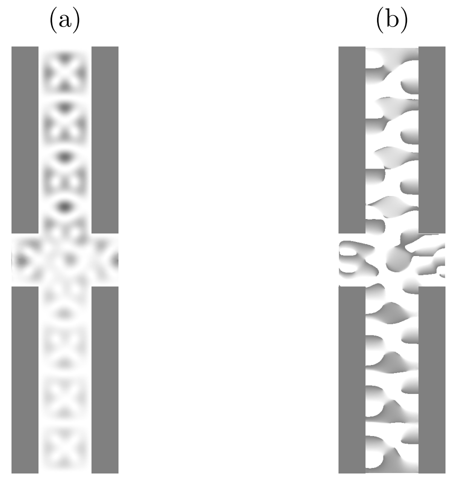

Fig. 6　Density plots of the probability density (a) and the phase (b) for $kd=10$ and $\tilde{B}=20$ for $\boldsymbol{A}=(0,Bx,0)$.

ジ変換した場合、波動関数に $\exp\left(-\mathrm{i}qBxy/\hbar\right)$ の位相因子がかかる。したがって、x 方向に y と B に比例した位相変化が加わる。その意味で、この系の解析に $\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$ は最も不適なゲージであったと言える。この因子は $|\psi|^2$ には全く現れないため、確率密度を確認しただけではその振動に気がつかない。

系の形が特定の方向に広がりがある場合にはその方向に依存性がないゲージを取れば解決できる。しかし、系が円形など等方的で大きな場合には大局的ゲージ変換では対処できない。そこで、本論文ではこの問題を根本的に解決する新し

い概念の定式化を提案し、計算例によりその有効性を示す。

3. 磁気的並進演算子を用いた定式化

ベクトルポテンシャルを対称ゲージ $\boldsymbol{A} = B/2(-y, x, 0)$ として、原点近傍でシュレディンガー方程式 (1) を考える。原点近傍では $\boldsymbol{A} \sim \boldsymbol{0}$ であるから、原点近傍での波動関数は磁場がかかっていない場合のものに非常に近いと考えられる。

ここで、磁気的並進演算子

$$T(\boldsymbol{R}) \equiv \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{R}\cdot(\boldsymbol{p}+q\boldsymbol{A})\right), \tag{10}$$

を定義すると、この演算子は

$$[(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2, T(\boldsymbol{R})] = 0 \tag{11}$$

および

$$\begin{aligned} T(\boldsymbol{R})V(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) &= e^{-\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{r})}V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})\phi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \\ &= V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})T(\boldsymbol{R})\phi(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{12}$$

なる関係を満たす。ただし、これらの関係式は対称ゲージのときのみ成り立つ。ここで、$[\ ,\ ]$ は $[A, B] \equiv AB - BA$ で定義される交換子である。

式 (1) の両辺に $T(\boldsymbol{R})$ を演算すると

$$\begin{aligned} &T(\boldsymbol{R})\left[\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) \\ =\ &\left[\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2 + V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})\right]T(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r}) \\ =\ &ET(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{13}$$

となる。また、

$$T(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r}) = e^{-\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{r})}\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \tag{14}$$

であり、$\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$ は $\boldsymbol{r} = -\boldsymbol{R}$ においてベクトルポテンシャルが $\boldsymbol{0}$ になるようなゲージ、即ち、$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$ の場合の $\boldsymbol{r} = -\boldsymbol{R}$ 近傍の波動関数を表す。

ここで、形状関数 $N_j(\boldsymbol{r})$ は点 $\boldsymbol{r}_j$ の近傍でのみ値を持つから、$\psi_j N_j(\boldsymbol{r})$ は $\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j)$ をよく近似するから、系全体の波動関数を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_j \psi_j e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}N_j(\boldsymbol{r}) \tag{15}$$

と表す。

この波動関数にベクトルポテンシャルを含む運動エネルギー演算子を演算すると

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2\psi(\boldsymbol{r}) \\ =\ &\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))^2\sum_j \psi_j e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}N_j(\boldsymbol{r}) \\ =\ &\sum_j \psi_j e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}\frac{1}{2m}\left\{\boldsymbol{p}-q\left(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_j)\right)\right\}^2 N_j(\boldsymbol{r}) \\ \approx\ &\sum_j \psi_j e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 N_j(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{16}$$

を得る。従って、波動関数を式 (15) のように展開すると、近似的にベクトルポテンシャルを考える必要がなくなる。これは、点 $\boldsymbol{r}_j$ におけるベクトルポテンシャルが $\boldsymbol{0}$ になるように局所ゲージ変換した波動関数をつないで系全体の波動関数を表したことになっている。形状関数に付く位相因子は局所的ゲージから元のゲージに戻すための因子である。

簡単のためにノイマン境界条件の部分を省略すると汎関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \int_V \left[\frac{1}{2m}\left\{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})\psi\right\}^*\cdot\left\{(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})\psi\right\}\right. \\ &\qquad \left. -\ \psi^*\left(E - V(\boldsymbol{r})\right)\psi\right]d\boldsymbol{r}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{第一項} &= \frac{1}{2m}\sum_{j,k}\psi_j^*\int_V\left\{e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}\boldsymbol{p}N_j(\boldsymbol{r})\right\}^* \\ &\qquad \cdot\left\{e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r})}\boldsymbol{p}N_k(\boldsymbol{r})\right\}d\boldsymbol{r}\psi_k \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j,k}\psi_j^*\int_{v_{jk}}e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{r}\}} \\ &\qquad \times(\boldsymbol{\nabla}N_j(\boldsymbol{r}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}N_k(\boldsymbol{r}))\,d\boldsymbol{r}\psi_k, \\ \text{第二項} &= E\sum_{j,k}\psi_j^*\int_V\left\{e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}N_j(\boldsymbol{r})\right\}^* \\ &\qquad \times\left\{e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r})}N_k(\boldsymbol{r})\right\}d\boldsymbol{r}\psi_k \\ &= E\sum_{j,k}\psi_j^*\int_{v_{jk}}e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{r}\}} \\ &\qquad \times N_j(\boldsymbol{r})N_k(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}\psi_k, \\ \text{第三項} &= \sum_{j,k}\psi_j^*\int_V\left\{e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_j\times\boldsymbol{r})}N_j(\boldsymbol{r})\right\}^*\left(\sum_l V_l N_l(\boldsymbol{r})\right) \\ &\qquad \times\left\{e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r})}N_k(\boldsymbol{r})\right\}d\boldsymbol{r}\psi_k \\ &= \sum_{j,k,l}V_l\psi_j^*\int_{v_{jk}}e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{r}\}} \\ &\qquad \times N_j(\boldsymbol{r})N_l(\boldsymbol{r})N_k(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}\psi_k. \end{aligned}$$

積分 $\int_{v_{jk}} d\boldsymbol{r}$ は $\boldsymbol{r}_j$ を $\boldsymbol{r}_k$ を 2 頂点にもつ有限要素内の体積積分であるから、$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_k + \boldsymbol{\xi}$ により定義される新しい積分変数 $\boldsymbol{\xi}$ を導入すると、行列要素 K_{jk} は

$$\begin{aligned} \mathsf{K}_{jk} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{v_{jk}}e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times(\boldsymbol{r}_k+\boldsymbol{\xi})\}} \\ &\qquad \times(\boldsymbol{\nabla}N_j(\boldsymbol{\xi}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}N_k(\boldsymbol{\xi}))\,d\boldsymbol{\xi} \\ &= e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \\ &\qquad \times\int_{v_{jk}}e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{\xi}\}}(\boldsymbol{\nabla}N_j(\boldsymbol{\xi}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}N_k(\boldsymbol{\xi}))\,d\boldsymbol{\xi} \\ &\approx e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\int_{v_{jk}}(\boldsymbol{\nabla}N_j)\cdot(\boldsymbol{\nabla}N_k)\,d\boldsymbol{\xi} \\ &= e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)}\mathsf{K}_{jk}^0 \end{aligned} \tag{17}$$

と表せる。ここで、磁場が印加されていない場合の行列要素を K_{jk}^0 と表した。2 行目から 3 行目への変形において、有限要素を貫く磁束は磁束量子 h/q に比べ十分小さいとして積分内の位相因子を 1 と近似した。

同様に、

$$\begin{aligned}\mathsf{M}_{jk} &\equiv \int_{v_{jk}} e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{r}\}} \\ &\quad\times\{EN_j(\boldsymbol{r})N_k(\boldsymbol{r}) \\ &\quad -N_j(\boldsymbol{r})\left(\sum_l V(\boldsymbol{r}_k)N_l(\boldsymbol{r})\right)N_k(\boldsymbol{r})\Bigg\}d\boldsymbol{r} \\ &\approx e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)}\mathsf{M}^0_{jk} \qquad (18)\end{aligned}$$

を得る。

磁場中の電子に対する有限要素法は近似的に磁場が印加されていない場合の行列に所謂 Peierls 位相因子をかけるだけで定式化できることが分かる。これは文献 (12) で Peierls が導出した磁場中電子の強束縛近似した Schrödinger 方程式（差分近似と同等 (1)）のアナロジーとなっている。

ここで、式 (17)、(18) の位相因子は $\boldsymbol{A}=B/2(-y,x,0)$ を用いて

$$e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}_k}^{\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot d\boldsymbol{r}\right] \qquad (19)$$

と書ける。ここで、積分記号の矢印は点 $\boldsymbol{r}_k$ から点 $\boldsymbol{r}_j$ へ直線で結ぶ経路に沿って積分することを意味する (6)。右辺の表現を用いると、$\mathrm{rot}\boldsymbol{A}=(0,0,B)$ を満たす任意のゲージに対して

$$\mathsf{K}_{jk} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}_k}^{\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot d\boldsymbol{r}\right]\mathsf{K}^0_{jk} \qquad (20)$$

$$\mathsf{M}_{jk} = \exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}_k}^{\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot d\boldsymbol{r}\right]\mathsf{M}^0_{jk} \qquad (21)$$

が成り立つ。

有限要素内の体積積分中の位相因子を 1 とする近似の影響で数値解の精度が落ちるが、有限要素を小さくすればその近似精度はシステマティックに上がる。この近似が重大な影響を及ぼす場合は、有限要素内の積分において、位相因子をポテンシャル同様に接点間で形状関数を用いて補間し、積分を実行すればよい。その場合の行列 K、M は

$$\begin{aligned}\mathsf{K}_{jk} &= e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\sum_l e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{r}_l\}} \\ &\quad\times\int_{v_{jk}}(\boldsymbol{\nabla}N_j(\boldsymbol{\xi}))\cdot(\boldsymbol{\nabla}N_k(\boldsymbol{\xi}))\,N_l(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi} \qquad (22)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathsf{M}_{jk} &= e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{r}_j)}\sum_n e^{\mathrm{i}\frac{q}{2\hbar}\boldsymbol{B}\cdot\{(\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_j)\times\boldsymbol{r}_n\}} \\ &\quad\times\int_{v_{jk}}\{EN_j(\boldsymbol{r})N_k(\boldsymbol{r})N_n(\boldsymbol{r}) \\ &\quad -\sum_l V(\boldsymbol{r}_k)N_j(\boldsymbol{r})N_l(\boldsymbol{r})N_k(\boldsymbol{r})N_n(\boldsymbol{r})\Bigg\}d\boldsymbol{r} \qquad (23)\end{aligned}$$

と与えられる。

4. 数値計算例

ここでは、式 (17), (18) を用いた計算例を示す。提案手法の近似精度、ゲージ依存性を確認するために、文献 (11) において用いられた、Fig.1 の長方形量子ドット内の固有値問題を解析する。長さ d を N 等分するように有限要素に分割して、3 種類のゲージ $\boldsymbol{A}=B(-y,x,0)/2$ (gauge 1、文献 (11) の (d))、$B(-y,0,0)$ (gauge 2、(a))、$B(0,x,0)$ (gauge 3、(c)) について計算を行った。$N=20$ の場合（要素数 1600）に、低い方から 3 つのエネルギー準位に対応する無次元化した波数 k_0d, k_1d, k_2d の値を文献 (11) の要素数が 1250 の場合の結果と比較したものを Table.1 に示す。

Table 1　Variations in 3 lowest eigen wavenumbers kd for 3 types of gauge.

gauge	k_0d	ref.(11) TABLE I
1	5.079220411952475	5.070
2	5.079220411952162	5.070
3	5.079220411952306	5.071
gauge	k_1d	ref.(11) TABLE I
1	5.2358151469960035	5.224
2	5.235815146996086	5.223
3	5.235815146996177	5.228
gauge	k_2d	ref.(11) TABLE I
1	5.5357147392872115	5.520
2	5.535714739287768	5.520
3	5.535714739287288	5.528

Table.1 より、本論文で提案した手法では、異なるゲージを用いて計算したとしても、計算結果は小数点第 13 位まで（計算精度で）一致している。これは他の分割数に対しても同様である。

次に、Fig.7 に gauge 1 の場合の最低 3 準位の波数の要素数依存性を示す。要素数に対して速やかに収束していることが分かる。残る誤差は積分内の位相因子の近似の影響と考えられる。

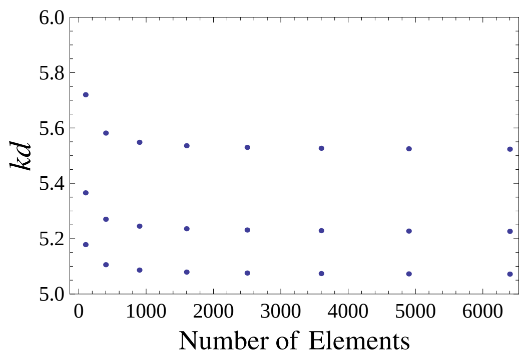

Fig. 7　Variations in 3 lowest eigen wavenumbers kd for the number of elements

磁場の強い場合の例として、文献 (11) の Fig.4 と同じ $\tilde{B}=100$ における 9 番目のエネルギー準位（$kd=10.0247$）での確率密度のようすを Fig.8 に示す。近似的な式 (20), (21) を用いた解析であるにもかかわらず、磁場が強い場合にもよく一致している。

次に、系の異方性が大きな場合の例として、Fig.2 から左

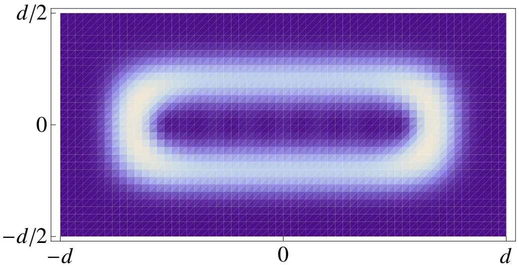

Fig. 8　Density plot of the probability density of the 9th energy level ($kd = 10.0247$) for $\tilde{B} = 100$.

右の導波路を取り去った縦 $8d$、横 d の長方形量子ドットの固有値問題の解析例を示す。この場合にも計算結果は計算精度の範囲で全くゲージには依存しないが、Fig.4 においては最も不利と考えられたゲージ $\boldsymbol{A} = (-By, 0, 0)$ のときの結果を示す。$\tilde{B} = 20$ のときに、伝導問題で用いている $kd = 10$ に最も近い 2 つのエネルギー固有状態 $kd = 10.0159,\ 9.95098$ の確率密度を Fig.9 に示す。確率密度は長方形内全体に広がり、Fig.4 のようになることはない。伝導問題では $kd = 10$ であるが、Fig.6 の場合には $kd = 9.95098$ の状態に対応した状態を励起していることが分かる。

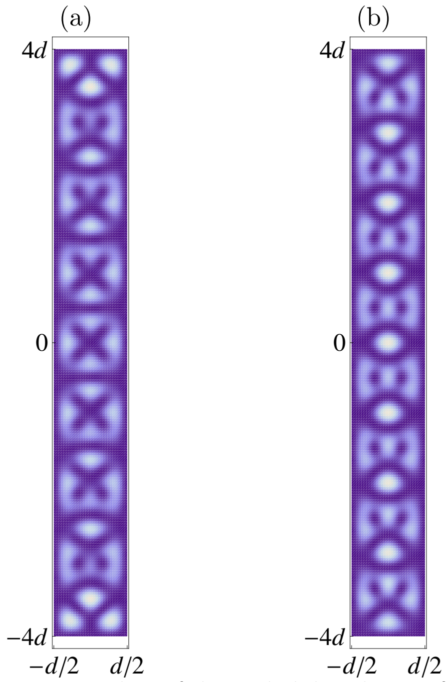

Fig. 9　Density Plots of the probability density for two eigen states $kd = 10.0159$ (a) and $kd = 9.95098$ (b) within the $8d \times d$ rectangle.

5. むすび

磁気的並進演算子とベクトルポテンシャルを含むゲージ不変な運動エネルギー演算子との交換関係を考えることにより、形状関数がピークを持つ節点でベクトルポテンシャルが $\mathbf{0}$ になるような局所的なゲージ変換を行った形状関数を用いて波動関数を展開すると、位相因子だけで磁場の効果を取り込む有限要素法を定式化した。固有値問題に適用することにより、本手法はどのようなゲージをとっても計算精度内で全く同じ解を与えることを示した。本手法では非常に簡便に磁場の効果を取り入れることができ、実用的であり、また、系の形状に関係なく、伝導問題においてはリードの処理が容易であるゲージを選ぶなど優位性があることが示された。今後、本手法を用いた様々な分野での磁場中電子波の有限要素解析が期待される。

参考文献

(1) Supriyo Datta : *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, (1997).

(2) R. L. Schult, H. W. Wyld and D. G. Ravenhall : Quantum Hall Effect and General Narrow-Wire Circuits, Phys. Rev. B, **41** (1990), pp. 12760–12780.

(3) Craig S. Lent and David J. Kirkner : The quantum transmitting boundary method, J. Appl. Phys., **67** (1990), pp. 6353–6359.

(4) L. Ramdas Ram-Mohan : *Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics*, Oxford University Press, (2002).

(5) H. R. Frohne, M. J. Mc Lennan and S. Datta : An Efficient Method for the Analysis of Electron Waveguides, J. Appl. Phys., **66** (1989), pp. 2699–2705.

(6) Tsuyoshi Ueta : Green's Function of a Charged Particle in Magnetic Fields, J. Phys. Soc. Jpn., **61** (1992), pp. 4314–4324.

(7) Tsuyoshi Ueta : Boundary Element Method for Electron Waves in Uniform Magnetic Fields, Engineering Analysis with Boundary Elements, **17** (1996), pp. 69–74.

(8) Y. A. Bychkov, E. I. Rashba : Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers, J. Phys. C: Solid State Phys., **17** (1984), pp. 6039–6045.

(9) Yongjiang Wang, Jian Wang and Hong Guo : Magnetoconductance of a stadium-shaped quantum dot: A finite-element-method approach, Phys. Rev. B, **49** (1994), pp. 1928–1934.

(10) Manhua Leng and Craig S. Lent : Quantum transmitting boundary method in a magnetic field, J. Appl. Phys., **76** (1994), pp. 2240–2249.

(11) Koichi Hirayama, Yasuhiro Honma, Yoshio Hayashi and 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, **10** (1998), pp. 1359–1361.

(12) R. E. Peierls : Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen, Z. Phys., **80** (1933), pp. 763–791.

(13) E. Brown: Bloch Electrons in a Uniform Magnetic Field, Phys. Rev., **133** (1964), pp. A1038–A1044.