

アハロノフーボーム系の境界要素法 - グリーン関数の計算 -

Boundary Element Method for Aharonov-Bohm System - evaluation of Green function -

植田 毅

Tsuyoshi UETA

千葉大学総合メディア基盤センター (〒 263-8522 千葉県千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail: ueta@faculty.chiba-u.jp)

Although the vector potential currently considered till then to be on mathematical expedient, it affects on quantum states, especially the phase of wave functions, and Aharonov and Bohm predicted in 1959 that it could be observed. Recently it was reported in the Physical Society of Japan 60th Annual Meeting that the boundary element method (BEM) was applied to an AB system having a singular line magnetic flux. The method was formulated by means of the exact Green function of the system. However, there is a problem in the calculation accuracy of the Green function, and the calculation accuracy of BEM. The present paper discusses the method of calculating the Green function and the calculation accuracy in detail.

Key Words: Aharonov-Bohm effect, Green function, magnetic flux, vector potential, Schrödinger equation

1. はじめに

古典電磁気学では数学的定式化の便宜としてベクトルポテンシャル、スカラーポテンシャルが導入された。スカラーポテンシャルは電位という物理的の意味を持つが、ベクトルポテンシャルはあくまで数学的便宜上のものと考えられていた。ところが、Aharonov と Bohm は磁場が外に漏れない細い磁束を二手に分かれ回り込んだコヒーレントな電子波は磁束の大きさに依存する干渉を起こすことを示した。(1) この系では電子波は磁場に全く触れないが、ベクトルポテンシャルにはさらされている。ベクトルポテンシャルは電子の波動関数の位相に影響し、それが物理的に観測できる。この事実は、ベクトルポテンシャルが物理的に本質的な物理量であることを示していた。この発見の後、この干渉効果は AB 効果と呼ばれ、精力的にこの系の理論的、実験的研究が行われた。(2) AB 効果の実験的観測は様々行われてきたが、磁場の完全な閉じ込めの保証が問題となっていた。(3) 1982 年に日立製作所の外村がリング状の永久磁石を超伝導体で覆うことにより、完全な磁場の閉じ込めを実現し、電子顕微鏡の電子波の干渉により、AB 効果を実験的に確認した。(4) 近年、半導体中にコヒーレントな 2 次元電子系が実現され、半導体微細加工技術により作成した微細な回路で磁気抵抗を測定した場合(この場合、電子は磁場に曝されているが、マイクロトン半径に比べ回路幅が非常に小さいため磁場の影響は無視できる) AB 効果が観測され、磁場中の量子伝導研究では

非常に重要な現象である。(5)

他方、川村は、Fig. 1 に示すような螺旋転位がある立方格子をホッピング伝導する電子(強束縛電子)の支配方程式は、格子間隔に対して波長が十分長い場合に、転位の位置にデルタ関数的な磁束が存在する AB 系の場合の Schrödinger 方程式に帰着することを見出した。(6) このことにより、AB

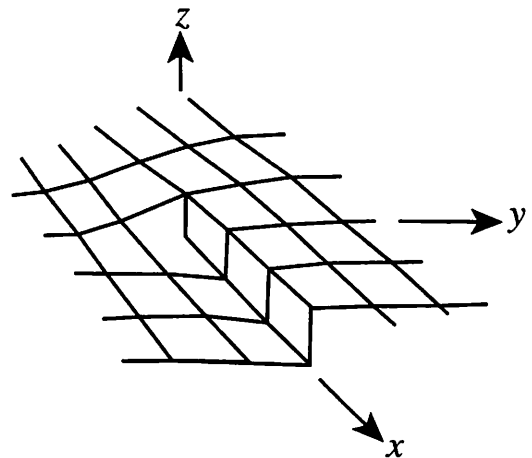


Fig. 1 Illustration of a screw dislocation.

効果は転位が存在する場合の量子伝導という観点からも注目される。(7, 8, 9, 10)

2. AB系の境界要素法

2005年春の日本物理学会において増田らは量子ラチェット効果を調べるために、2つの導波路を持つ円形量子ドットの中心に正三角形の障壁を置き、それと導波路との成す角度によるコンダクタンスの変化を報告した。⁽¹²⁾ その研究では、磁場のかかってない場合、三角形の障壁の中心にデルタ関数状の磁束 (AB 磁束) を印加した場合、一様磁場を印加した場合の計算を境界要素法を用いて行っている。磁場がかかってない場合、一様磁場が印加された場合の境界要素法は既に実用化されている⁽¹¹⁾ が、AB 磁束が印加された系の境界要素法は新たな試みである。この系のグリーン関数は並進対称性もなく、磁束の周りを回転するような電子の運動は多重連結空間での運動で、波動関数の多価性など多くの議論があった。⁽²⁾ 増田らはグリーン関数の厳密解を用いた主張していたが、固有関数による展開表現を用いていることが確認された。⁽¹³⁾ これは実数次のベッセル関数、ハンケル関数及び位相因子の無限和で表現されており、その計算精度には疑問が残る。実際、増田らの計算において、ユニタリティ (確率の保存性) の精度は 10% 以上の誤差を含むものであった。

本論文では、AB 系の厳密なグリーン関数の計算方法を検討し、実用的な精度を実現する境界要素法を検討する。

3. グリーン関数の固有関数展開表現

AB 効果の理論的取り扱いには厳密的取り扱いができるモデル・ハミルトニアンを用いる。モデルでは、無限に長く、無限に小さい半径の直線状ソレノイドを考え、その中に磁束 Φ の磁場が閉じ込められているとする。磁場を z 軸正向きにとると、このときのベクトルポテンシャルは

$$\mathbf{A} = \alpha \left(\frac{\hbar}{|q|} \right) \left(-\frac{y}{2\pi r^2}, \frac{x}{2\pi r^2}, 0 \right) \quad (1)$$

ととれる。ここで、 \hbar はプランク定数、 $q (< 0)$ は電子の電荷であり、 $\hbar/|q|$ は磁束量子である。 α は無次元の実数である。このとき、 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ を満たし、磁場は

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \alpha \left(\frac{\hbar}{|q|} \right) \delta(r) \hat{z}$$

とデルタ関数的な磁場となる。ただし、 \hat{z} は z 軸正向き単位ベクトルである。

このとき、質量 m 、電荷 $q (< 0)$ 電子の運動を記述する Schrödinger 方程式は

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

で与えられ、円柱座標 $r-\phi$ を用いて

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} - i\alpha \right)^2 \right] \psi(r, \phi) = k^2 \psi(r, \phi) \quad (3)$$

と書ける。ここで、 $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ を定義した。

この方程式の原点で有限な値を持つ解は

$$\psi_{l,k}(r, \phi) = \sqrt{\frac{k}{2\pi}} J_{|l-\alpha|}(kr) e^{il\phi}, \quad l: \text{整数} \quad (4)$$

で与えられる。この解は

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty \psi_{l,k}^*(r, \phi) \psi_{l',k'}(r, \phi) r dr d\phi = \delta_{l,l'} \delta(k-k') \quad (5)$$

なる規格直交関係を満たす。ただし、記号 $*$ は複素共役を表す。

この解を用いるとグリーン関数は

$$\begin{aligned} G_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; E) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_0^\infty dk \psi_{l,k}(r, \phi) \frac{1}{E + i\epsilon - \frac{\hbar k^2}{2m}} \psi_{l,k}^*(r_0, \phi_0) \\ &= \frac{m}{2i\hbar^2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il(\phi-\phi_0)} \\ &\quad \times \left\{ \theta(r-r_0) J_{|l-\alpha|}(kr_0) H_{|l-\alpha|}^{(1)}(kr) \right. \\ &\quad \left. + \theta(r_0-r) J_{|l-\alpha|}(kr) H_{|l-\alpha|}^{(1)}(kr_0) \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

と表現できる。⁽¹⁴⁾ ここで、 (r, ϕ) , (r_0, ϕ_0) は \mathbf{r} , \mathbf{r}_0 の円柱座標であり、 ϵ は無限小の正の実数である。 $\theta(x)$ は単位ステップ関数である。

増田らは境界要素法のグリーン関数の計算にこの固有関数展開表現を用いて評価している。しかし、このような級数展開は収束が遅い例が多く、数値計算に用いる場合には気をつけなければならない。実際、増田らは $\alpha = 0$ における収束性、計算精度の確認も行っていないとのことである。そこで、この級数の振る舞い、収束性を確認する。

まず、対称性を利用するために、式 (6) で α を $\alpha + n$ (n は整数) とすることにより

$$G_{\alpha+n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; E) = e^{in(\phi-\phi_0)} G_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; E) \quad (7)$$

なる関係を得る。これより、グリーン関数の本質的な計算は $0 \leq \alpha < 1$ の範囲で行えばよいことがわかる。

厳密解と比較するため、 $\alpha = 0$ の場合の収束性を見る。

このときのグリーン関数は 2次元自由空間のヘルムホルツ方程式のグリーン関数となるから、厳密解はよく知られているように⁽¹⁵⁾

$$g_{\alpha=0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; E) \equiv \frac{2i\hbar^2}{m} G_{\alpha=0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; E) = H_0^{(1)}(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|) \quad (8)$$

となる。 $H_0^{(1)}(z)$ は 0 次の第 1 種ハンケル関数である。

ここで、

$$\begin{aligned} g_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Phi, N_{\max}) &\equiv \sum_{l=-N_{\max}}^{N_{\max}} e^{il\phi} \\ &\quad \times \left\{ \theta(r-r_0) J_{|l-\alpha|}(kr_0) H_{|l-\alpha|}^{(1)}(kr) \right. \\ &\quad \left. + \theta(r_0-r) J_{|l-\alpha|}(kr) H_{|l-\alpha|}^{(1)}(kr_0) \right\} \quad (9) \\ \Delta g(N_{\max}) &\equiv |g_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Phi, N_{\max} + 10) \\ &\quad - g_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Phi, N_{\max})| \quad (10) \end{aligned}$$

を定義する。これ以後の議論においては特に断らない限り、距離は波数 k でスケールしているものとする。また、 $g_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \Phi, N_{\max})$ を N_{\max} の関数と見る場合、 $g(N_{\max})$ と略記する。

$\Delta g(N_{\max}) < 10^{-9}$ となるような N_{\max} の値が $r, r_0, \Phi \equiv \phi - \phi_0$ によりどのように変化するかを見る。Fig.2 に $r_0 = 1, \Phi = 0$ とした場合の N_{\max} の $(r - r_0)$ 依存性を示す。これか

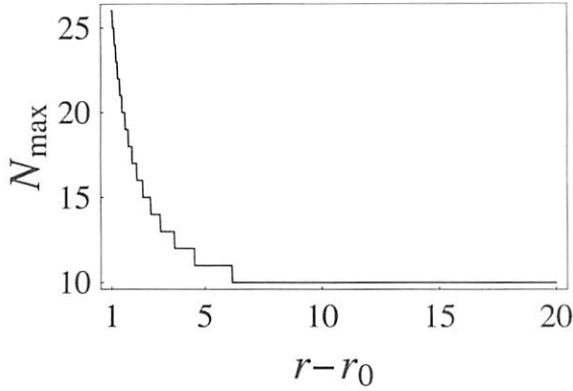


Fig.2 $(r - r_0)$ -dependence of N_{\max} securing the convergence for $r_0 = 10, \Phi = 0$ and $\alpha = 0$.

ら、 r, r_0 の距離の差が大きくなほど収束が速いことが分かる。しかし、境界要素法で係数行列の対角成分の計算に現れる特異積分で重要となる $(r - r_0)$ が小さな領域では N_{\max} をかなり大きくとらなければ収束しない可能性がある。次に、Fig.3 に $r_0 = 10, \Phi = 0$ とした場合の N_{\max} の $(r - r_0)$ 依存性を示す。この図から、 $r \sim r_0$ で、その値が大きくな場合には式 (6)

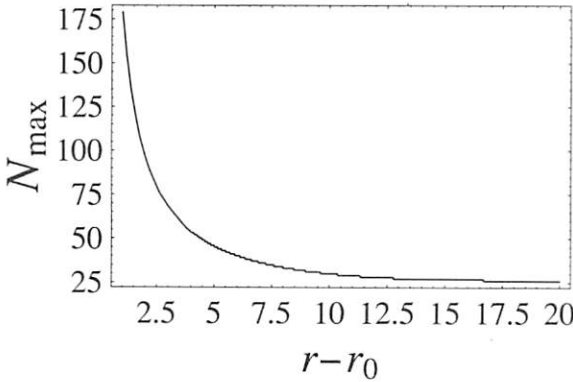


Fig.3 $(r - r_0)$ -dependence of N_{\max} securing the convergence for $r_0 = 10, \Phi = 0$ and $\alpha = 0$.

の収束が非常に悪くなることが分かる。これは、磁束の存在する原点から離れた位置で2点 r, r_0 の距離が近いという意味ではない。それは、 $\Phi = \pi$ の場合、すなわち、 r, r_0 が逆向きである場合でも、 N_{\max} の $(r - r_0)$ 依存性は大きな変化は見られないからである。Fig.4 に $r_0 = 10, r = 11$ とした場合の N_{\max} の Φ 依存性を示す。ノイズのような Φ 依存性が見られるが、 N_{\max} の値が数倍になるなど大きな変化はないと言える。

収束性が r, r_0 の値に強く依存するのは高次のベッセル関数が遠方で大きな値を持つことに起因していると考えられるが、振る舞いは単純ではなく、それだけで説明はできない。

これまで、収束性のみを見てきたが、収束したグリーン関数の値そのものは磁束がない場合の厳密解の値に収束精

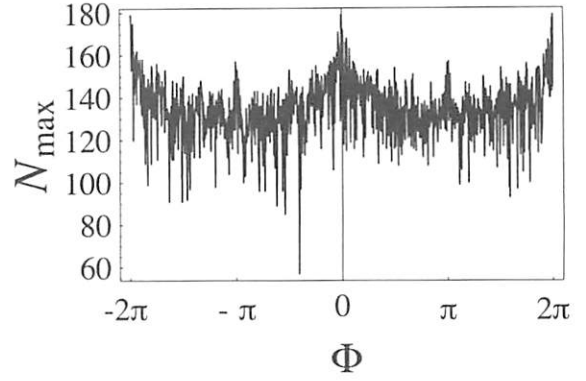


Fig. 4 Φ -dependence of N_{\max} securing the convergence for $r_0 = 10, r = 11$ and $\alpha = 0$.

度で一致している。表1に $r_0 = 1.0, r = 1.002$ の場合についていくつかの Φ について、 $N_{\max} = 1000, 1500$ の場合の $g(N_{\max})$ の値と厳密解を示す。実部は十分収束しているが、虚部が $N_{\max} = 1500$ でも十分収束していないことが分かる。

次に、 α が有限の場合の収束性を見る。周期性を回避するために $\alpha = 5/13, \Phi = 1$ の場合を考える。 $r_0 = 1, r = 1.1, r_0 = 1, r = 1.01, r_0 = 5, r = 5.01$ について、Fig.5、Fig.6、Fig.7 に両対数プロットで示す。これらから、一般に

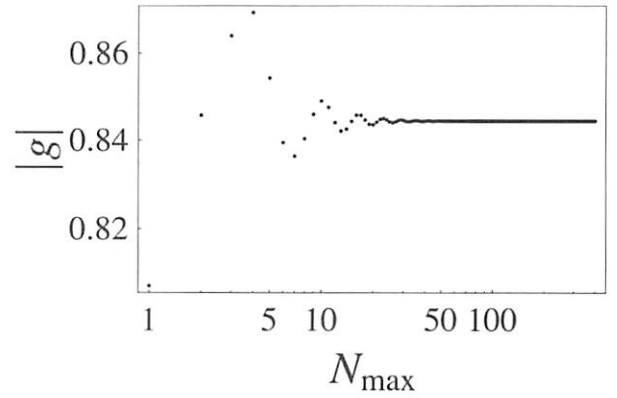


Fig. 5 $g(N_{\max})$ for $r_0 = 1, r = 1.1, \Phi = 1$ and $\alpha = 5/13$.

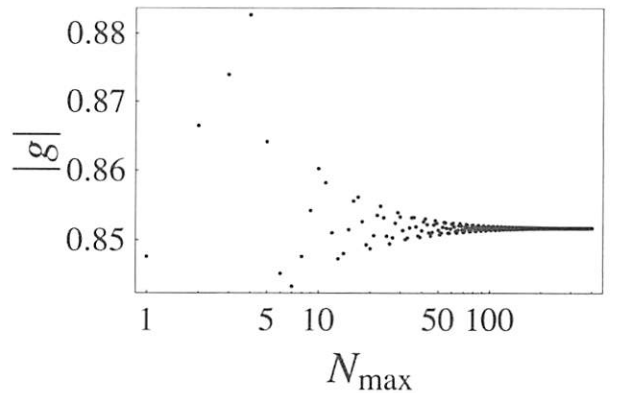


Fig. 6 $g(N_{\max})$ for $r_0 = 1, r = 1.01, \Phi = 1$ and $\alpha = 5/13$.

Table 1 $g(N_{\max})$ の値と厳密解の比較 ($r_0 = 1.0, r = 1.002, \alpha = 0$)

$\Phi = 0.0$

| N_{\max} | $g(N_{\max})$ |
|----------------|------------------------------------------|
| 1000 | $0.99999900000025 - 3.9989679274386676i$ |
| 1500 | $0.99999900000025 - 4.021814033705965i$ |
| 厳密解 | $0.99999900000025 - 4.030142021314736i$ |
| FORTRAN (1000) | (0.999999,-2.86321129) |

$|\Phi| = \pi/2$

| N_{\max} | $g(N_{\max})$ |
|----------------|--------------------------------------------|
| 1000 | $0.5583635990604601 + 0.345257530527034i$ |
| 1500 | $0.5583635990604601 + 0.3452899972541529i$ |
| 厳密解 | $0.5583635990604602 + 0.3453005658712882i$ |
| FORTRAN (1000) | (0.558363599,0.339411639) |

$|\Phi| = \pi$

| N_{\max} | $g(N_{\max})$ |
|----------------|---------------------------------------------|
| 1000 | $0.22273745900265615 + 0.5105455099502094i$ |
| 1500 | $0.22273745900265615 + 0.5105780272624263i$ |
| 厳密解 | $0.22273745900265643 + 0.5105886099980487i$ |
| FORTRAN (1000) | (0.222737459,0.516414218) |

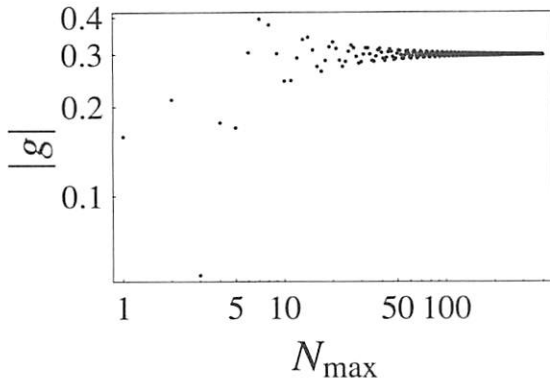


Fig. 7 $g(N_{\max})$ for $r_0 = 5$, $r = 5.01$, $\Phi = 1$ and $\alpha = 5/13$.

は $|g(N_{\max})|$ は振動しながら収束することが分かる（振動しない場合もある）。したがって、 N_{\max} の選択には注意が必要である。

$\alpha = 0$ の場合同様、 r_0 , r の差が大きければ速やかに収束し、小さくなると収束が遅くなる。また、 r_0 , r の差が小さく、それぞれの値が大きい場合に収束が遅くなる。ここに示した、 $|r - r_0| > 0.01$ の範囲であれば、 $N_{\max} < 400$ で十分収束している。

しかしながら、この手法には致命的な困難が伴う。これらの計算は Mathematica を用いて行ったが、 N_{\max} が約 150 以上の和を計算できるのは Windows 版のみで、MacOS-X 版、UNIX 版では実行状態のまま、Windows 版での計算時間の 10 倍以上の時間が経過しても計算が終わらない。どのプラットフォームの Mathematica も同じ処理を行っているはずなので、CPU 内での数値の処理方法の差異であると考えられる。それほど微妙な計算を行っていると言える。また、多くの数値計算ライブラリーの実数次ベッセル関数は単精度でしか提供されておらず（例えば、MSL2 等）、多くの和をとった場合、計算精度が問題となる。単精度の実数次ベッセル関数を用いた FORTRAN での数値計算結果を表 1 に示している。この計算結果は $N_{\max} = 1000$ の場合と $N_{\max} = 1500$ の場合は同じ値に収束している。しかし、厳密解と比較すると、実部は正しい値に収束しているが、虚部は厳密解からずれた値に収束していることが分かる。収束したとしても正しい値であるとは限らないため注意が必要である。

以上のように、 $|r - r_0|$ が非常に小さい場合については、他の計算方法が必要となる。

4. グリーン関数の積分表現

この系のグリーン関数は $k^2 < 0$ の場合に積分表現が与えられている。⁽¹⁶⁾ その積分表現は解析接続して、

$$\frac{\pi \hbar^2}{m} G_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; E) = \begin{cases} e^{-i2\pi\alpha} \\ 1 \\ e^{i2\pi\alpha} \end{cases} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) - \frac{\sin \pi\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ds H_0^{(1)}(kR(s)) \frac{e^{-\alpha(s-i\Phi)}}{1 + e^{-s+i\Phi}} \quad (11)$$

と与えられる。ここで、 $R^2(s) \equiv r^2 + r_0^2 + 2rr_0 \cosh(s)$ を定義した。また、右辺第一項の $\{ \}$ の中は Φ の値が $(-2\pi, -\pi)$, $(-\pi, \pi)$, $(\pi, 2\pi)$ それぞれの範囲にある場合に対応する。

この積分表現は $\alpha = 0$ とすると、容易に 0 次の第 1 種ハンケル関数になることが確認でき便利である。また、0 次のハンケル関数のみで書かれているので、FORTRAN での数値計算でも問題が生じない。

第 2 項の積分範囲が $[-\infty, \infty]$ であるが、被積分関数を

$$f(s, \Phi) = H_0^{(1)}(kR(s)) \frac{e^{-\alpha(s-i\Phi)}}{1 + e^{-s+i\Phi}}$$

として、 $r = r_0 = 0.001$, $\alpha = 0, 0.5$ について、 $|f(s, \Phi)|$ のようすを Fig. 8, 9 に示す。 $|f(s, \Phi)|$ は積分変数 s 方向について

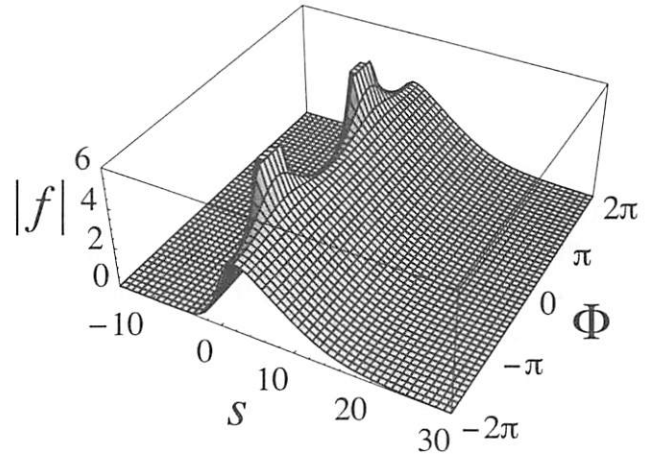


Fig. 8 $|f(s, \Phi)|$ for $r_0 = r = 0.001$ and $\alpha = 0$.

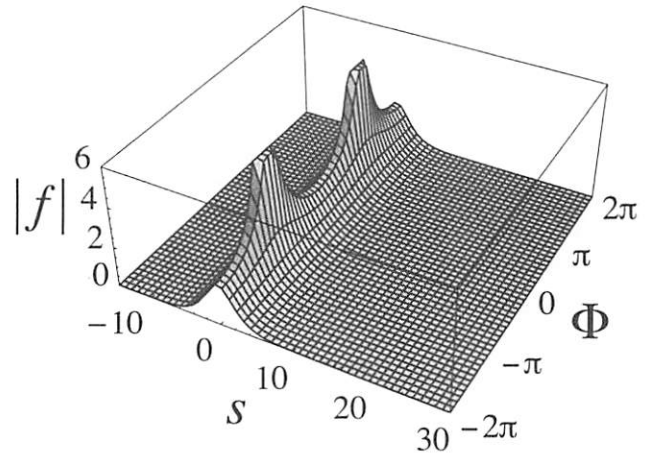


Fig. 9 $|f(s, \Phi)|$ for $r_0 = r = 0.001$ and $\alpha = 0.5$.

は $(-10, 20)$ の範囲でピークを持ち、その外では強く減衰する。 $(s, \Phi) = (0, \pm\pi)$ において発散することを除けば、 Φ が変化しても状況は変わらない。したがって、積分は十分な精度で有限範囲の積分で近似できる。しかしながら、被積分関

数 $f(s, \Phi)$ は、 $H_0^{(1)}(kR(s))$ を含み、 $R(s)$ の中には $\cosh(s)$ が含まれるため、その範囲で数万回の振動をする。また、その振動は等間隔ではなく、ピーク付近に集中している。そのため、通常の分割では十分な収束が得られない。更に計算法を検討する必要がある。

5. まとめ

本研究では線状磁束がある系での電子の境界要素法を実現するべく、そのグリーン関数の計算法、計算精度について検討した。式 (6) は $k|r - r_0| > 0.1$ 程度の範囲では利用できるが、それより近い場合には他の方法が必要となる。積分表現は $[-\infty, \infty]$ の範囲での積分であるが、十分な精度で有限範囲での積分で近似できる。しかし、被積分関数の激しい振動のために数値積分を十分な精度で実行するためには、その方法の検討が必要である。

しかし、いずれの方法でグリーン関数が数値計算できたとしても、1つの (r, r_0) の組に対して計算に時間がかかりすぎる。

また、境界要素法に用いるには、グリーン関数の微分の数値計算が必要である。式 (6) のステップ関数の微分のデルタ関数はキャンセルして現れないが、微分では項数が2倍になるので時間がグリーン関数そのものより時間がかかる。また、式 (11) の微分は右辺第一項の位相因子の微分の処理が問題となる。数値計算を実行できたとしても、実用的、効率的な計算手法とは言い難い。他の方法の検討が必要であろう。

川村らが境界のない AB 系について、積分方程式を用いて解析している。⁽¹⁷⁾ これは、原点以外には磁場が存在していないので、局所的には磁場がないときのグリーン関数をゲージ変換すればよいことを用いている。そして、磁束を周回した場合に付け加わる位相因子と波動関数の一価性

$$\phi(r, \phi = 0) = \exp(i2\pi\alpha)\phi(r, \phi = 2\pi) \quad (12)$$

の条件を境界条件として課している。この場合、グリーン関数はベクトルポテンシャルが $\mathbf{0}$ である場合のグリーン関数を用いることができるので便利である。境界を持つ系の場合、与えられた系それぞれについて境界条件を考えないといけなないので面倒になるが、この手法が適用可能かどうか検討する価値が十分ある。

参考文献

- (1) Y. Aharonov and D. Bohm: Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory, Phys. Rev. Vol. 115, No.3, 1959, pp.485-491.
- (2) 大貫義郎: アハロノフ-ボーム効果, 物理学最前線 9, 大槻義彦編 (共立出版, 東京, 1985) pp.3-64.
- (3) R. G. Chambers: Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux, Phys. Rev. Lett., Vol. 5, No. 1, 1960, pp.3-5.
- (4) Akira Tonomura, Tsuyoshi Matsuda, Ryo Suzuki, Akira Fukuhara, Nobuyuki Osakabe, Hiroshi Umezaki, Junji Endo, Kohsei Shinagawa, Yutaka Sugita, and Hideo Fujiwara: Observation of Aharonov-Bohm Effect by Electron Holography, Phys. Rev. Lett., Vol. 48, No. 21, 1982, pp.1443-1446.
- (5) S. Datta: Electronic Transport in Mesoscopic Systems, CAMBRIDGE University Press.
- (6) Kiyoshi Kawamura: A New Theory of Electrons Due to Spiral Dislocations, Zeitschrift für Physik B, Vol. 29, 1978, pp.101-106.
- (7) Yoichi Irie and Kiyoshi Kawamura: Solution of an Extended Aharonov-Bohm Problem in a Theory of Dislocation Scattering, Progress of Theoretical Physics, Vol. 70, No. 3, 1983, pp.674-686.
- (8) 北原和夫: 転位空間における電子の運動 - 経路積分の方法 -, 数理科学, No. 231, september, 1982, pp.22-27.
- (9) 北原和夫: Random Walk の一般化について, 数理科学, No. 216, june, 1981, pp.12-18.
- (10) 川村 清: 空間のトポロジカルな異常性と波動, 数理科学, No. 231, september, 1982, pp.28-36.
- (11) Tsuyoshi Ueta : Boundary Element Method for Electron Waves in Uniform Magnetic Fields, Engineering Analysis with Boundary Elements, Vol. 17, No. 1, 1996, pp.69-74.
- (12) 増田俊平, 中村勝弘: 解放系量子ドットの量子輸送:ドットの幾何学的対称性と AB 振動, 日本物理学会講演概要集, 第 60 巻, 第 1 号, 第 4 分冊, 2005, p.645, 25aZC-8.
- (13) 増田俊平: 私信.
- (14) Martin Sieber: Semiclassical treatment of diffraction in billiard systems with a flux line, Phys. Rev. E, Vol. 60, No. 4, 1999, pp.3982-3991.
- (15) E. N. Economou: Green's functions in quantum physics, Springer, 1990. pp.12-13.
- (16) P. Stovicek: The Green function for the two-solenoid Aharonov-Bohm effect, Physics Letters A, Vol. 142, No. 1, 1989, pp.5-10.
- (17) Kiyoshi Kawamura, Yasunari Zempo and Yoichi Irie: The Solution of the Aharonov-Bohm Equation, Progress of Theoretical Physics, Vol. 67, No. 5, 1982, pp.1263-1277.