計算数理工学論文集 Vol. 13 (2013 年 11 月)，論文 No. 01-131129 JASCOME

磁場中キャビティ内電子波の固有値問題の境界要素法解析

BEM ANALYSIS OF EIGENVALUE PROBLEM OF ELECTRON WAVES BOUNDED WITHIN A CAVITY IN MAGNETIC FIELDS

植田　毅 [1)]

Tsuyoshi Ueta

1) 東京慈恵会医科大学物理学研究室　(〒 182-8570　東京都調布市国領町 8-3-1,　E-mail: tsuyoshi_ueta@jikei.ac.jp)

The boundary element method is a very powerful numerical method for analyzing wave phenomena. It was extended for electron waves in a magnetic field, the extended method has been applied to various transport problems. However, the extended boundary element method has never applied to eigenvalue problems, yet. In this study, we applied the boundary element method to eigenvalue problems of an electron wave within a cavity. We propose a numerical method to search dip of log det of the coefficient matrix of the boundary integral eigenvalue equation. Then, fictitious dips appear. A method to distinguish true eigenvalues by using the tangent of the phase of det is also proposed.

Key Words : Boundary Element Method, Uniform Magnetic Fields, Electron Waves, Eiegenvalue Problem, Cavity Mode

1. はじめに

音波やマイクロ波をはじめとする電磁波については導波路内の伝導現象やキャビティ内の振舞いが古くから定常波動問題として解析されてきた。すなわち，有限要素法，境界要素法など高度な数値計算法を用いてヘルムホルツ方程式の解析が行われてきた。

1980 年代になり，半導体中にバリスティックな 2 次元電子系が実現可能になると，電子波干渉デバイスが精力的に研究されるようになった。電磁波の導波路伝導問題の解析結果は電子波の導波路内での伝導問題の解釈にも用いられた [1, 2, 3, 4]。

しかしながら，電子系の取り扱いでは磁場を導入し，磁気抵抗，コンダクタンスの磁気スペクトルなどを調べる。理論的に磁場中の電子波の振舞いを調べるには与えられた磁場を発生するベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を導入したシュレディンガー方程式

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

を解く必要がある。ここで，m, q, E はそれぞれ電子の有効質量，電荷，エネルギーであり，i は虚数単位，$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものである。また，ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は $\mathrm{rot}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$ のように磁束密度 $\boldsymbol{B}$ を与える。

式 (1) に対しても有限要素法 [5, 6, 7]，境界要素法が開発され [8]，特に，境界要素法は様々な形状の系の伝導問題解析に応用され [9, 10, 11]，量子カオスに関する解析など多くの成果を収めている [12, 13]。しかしながら，磁場中のキャビティ(量子ドット) 内の固有値問題の取り扱いについては，境界要素法は未だ用いられたことがない。本研究では磁場中電子の固有値問題を境界要素法で取り扱う場合の困難を指摘し，その解決方法を示す。

キャビティが無限に高いポテンシャルにより形成されているとすると，キャビティ境界上では波動関数は 0 となり，境界積分方程式は

$$0 = \oint G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; E)\left(\boldsymbol{n}'\cdot\boldsymbol{\nabla}'\psi(\boldsymbol{r}')\right)dS' \tag{2}$$

となる。ここで，$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; E)$ は式 (1) に共役 (随伴) な方程式を満たすグリーン関数である。$\boldsymbol{n}'$ は境界上の外向き単位法線ベクトルである。

したがって，境界上の波動関数の法線微分 $\boldsymbol{n}'\cdot\boldsymbol{\nabla}'\psi(\boldsymbol{r}')$ が未知変数となる。離散化した境界の各ノード上の未知変数の値をベクトルとしたものを $\boldsymbol{b}$，各要素がグリーン関数と形状関数の積の積分で与えられる係数行列を A とすると，最終的に代数方程式

$$A\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{3}$$

となる。

固有値解析は係数行列の行列式の値が 0 となるエネルギーを探索して，固有波数を求める方法が一般的である。この過程に 3 つの困難がある。まず，波動関数の法線微分やグリーン関数は複素量であるから係数行列の行列式も複素量とな

2013 年 8 月 6 日受付，2013 年 10 月 11 日受理

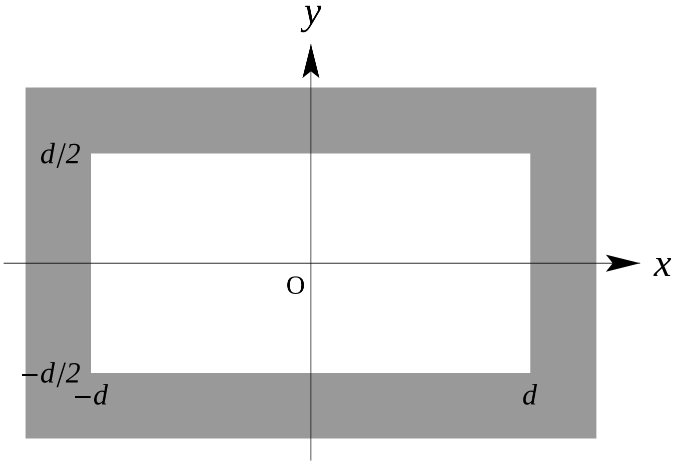

Fig. 1　A $2d \times d$ rectangular cavity.

り，そのゼロ点を探すためには実部，虚部の同時ゼロ点を探す必要がある。行列式の絶対値のゼロ点を探す方法も考えられるが，固有値の前後で値の符号反転がないため，値が 0 となった明確な判定がし難く，固有波数を判別するのが困難な場合が多い。また，境界の分割数が大きくなると行列式の絶対値は極めて大きな値になってしまう。

2. 係数行列の行列式のゼロ点探索の困難

Fig. 1 に示す $2d \times d$ の長方形のキャビティに z 軸正向きの一様な磁場 $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$ がかかっている場合を例に磁場中の電子の固有値問題の扱いが難しい理由を示す。以下では，長さとエネルギー E はそれぞれ磁気的長さ $l_{\mathrm{B}} \equiv \sqrt{\hbar/|qB|}$ とサイクロトロン・エネルギー $\hbar\omega_{\mathrm{C}} \equiv \hbar|qB|/m$ を用いて無次元化する。このとき無次元化されたエネルギー $E/\hbar\omega_{\mathrm{C}}$ を ε とすると，全波数は $K \equiv \sqrt{2\varepsilon}$ と表される。また，磁場を $\tilde{B} \equiv |qB|d^2/\hbar$ のように無次元化する。この場合，グリーン関数 $G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; \varepsilon)$ は

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; \varepsilon) = G_0(z; \varepsilon) \exp\left(i \int_{\boldsymbol{r}'}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{s}) \cdot d\boldsymbol{s}\right) \tag{4}$$

$$G_0(z; \varepsilon) \equiv \frac{1}{4\pi}\Gamma\left(\frac{1}{2} - \varepsilon\right) U\left(\frac{1}{2} - \varepsilon, 1, z\right) e^{-\frac{z}{2}} \tag{5}$$

で与えられる [14]。ただし，$z = (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')^2/2$，$U(\frac{1}{2} - \varepsilon, 1, z)$ は対数的クンマー関数 [15] である。また，式 (4) の積分記号の矢印は始点と終点を結ぶ直線に沿って積分することを意味する。

係数行列の行列式 $\det A$ の大きさが非常に大きくなることについては対数をとればよい。これは磁場中においてもポテンシャル散乱の場合に散乱状態を決定するグリーン関数を含む行列の行列式の対数が散乱状態の位相シフトと関連付けられ，また，位相シフトはフリーデル和則から散乱状態と関連付けられるため物理的にも意味のある量である [16]。また，$\det A$ の計算では最終的に対角成分の積になるから，対角成分の対数の和をとれば大きな値を経由することなく計算することができる。

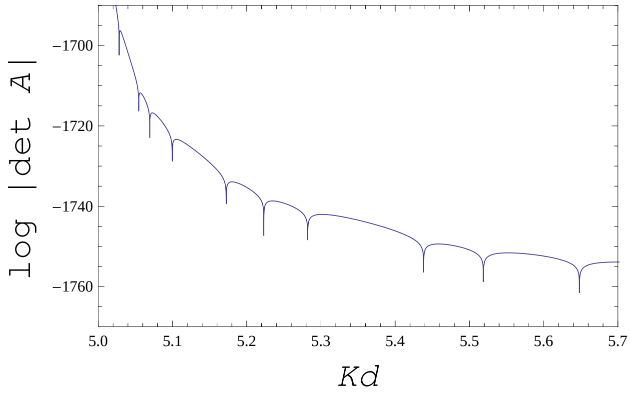

Fig. 2　Kd dependence of $\log|\det A|$ for $\tilde{B} = 25$. The division number of the boundary N is 260.

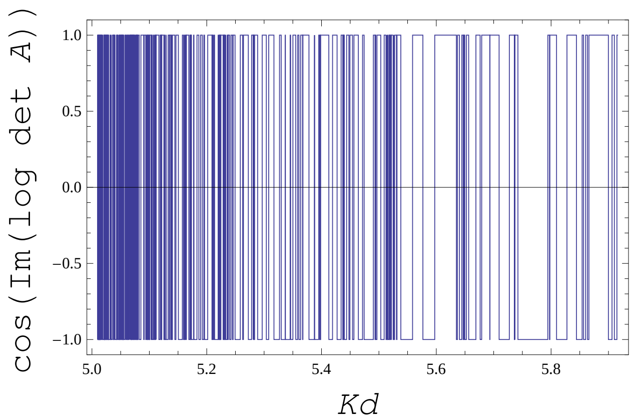

Fig. 3　Kd dependence of $\cos(\Im(\log\det A))$ for $\tilde{B} = 25$, and $N = 260$.

$\tilde{B} = 25$ の場合の $\log|\det A|$ の波数依存性を Fig. 2 に示す。$|\det A| = 0$ が固有状態の条件であり，$\log|\det A|$ が $-\infty$ となる Kd が固有波数である。Fig. 2 には複数の急峻なディップが見られ，それらが固有状態に対応するものと考えられる。しかし，有限要素法で計算したものと比較すると，3 つずつ組になって表れているディップの真ん中のものだけが固有状態であることが分かる。したがって，$\log|\det A|$ の Kd 依存性のみで固有状態を決定することは不可能である。

$\det A$ の実部と虚部の同時ゼロ点を探すことを試みるために $\log\det A$ の虚部 $\Im(\log\det A)$，すなわち $\det A$ の偏角の余弦 (cosine)，正弦 (sine) を Fig. 3，Fig. 4 に示す。どちらも変化が激しく，自動的に同時ゼロ点を探すのは不可能である。

3. 固有状態の特定方法

$\tan(\Im(\log\det A))$ をプロットすると Fig. 5 のように複数の発散はあるものの，比較的なだらかな関数となる。Fig. 5 には局所ゲージ有限要素法 [17] (LG-FEM) で求めた Kd の固有値も一緒に示してある。これから，$\tan(\Im(\log\det A))$ は Kd に対して周期は変化するが余接 (cotangent) 関数のような変化があり，その上に，固有状態の部分にアノマリーが加わっていることが分かる。Fig. 2 においては余接関数的な発散部分においてもディップとなっていることが分かる。

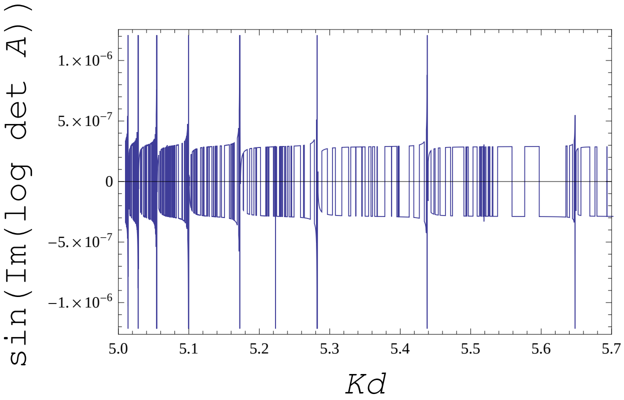

Fig. 4 Kd dependence of $\sin(\Im(\log\det A))$ for $\tilde{B}=25$, and $N=260$.

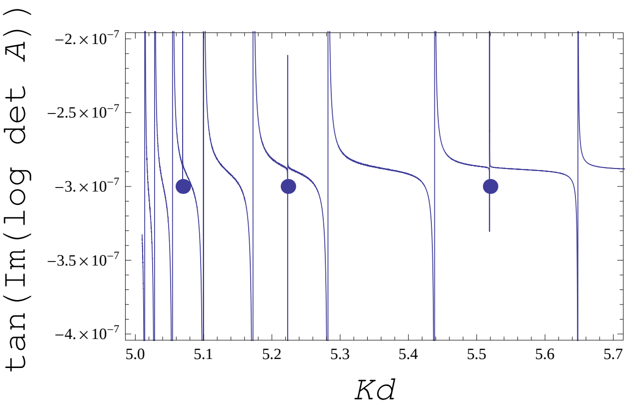

Fig. 5 Kd dependence of $\tan(\Im(\log\det A))$ (solid line) and eigenvalues computed by the local-gauge FEM (circlet) for $\tilde{B}=25$, and $N=260$.

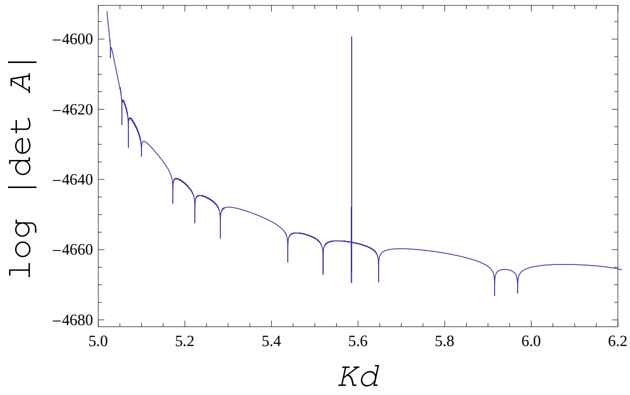

Fig. 6 Kd dependence of $\log|\det A|$ for $\tilde{B}=25$. The division number of the boundary N is 644.

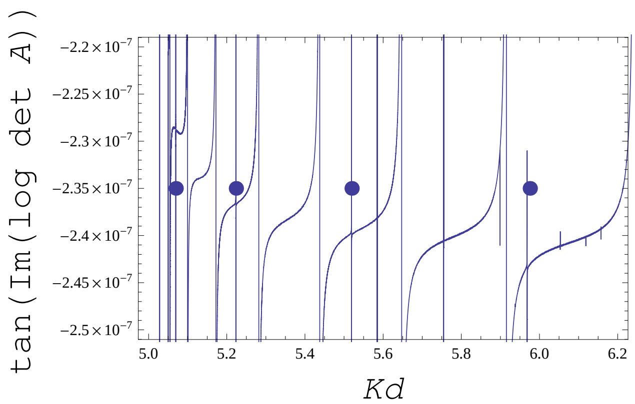

Fig. 7 Kd dependence of $\tan(\Im(\log\det A))$ (solid line) and eigenvalues computed by LG-FEM (circlet) for $\tilde{B}=25$, and $N=644$.

この関係は明らかにクラマース・クローニッヒの関係式 [18] によるものと考えられる。その意味において，Fig. 5 では $\tan(\Im(\log\det A))$ だけから，固有値が特定できるように思われる。

Figs. 2 - 5 に示した計算は境界の分割数が $N=260$ であるが，確認のために，分割数 $N=644$ の場合の結果を Figs. 6, 7 に示す。Fig. 5 と Fig. 7 を比較すると（後者の方が高波数域までプロットしてある），前者はバックグラウンドの変化が余接関数的であるが，後者は正接 (tangent) 関数的な変化になっている。したがって，どちらになるかは境界の分割数によって変化するものでどちらになるかはあまり本質的ではないことが分かる。また，後者には固有状態でない位置にも複数のスパイク（アノマリー）が見られる。これから，$\tan(\Im(\log\det A))$ の Kd 依存性だけから固有状態を特定するのは不可能であることが分かる。しかしながら，Fig. 7 に見られる正接関数的発散と固有値および $Kd=5.585$ のアノマリー以外の位置では Fig. 6 にディップは現れていない。また，$Kd=5.585$ では Fig. 6 にはディップではなく，ディップとピークからなるアノマリーが見られる。以上から，$\log|\det A|$ のディップ（ピークが現れるものは除く）の位置の Kd を求め，$\tan(\Im(\log\det A))$ が正接もしくは余接関数的に発散して

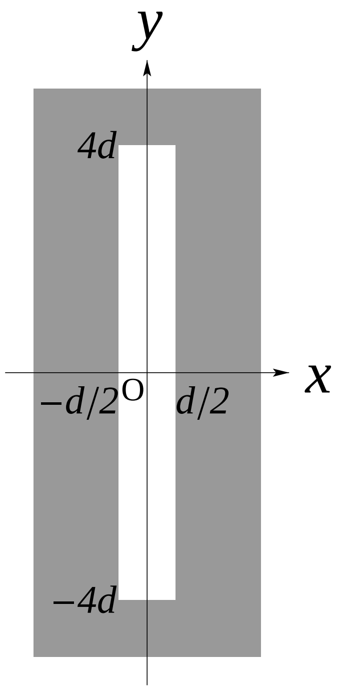

Fig. 8　A $d \times 8d$ rectangular cavity.

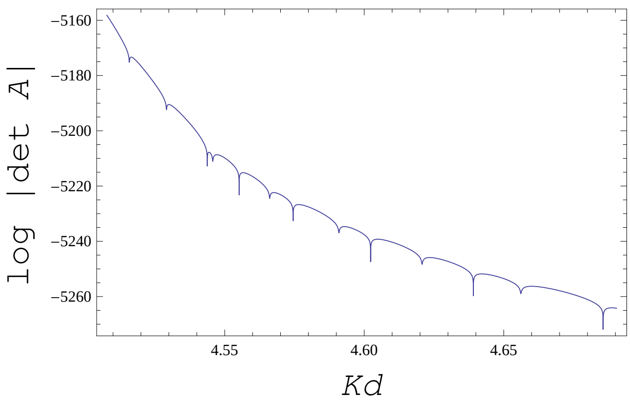

Fig. 9　Kd dependence of $\log|\det A|$ within a $d \times 8d$ rectangular cavity for $\tilde{B} = 20$.

いるものを除くことにより固有値が求まる。

次に，有限要素法では収束性の悪い $d \times 8d$ 長方形キャビティ(Fig. 8) の場合 [17] の計算例を示す。磁場が $\tilde{B} = 20$ の場合の $\log|\det A|$ と $\tan(\Im(\log\det A))$ をそれぞれ Fig. 9，Fig. 10 に示す。 Fig. 9 では，浅いタイプと深いタイプのディップが交互に現れており，深いタイプの位置が固有値に対応している。Fig. 10 は余接関数的な変化の中にほぼ周期的にアノマリーが現れており，それらの位置は Fig. 9 の深いタイプのディップの位置と一致している。この例では $\log|\det A|$ の深いディップを探すだけで固有状態を判別できる。しかし，余接関数的な発散の位置のディップよりも固有状態のディップの方が深くなる根拠が現状でははっきりしていない。その意味において，$\tan(\Im(\log\det A))$ を組み合わせることで，固有値を特定できる。Fig. 10 には LG-FEM を用いた計算された

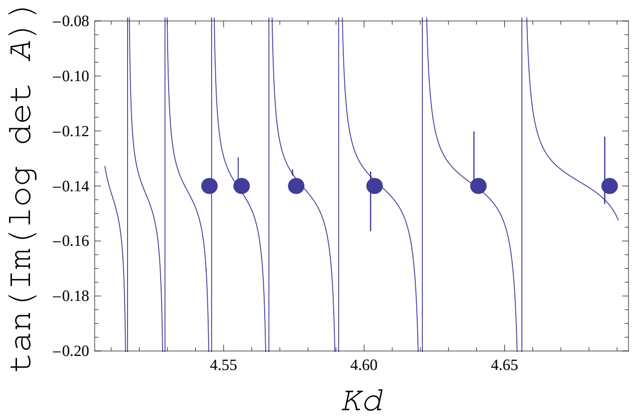

Fig. 10　Kd dependence of $\tan(\Im(\log\det A))$ within a $d\times 8d$ rectangular cavity and eigenvalues computed by LG-FEM (circlet) for $\tilde{B} = 20$.

固有値の位置を点で示してあるが，$\tan(\Im(\log\det A))$ のアノマリーの位置とはずれがある。これは，LG-FEM の解がこれまでの計算（主メモリ 32Mbyte の計算機上で Mathematica を用いた計算）では充分に収束していないためである。しかしながら，$\tan(\Im(\log\det A))$ のアノマリーと固有値が対応していることが確認できる。

4. エネルギー固有値の磁場依存性

磁場中の電子の振舞いの研究においては，コンダクタンスなど様々な物理量の磁場変化に注目する（文献 7, Fig.3）。そこで，Fig.1 に示すキャビティ内の電子について，$\log|\det A|$ のディップ位置（無次元化したエネルギー ε）の磁場依存性を Fig.11 に示す。比較のために LG-FEM を用いて求めた固有値の磁場依存性を曲線で示してある（Fig.12, Fig.13 も同様）。また，Fig.12 は 1 辺 d の正方形のキャビティの場合の $\log|\det A|$ のディップ位置の磁場依存性である。

Fig.11, 12 いずれの場合にも，プロットした点には，2 本の ε が磁場に依存しないグループ (G1)，$\varepsilon < 0.55$ の $\tilde{B}$ に対して減少傾向ではあるが分離不可能なグループ (G2)，磁場に対し急激に増大するグループ (G3)，磁場とともに減少するグループ (G4) の 4 つがある。

G2 はグリーン関数 $G_0(z;\varepsilon)$ が ε が半整数のときに発散するため，$\varepsilon = 0.5$ 近傍で収束性が悪くなっていることに起因する。

LG-FEM による固有値との比較から G4 がエネルギー固有値を表していることが分かる。エネルギー固有値である G4 グループのディップ位置は他のグループとは異なり弱磁場領域で非常に大きくなり，磁場に対して単調に減少する特徴がある。これを理解するために，磁場がかかっていない場合の固有値を ε と同じように無次元化した場合にどのように振舞うのかを調べる。$\tilde{B} = 0$ の場合の $2d \times d$ 長方形キャビティと

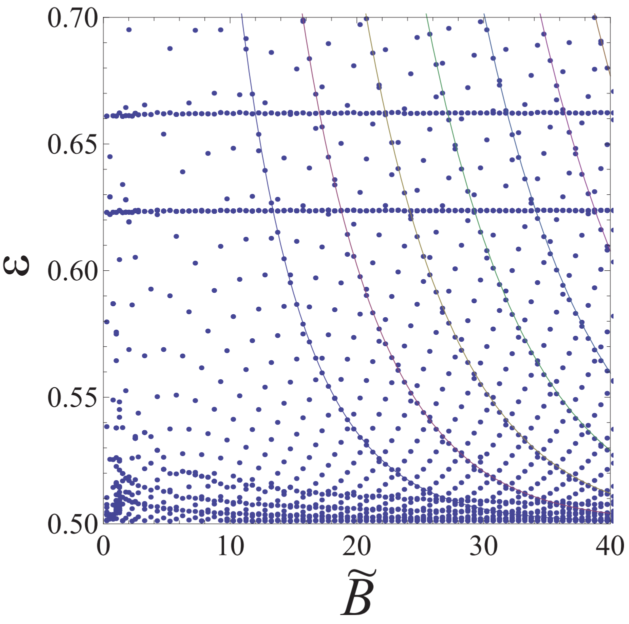

Fig. 11　The magnetic field $\tilde{B}$ dependence of the dip positions of $\log|\det A|$ of the $2d\times d$ rectangular cavity (dots). The eigenenegies computed by LG-FEM are also plotted (solid lines).

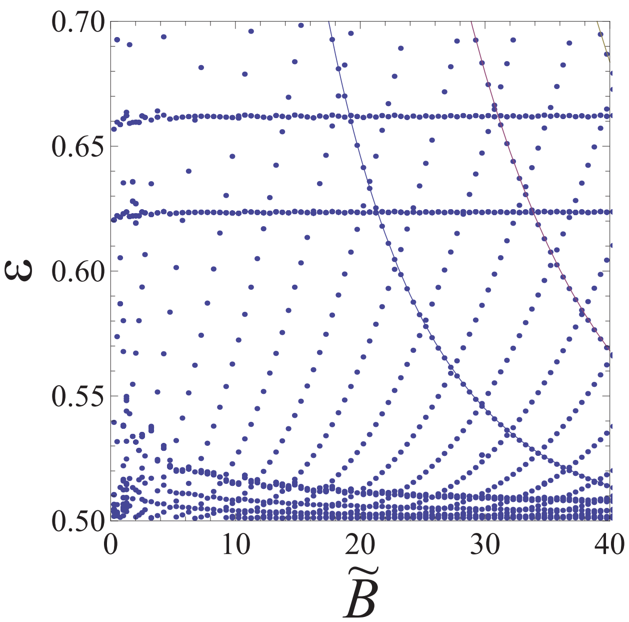

Fig. 12　The magnetic field $\tilde{B}$ dependence of the dip positions of $\log|\det A|$ of a $d\times d$ square cavity (dots). The eigenenegies computed by LG-FEM are also plotted (solid lines).

$d\times d$ 正方形キャビティのエネルギー固有値はそれぞれ

$$E^r_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{l\pi}{2d}\right)^2+\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2\right\} \tag{6}$$

$$E^s_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(\frac{l\pi}{d}\right)^2+\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2\right\} \tag{7}$$

で与えられる。したがって，無次元化した固有エネルギーはそれぞれ

$$\varepsilon^r_{nl} = \frac{1}{2}\pi^2\left\{\left(\frac{l}{2}\right)^2+n^2\right\}\frac{1}{\tilde{B}} \tag{8}$$

$$\varepsilon^s_{nl} = \frac{1}{2}\pi^2\left\{l^2+n^2\right\}\frac{1}{\tilde{B}} \tag{9}$$

となり，無次元化したエネルギー固有値は弱磁場領域では $\tilde{B}$ に反比例して小さくなることから，G4 グループの弱磁場での発散的振舞いが理解できる。実際，磁場中のエネルギー固有値は文献 7 の Fig.3 にあるように磁場に対してほとんど変化しないため，全体として $\tilde{B}$ の減少関数となる。

Fig.11, 12 に示された点のうち，G2, G3 のいずれに属するものもエネルギー固有値には対応しておらず，後者が余接もしくは正接関数的な発散に対応している。

Fig.11, 12 に示した計算では，磁場が強くなった場合，サイクロトロン運動の回転方向とは逆向きにキャビティの壁を伝うエッジ状態が発生し，波動関数が壁近傍に局在することを考慮し，境界の分割長を磁場の平方根に反比例させて変化させている。磁場，エネルギーに関わらず，係数行列 A の次元が同じになるように，境界の分割長をを一定にした $2d\times d$ キャビティについての計算結果を Fig.13 に示す。

Fig.11 と Fig.13 の比較から，分割長が変化しても G3, G4 に変化はないが，G1 は前者においては磁場に依存しなかったが，後者では磁場の増大とともに増加している。また，G2 は Fig.13 においてはほとんど見られなくなっている。このことから，G1, G2 は境界分割に起因する異常であることが分かる。

5. 結言

本研究では，初めて境界要素法を磁場中キャビティ内の電子波の固有値問題に適用した。内部構造のない単純な系においても，固有値方程式の係数行列 A の $\log|\det A|$ には，固有値以外のディップが現れ，固有状態が特定できないことを指摘し，ディップの内，$\tan(\Im(\log\det A))$ において正接もしくは余接関数的に発散していないものが固有状態であると判断できることを示した。これは，文献 16 の式 (5.9) に示されているように，固有値方程式が位相シフトの正接関数の積で書けることのアナロジーであると考えられる。

また，エネルギー固有値の磁場変化が必要な場合には，$\log|\det A|$ のディップ位置を $\tilde{B}-\varepsilon$ 平面にプロットすることにより，真のエネルギー固有値 ε は $\tilde{B}$ に対して減少関数となることから，固有状態以外のものと判別できる。

境界要素法により磁場中キャビティ内の電子のエネルギー固有状態を求められることが示されたが，$\log|\det A|$ の固有

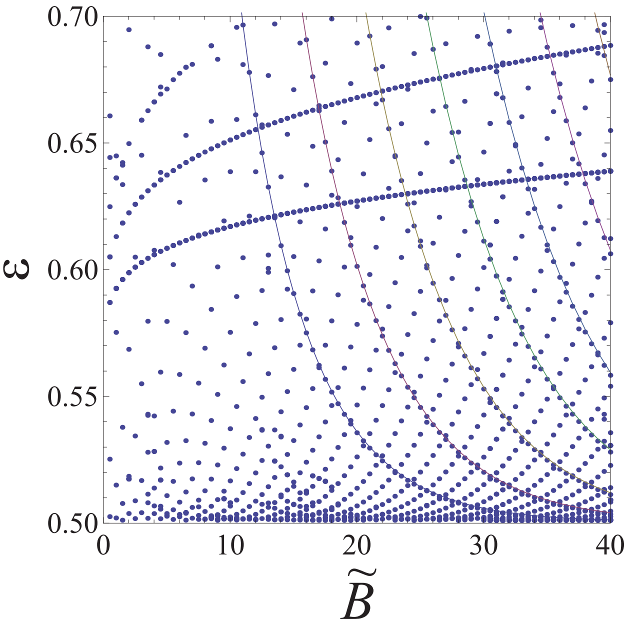

Fig. 13 The magnetic field $\tilde{B}$ dependence of the dip positions of $\log|\det A|$ of the $2d\times d$ rectangular cavity (dots). The boundary is divided into the fractions of a definite length. The eigenenegies computed by LG-FEM are also plotted (solid lines).

状態に対応していないディップの数が磁場が強くなるにしたがって急速に増加するため，多数の固有状態を求める場合には現状では実用的でないと言わざるを得ない。

未だ $\tan(\Im(\log\det A))$ の余接，正接関数的発散の原因とその位置の特定がなされていない。それを解決し，固有値の計算の効率化，自動化などの改善が今後の課題である。

謝辞

本研究は平成 25 年度東京慈恵会医科大学研究助成費により助成されています。

参考文献

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

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

(3) P. A. Knipp and T. L. Reinecke: Boundary-element method for the calculation of electronic states in semiconductor nanostructures, Phys. Rev. B, **54** (1996), pp. 1880–1891.

(4) 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.

(5) 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.

(6) Manhua Leng and Craig S. Lent: Quantum transmitting boundary method in a magnetic field, J. Appl. Phys., **76** (1994), pp. 2240–2248.

(7) 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.

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

(9) Katsuki Amemiya and Kiyoshi Kawamura: Analysis of the Hall Effect in Terms of Magneto-Focusing in Quantum Dots, J. Phys. Soc. Japan, **64** (1995), pp. 1245–1250.

(10) Tsuyoshi Ueta : Boundary Element Method for Electron Transport in the presence of pointlike scatterers in magnetic fields, Phys. Rev. B, **60** (1999), pp. 8213–8217.

(11) Tsuyoshi Ueta: Two-dimensional Electron Systems in Magnetic Fields: The current equipartition law, Advances in Condensed Matter Physics, **2011** (2011), 104843.

(12) Katsuhiro Nakamura, Ken Ito and Yositake Takane: Magnetoconductance in Open Stadium Billiard: Quantum Analogue of Transition from Chaos to Tori, J. Phys. Soc. Japan, **63** (1994), pp. 3210–3213.

(13) Katsuhiro Nakamura: Introduction to chaos and quantum transport Chaos Solitons & Fractals, **8** (1997), pp. 971–993.

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

(15) M. Abramowitz and I. A. Stegun : *Handbook of mathematical functions*, Dover Press, New York, (1970) pp. 358–433.

(16) K. Ohtaka and J. Kondo: Friedel Sum Rule in a Static Magnetic Field, Physica, **85B** (1977), pp. 1–19.

(17) Tsuyoshi Ueta and Yuu Miyagawa: Local Gauge Finite Element Method for Electron Waves in Magnetic Fields, Phys. Rev. E, **86** (2012), 026707.

(18) Ryogo Kubo, Morikazu Toda and Natsuki Hashitsume: *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics* , Springer Verlag; 2 Rev Sub, (1991), pp. 181–182