

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法解析

Boundary element analysis of electron wave scattering by an arbitrary-shaped magnetic moment

宮川 悠¹⁾, 植田 賀²⁾

Yuu MIYAGAWA, Tsuyoshi UETA

- 1) 千葉大学自然科学研究科 (〒 263-8522 千葉県千葉市弥生町 1-33, E-mail: myuu@graduate.chiba-u.jp)
2) 千葉大学総合メディア基盤センター (〒 263-8522 千葉県千葉市弥生町 1-33, E-mail: ueta@faculty.chiba-u.jp)

In ballistic transport of 2-dimensional electron systems (2DES), when magnetic scatterers are introduced, the exchange energy removes the spin degeneracy. Hence, up spin and down spin electrons contribute to conductance differently. Then, various new aspects are expected. In this paper the boundary element method is extended so that 2DES including some arbitrary-shaped magnetic moments of finite strength can be dealt with. As examples, the extended method is applied to some models. The results enable to observe visually spin flip due to the magnetic moments. It is certain that the method is sufficiently effective for the analysis of such the systems, and some interesting results are obtained. Using the method the analysis of a spin filter making use of magnetic moments is expected.

Key Words: mesoscopic systems, magnetic moment, spin flip

1. はじめに

これまでの半導体デバイスは非磁性体で作成されており、スピニによる現象は期待できなかった。近年、半導体に磁性を導入する試みが盛んに行われており、半導体中にわずかに強磁性体原子を組み込んだ希薄磁性半導体などが開発された。その応用として、電子の電荷だけではなくスピニ状態をも制御する半導体スピントロニクスが注目を浴びている。デバイスは、GaAs と AlGaAs のヘテロ界面に形成されるパリスティックな 2 次元電子系をナノテクノロジーを用いて作成される⁽¹⁾。デバイス内で電子はコヒーレントであるため、電子伝導にデバイスの形状が大きな影響を持つ。またこのような系での伝導特性、特にコンダクタンスは、Landauer の公式⁽²⁾によれば透過、反射係数から求めることができる。境界要素法は複雑形状の系を容易に扱え、透過、反射係数を直接解として求められるという大きな利点を持つ。しかしながら、磁気モーメントがある場合は波動関数はスピノルとなり、Schrödinger 方程式においてアップスピニ、ダウンスピニの波動関数が混ざり合った形となるためそのままでは境界要素法を適用できない。そこで、Schrödinger 方程式が Helmholtz 方程式となるような変換を行い、変換した波動関数に対して境界積分方程式をたてる。本論文では、この拡張した境界要素法を用いて、任意形状の磁気モーメントが存在

する系の解析を行う。

2. 境界積分方程式

電子の磁気モーメント \mathbf{m} はスピニ角運動量演算子 \mathbf{s} 、パウリのスピニ行列 $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を用いて

$$\mathbf{m} = 2\mu_B \frac{\mathbf{s}}{\hbar} = \mu_B \boldsymbol{\sigma} \quad (1)$$

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

と与えられる。ただし、 μ_B はボア磁子で $\mu_B \equiv e\hbar/(2m_e) = 9.27 \times 10^{-24} [J/T]$ である (m_e は電子の質量)。したがって、電子と磁化ベクトル $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ の相互作用エネルギーは

$$\Delta E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{M} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M} \quad (3)$$

である。また、波動関数はスピニを考慮すればアップスピニ、ダウンスピニの波動関数をそれぞれ ψ_{\pm} として、スピノル

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (4)$$

で表せる。磁化ベクトル $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ がある場合の Schrödinger 方程式はスピノル $\psi(\mathbf{r})$ を用いて、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

となる。長さを d でスケールし、 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 、 $\tilde{k} = kd$ 、 $\nabla^2 = \nabla^2 d^2 / h^2 = \tilde{M}$ とすると、式(5)は

$$\left(-\tilde{\nabla}^2 - \sigma \cdot \tilde{M}\right) \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = \tilde{k}^2 \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad (6)$$

と無次元化される。以降は、 $\tilde{\cdot}$ を省略する。式(6)の成分を示すと

$$\begin{cases} -\nabla^2 \psi_+ = (k^2 + M_z) \psi_+ + (M_x - iM_y) \psi_- \\ -\nabla^2 \psi_- = (k^2 - M_z) \psi_- + (M_x + iM_y) \psi_+ \end{cases} \quad (7)$$

となる。ただし、 $M = (M_x, M_y, M_z)$ である。このように、磁化が存在することによってスピンが混ざることがわかる。

$$-\nabla'^2 G_{\pm}(r, r') = (k^2 \pm M_z) G_{\pm}(r, r') + \delta(r - r') \quad (8)$$

をみたすグリーン関数 $G_{\pm}(r, r')$ を定義する。2次元系であるから0次第1種のハンケル関数 $H_0^{(1)}$ を用いて

$$G_{\pm}(r, r') = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\sqrt{k^2 \pm M_z} |r - r'|) \quad (9)$$

と与えられる。式(7)と式(8)より、 ψ_{\pm} に関する境界積分方程式は

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(r) = & \oint [G_{\pm}(r, r') \nabla' \psi_{\pm}(r') - \psi_{\pm}(r') \nabla' G_{\pm}(r, r')] \cdot n dS' \\ & - \int G_{\pm}(r, r') \mathcal{M}_{\pm}(r') \psi_{\mp}(r') dV' \end{aligned} \quad (10)$$

となる。ただし、 $\mathcal{M}_{\pm}(r') = -M_x(r') \pm iM_y(r')$ とした。式(10)の右辺第2項に波動関数を含む体積積分の項が現れる。我々はこれまで、点状の磁性散乱体について十分にその半径が小さいものとし、近似的境界要素法を定式化し応用してきた。^(3, 4) 本論文では、任意形状の磁性散乱体を取り扱えるよう式(7)を対角化する。

磁化ベクトル M を一定であると見なせる領域に分割する。その j 番目の領域において波動関数

$$\phi_{\pm}^{(j)} = (M^{(j)} \pm M_z^{(j)}) \psi_{\pm}^{(j)} \pm (M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}) \psi_{\mp}^{(j)} \quad (11)$$

を定義する。ここで $M^{(j)} = |\mathbf{M}^{(j)}|$ である。これを式(7)に代入すれば、 $\phi_{\pm}^{(j)}$ は Helmholtz 方程式

$$-\nabla^2 \phi_{\pm}^{(j)} = (k^2 \pm M^{(j)}) \phi_{\pm}^{(j)} \quad (12)$$

を満たす。よって、グリーン関数 $G_{\pm}^{(j)}(r, r')$ が満たす式

$$-\nabla'^2 G_{\pm}^{(j)}(r, r') = (k^2 \pm M^{(j)}) G_{\pm}^{(j)}(r, r') + \delta(r - r') \quad (13)$$

と式(12)より $\phi_{\pm}^{(j)}$ に関する領域 j での境界積分方程式は

$$\begin{aligned} \phi_{\pm}^{(j)}(r) = & \oint \left(G_{\pm}^{(j)}(r, r') \nabla' \phi_{\pm}^{(j)}(r') \right. \\ & \left. - \phi_{\pm}^{(j)}(r') \nabla' G_{\pm}^{(j)}(r, r') \right) \cdot n dS' \end{aligned} \quad (14)$$

となる。このように式(10)から通常の積分方程式が得られる。しかしながら、境界積分方程式を自己無撞着に解く必要

があるが、 $\phi_{\pm}^{(j)}(r)$ の法線方向微分は境界で連続ではない。式(11)の逆変換

$$\begin{pmatrix} \psi_{+}^{(j)} \\ \psi_{-}^{(j)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2M^{(j)}} \begin{pmatrix} \phi_{+}^{(j)} + \phi_{-}^{(j)} \\ \frac{M_z^{(j)} - M_z^{(j)}}{M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}} \phi_{+}^{(j)} - \frac{M_z^{(j)} + M_z^{(j)}}{M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}} \phi_{-}^{(j)} \end{pmatrix} \quad (15)$$

を用いて、 $\psi_{\pm}^{(j)}$ の境界積分表示を求める。最終的に

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}^{(j)}(r) = & \oint \left[\nabla' \psi_{\pm}^{(j)}(r') \left(M_{\pm}^{(j)} G_{\pm}^{(j)}(r, r') + M_{\mp}^{(j)} G_{\mp}^{(j)}(r, r') \right) \right. \\ & \left. - \psi_{\pm}^{(j)}(r') \left(M_{\pm}^{(j)} \nabla' G_{\pm}^{(j)}(r, r') + M_{\mp}^{(j)} \nabla' G_{\mp}^{(j)}(r, r') \right) \right] \cdot n dS' \\ & + \oint \left[\nabla' \psi_{\mp}^{(j)}(r') m_{\pm}^{(j)} \left(G_{+}^{(j)}(r, r') - G_{-}^{(j)}(r, r') \right) \right. \\ & \left. - \psi_{\mp}^{(j)}(r') m_{\pm}^{(j)} \left(\nabla' G_{+}^{(j)}(r, r') - \nabla' G_{-}^{(j)}(r, r') \right) \right] \cdot n dS' \end{aligned} \quad (16)$$

を得る。ここで

$$M_{\pm}^{(j)} = \frac{1}{2M^{(j)}} (M^{(j)} \pm M_z^{(j)}), \quad (17)$$

$$m_{\pm}^{(j)} = \frac{1}{2M^{(j)}} (M_x^{(j)} \mp iM_y^{(j)}) \quad (18)$$

とした。式(16)の右辺での第2項に左辺の波動関数 $\psi_{\pm}^{(j)}$ とは逆のスピンの波動関数 $\psi_{\mp}^{(j)}$ を含んだ項が現れており、これがスピン反転を表す。このようにして2次元電子系に磁気モーメントがある場合の境界積分方程式が得られた。

3. 境界条件

Fig.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。以降の全てのモデルではリード線の幅を d とする。ここで、リード線との接続部

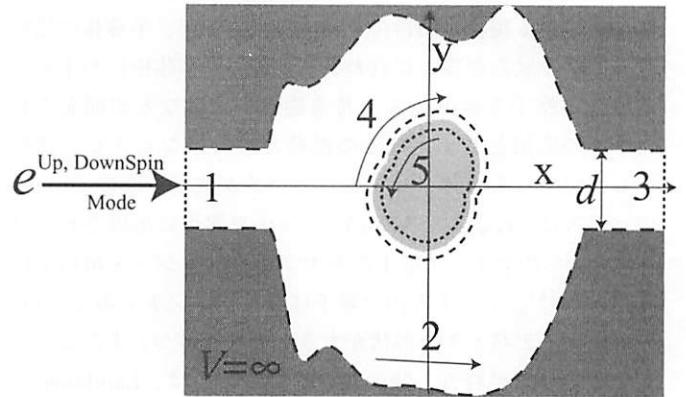


Fig. 1 A rugged quantum dot model with arbitrary-shaped magnetic moment. Two waveguides are connected to the right and left. An electron wave having unit amplitude with α mode and up or down spin enters from the left hand side of the left waveguide.

分である境界 1 と 3 では波動関数は導波路の固有関数で展開できる。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仮定し、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分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 α 番目のモードのみが入射する場合、

$$\begin{aligned} 1 : \psi_+(r) &= \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}(y + \frac{d}{2})\right) \exp(ik_\alpha x) \\ &\quad + \sum_{\beta} r_{+\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}(y + \frac{d}{2})\right) \exp(-ik_\beta x) \\ \psi_-(r) &= \sum_{\beta} r_{-\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}(y + \frac{d}{2})\right) \exp(-ik_\beta x) \\ 2 : \psi_{\pm}(r) &= 0 \\ 3 : \psi_{\pm}(r) &= \sum_{\gamma} t_{\pm\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}(y + \frac{d}{2})\right) \exp(ik_\gamma x) \quad (19) \end{aligned}$$

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 (16) 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

$$R_{\uparrow, \downarrow} = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |r_{\pm\alpha\beta}|^2, \quad (20)$$

$$T_{\uparrow, \downarrow} = \sum_{\gamma} \frac{k_{\gamma}}{k_{\alpha}} |t_{\pm\alpha\gamma}|^2 \quad (21)$$

で与えられる。

4. 計算結果

4.1. 磁性散乱体の形状による違い

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での透過、反射率にどのような影響があるか興味深い。ここで計算を行った



Fig. 2 A quantum wire model with arbitrary-shaped magnetic moment.

系は Fig.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に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。Fig.3 はそれぞ

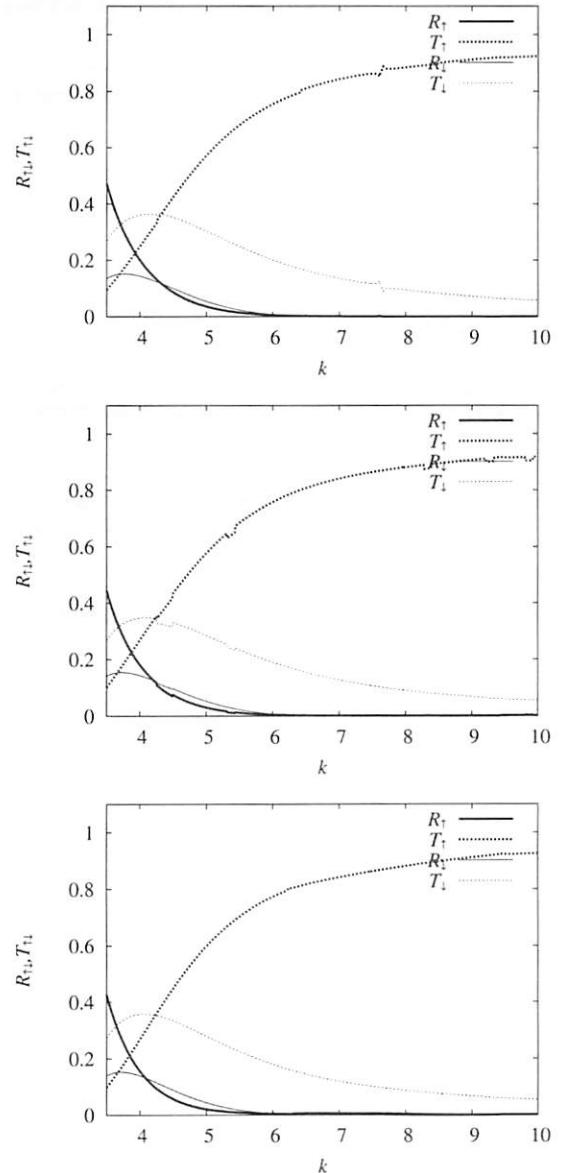


Fig.3 Transmission and reflection spectra for quantum wire model with magnetic moment, $M = (0, 10, 0)$. k is dimensionless wavenumber. Schematic pictures on upper left of spectra indicate the models calculated respectively. R_{\uparrow} and T_{\uparrow} are the reflection and transmission probabilities for up spin. R_{\downarrow} and T_{\downarrow} are for down spin.

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。Fig.4 と

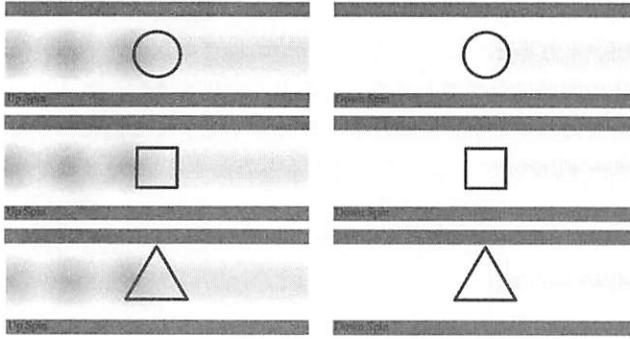


Fig.4 The density plots of $|\psi(r)|^2$ for three scatterers models, $k = 5$ and $M = (0, 10, 0)$. Left figures are for up spin, and right figures are for down spin.

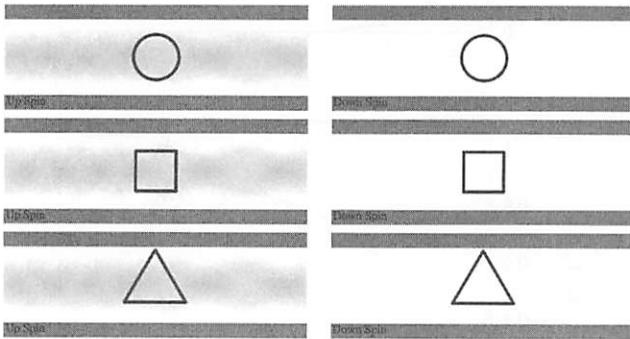


Fig.5 The density plots of $|\psi(r)|^2$ for three scatterers models, $k = 10$ and $M = (0, 10, 0)$. Left figures are for up spin, and right figures are for down spin.

Fig.5は $k = 5$ と $k = 10$ 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 $k = 10$ ではほとんど散乱され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。

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Fig.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。

Fig.6とFig.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、Fig.7を見ると先ほどの3つのモデルと比較すればそれぞれほぼ同じ特性曲線となっており、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Fig.6では、波数が大きくなるにつれ透過率が高くなり $k > 8$ でほぼ透過率は1となっている。これに対してFig.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

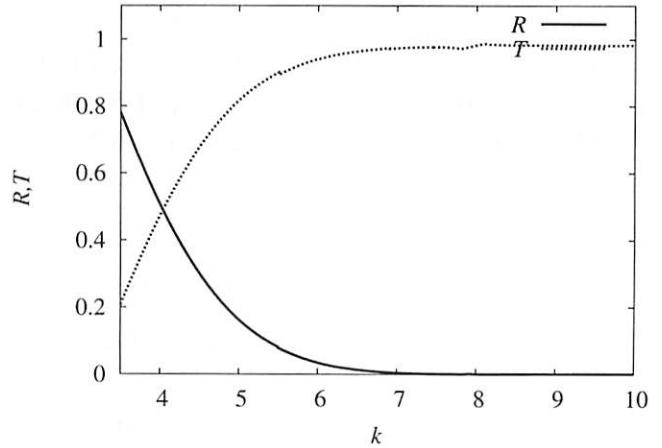


Fig.6 Transmission and reflection spectra for quantum wire model with a potential scatterer, $V = 10$.

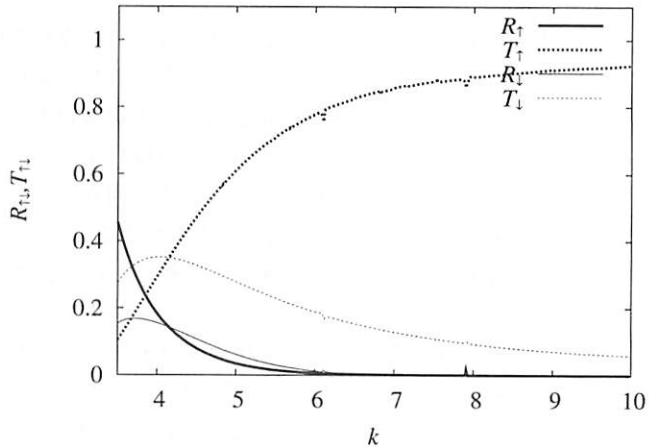


Fig.7 Transmission and reflection spectra for quantum wire model with a magnetic scatterer, $M = (0, 10, 0)$.

ほぼ同じである。Fig.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、大きくなると非常に起こりにくくなる。これは式(16)を見れば明らかでスピンフリップを示す第2項にグリーン関数が $\left(G_{+}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G_{-}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\right)$ もしくは $\left(\nabla' G_{+}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \nabla' G_{-}^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\right)$ 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 k^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Fig.7において波数 k 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。これも式(16)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、式(16)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ない。したがって、右辺第2項が大きすぎてはいけない。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。

4.3. ランダムな形状による影響

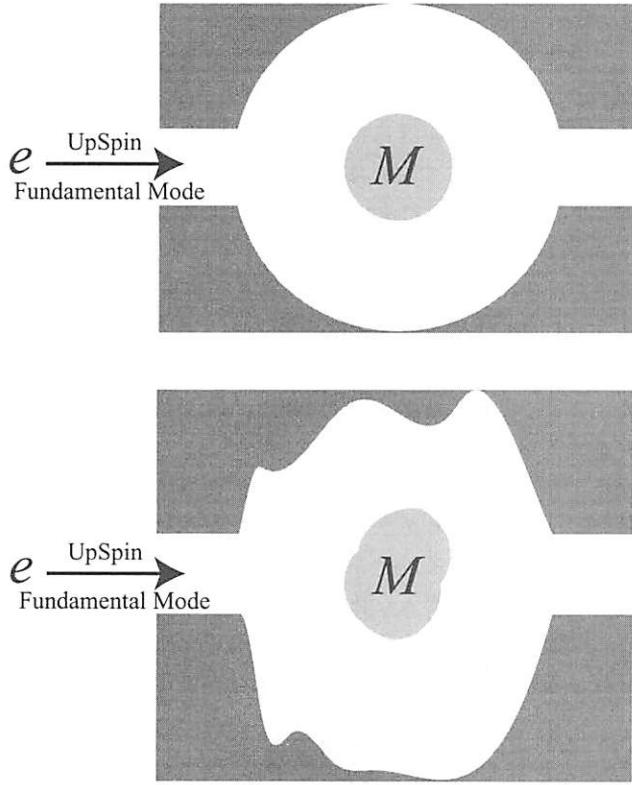


Fig. 8 A quantum dot model with circular magnetic moment (above) and a randomly deformed model (below).

次に、Fig.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。

Fig.9 と Fig.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

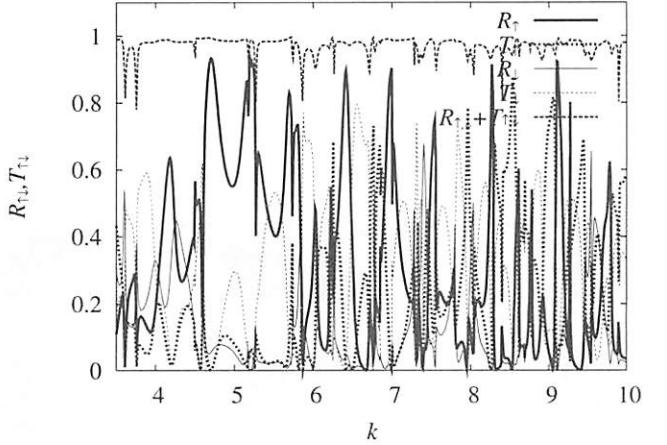


Fig. 9 Transmission and reflection spectra for the model above in Fig.8, $M = (0, 10, 0)$.

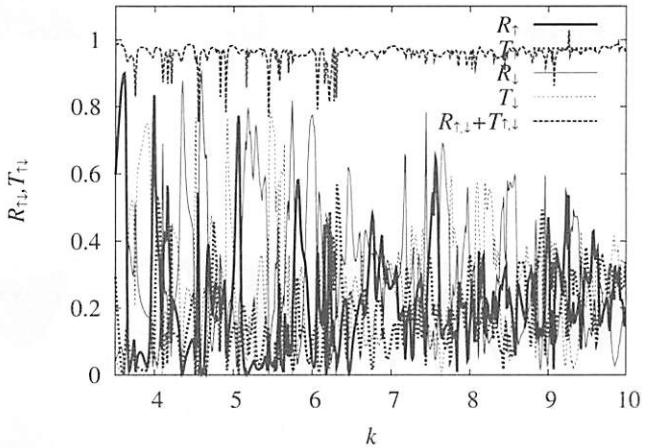


Fig. 10 Transmission and reflection spectra for the model below in Fig.8, $M = (0, 10, 0)$.

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立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、Fig.9を見るとその振動のピークの高さが波数が大きくなつても大きく、ほぼ1近く達している。それに対して、Fig.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つ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スピンを利用したデバイスを作成するには比較的適したスペクトルが得られている。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、複雑な形状により多数回散乱されて電子波が系全体に広がる。そのため、磁気モーメントに何度も散乱されスピンが混ざり合い、それぞれのスピンでの透過率、反射率がほぼ等しくなる。

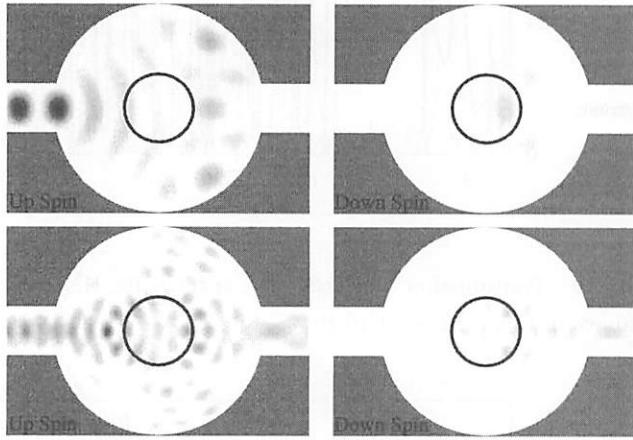


Fig.11 The density plots of $|\psi(r)|^2$ for the model above in Fig.8, $M = (0, 10, 0)$. Above plots are for $k = 5$, below plots are for $k = 10$.

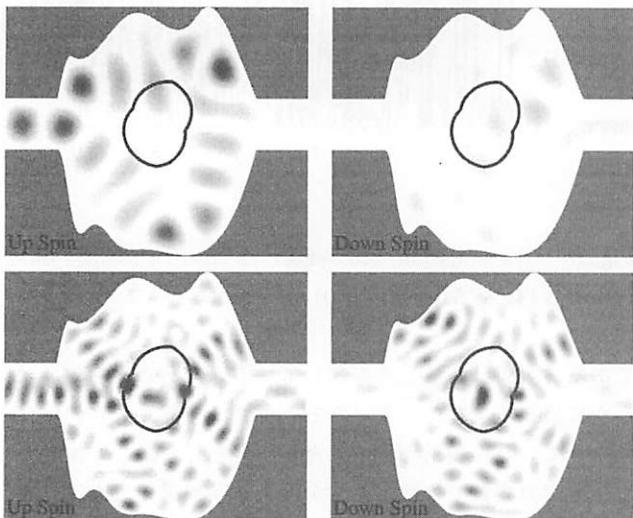


Fig.12 The density plots of $|\psi(r)|^2$ for the model below in Fig.8, $M = (0, 10, 0)$. Above plots are for $k = 5$, below plots are for $k = 10$.

Fig.11 は理想的な形状の場合の $k = 5$ と $k = 10$ 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るおり、それが先ほどの振幅の大きなピークへつながる。また、Fig.12 はそれをランダムに変形させた場合の $k = 5$ と $k = 10$ における電子の確率密度である。波数が小さいときは Fig.11 の上図に近い形の干渉パターンができるおり、これは電子波が系の変形に大きく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その複雑な散乱により電子波が全

体に広がっている。磁気モーメントの内部にも電子波が十分広がっているためスピン反転が頻繁に起こり、ほぼ等確率でスピンおよび反射波、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 Fig.9 のように、興味深いスペクトルが得られ、それを用いたスピニフィルターのようなスピントロニクスデバイスを作成することも可能だろう。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。

4.4. 計算精度

これまでの計算において、Fig.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、Fig.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部分に局在する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。ただし、局所的なものであり全体の傾向を議論する場合はそれほど重要ではない。

5. 結言

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。本論文では、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、Fig.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ドラインスピンとで 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るてしまう。複数の磁区による共鳴がある場合の解析を行うために、今後は効率よく要素をとるなど改善する必要がある。

参考文献

- (1) Supriyo Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press (1995)
- (2) R. Landauer, IBM. Res. Dev. 1, 863 (1969)
- (3) 宮川悠, 植田毅, 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
- (4) Yuu Miyagawa, Tsuyoshi Ueta, Proc.2nd Quantum Transport Nano-Hana International Workshop, IPAP Conf.Series 5, pp.85-90