計算数理工学論文集 Vol. 7, No.2 (2008 年 3 月), 論文 No. 01-080317 JASCOME

電流保存保証境界要素法の試み

AN ATTEMPT ON ASSURANCE OF CURRENT CONSERVATION IN BEM

植田　毅 [1)]

Tsuyoshi UETA

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)

The boundary element method is one of most powerful numerical tools in order to investigate the transport properties of nanoscale ballistic quantum devices. When a scattering potential, however, is introduced to a system in a uniform magnetic fields, the computational accuracy of conservation of the probability density gets worse. One of major causes of it is excitation of fictitious localized eigenstates coupling to the wavefunctions on the portion of the emitter or of the collector. In the present study, a novel numerical method is proposed to eliminate fictitious localized modes by applying restriction of the current conservation to the boundary element method. It is an application of a kind of undetermined multiplier methods.

Key Words : SGM Image, Magnetic Electron Transport, Fictitious Mode, Boundary Element Method, Current Conservation

1. はじめに

半導体デバイスの微細加工技術の急速な発展により、20 年ほど前から、半導体-絶縁体（例えば、GaAs/AlGaAs）ヘテロ界面などに形成される 2 次元電子系では、平均自由行程は試料サイズを上回り、試料内でほとんど非弾性も弾性散乱もされないバリスティック（弾道）伝導が実現している。メゾスコピック物理の分野では、この 2 次元電子系に加工を施し、運動を制限することにより、量子細線、量子ドットなどの構造（デバイス）を作製し、コンダクタンスのフェルミエネルギー依存性、磁場依存性などの伝導特性を研究している。

デバイスの作製方法には半導体をエッチングにより物理的に必要な形状にする方法と半導体の絶縁体側に必要な形状の電極（スプリットゲート）を蒸着し、逆バイアスをかけることにより電子の通過できる場所を制御する方法がある。前者では一度試料を作製すると閉じ込め形状を変更できない、後者ではバイアス電圧を変化させることに閉じ込め領域を狭くした、広くしたりできる。しかし、閉じ込め形状を根本的に変化せることはできなかった。

近年、2 つのポイントコンタクトで囲まれた量子ドットに、走査型トンネル顕微鏡（STM）のプローブをスプリットゲートとして用いて、移動可能な散乱領域を導入した実験が考案された。アリゾナ州立大と千葉大の共同研究では、STM のプローブを量子ドット内を移動させながら電気抵抗の変化を測定している [(1)]。プローブの位置に対応する電気抵抗を 2 次元的に配列し画像化したものを SGM (Scanning Gate Microscopy) 画像と呼ぶ。そのパタンの磁場変化、ハイパスフィルターを用いた揺らぎの構造に興味深い現象が見出されている。SGM 画像の構造が物理的に何を反映しているのかは未だ不明であり、それを理解するために同系の数値解析が必要とされている。

２連量子ポイントコンタクトの間に形成される量子ドットはポイントコンタクトを形成するゲート電極の周りに発生する静電ポテンシャルにより電子を閉じ込める（Fig.1)。図において、ポテンシャルは任意単位、長さは $l = 100 \times 10^{-9}$m を単位としている。

本研究ではフェルミエネルギーの等エネルギー面（線）で電子が閉じ込められるものとして、境界要素法を用いて解析を行った（Fig.2)。数値計算においては、量子ドットの両端に幅 w のリードが接続しているものとする。実験は $w/l = 6.4484$ に対応している。また、実験におけるフェルミ波数（フェルミエネルギーを与える波数）は $Kl = 15.7423$ であるが、この波数では対象とする磁場領域でグリーン関数の数値計算が不可能であるので、数値計算では $Kl = 6.5$ とする。

伝導特性の磁場依存性を解析するために、一様磁場がかかっている場合の境界要素法を用いる [(2)]。

2. 定式化

x、y 軸を Fig.2 のように定義し、平面に垂直な一様磁場

2008 年 1 月 1 日受付，2008 年 2 月 9 日受理

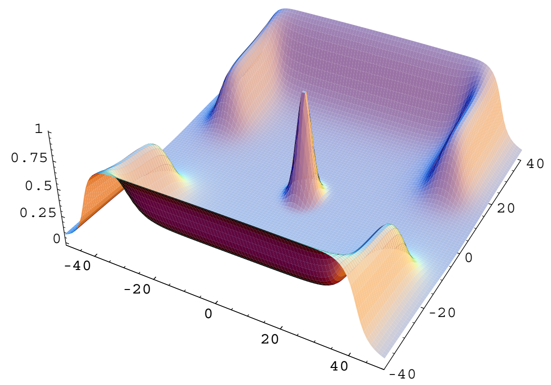

Fig. 1 Model of electrostatic potential forming a quantum dot and of a STM probe located at the center of the quantum dot.

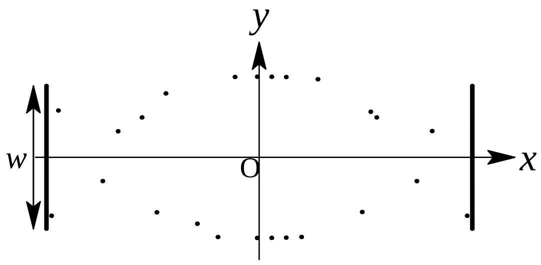

Fig. 2 Model of a quantum dot with a scattering domain.

$\boldsymbol{B} = (0,0,B)$ を発生するベクトルポテンシャルを $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = B(0,x,0)$ とする。

以下では、長さとエネルギー ε はそれぞれ磁気的長さ $\ell_B \equiv \sqrt{\hbar/|eB|}$ とサイクロトロンエネルギー $\hbar\omega_c$ ($\omega_c = |eB|/m^*$) を用いて無次元化する。このとき無次元化された全波数は $K \equiv \sqrt{2\varepsilon}$ と表される。ここで、e、m^* はそれぞれ電子の電荷、半導体内ので電子の有効質量である。また、無次元化した磁場を $\tilde{B} = eBl^2/\hbar$ と定義する。

一様磁場が印加された量子ドット内のシュレディンガー方程式の解は系の境界に沿った線積分を用いて

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}) &= \oint\Big[G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\varepsilon)\nabla'\psi(\boldsymbol{r}') \\ &\qquad -\psi(\boldsymbol{r}')\nabla' G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\varepsilon)\Big]\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S' \\ &\quad -2\mathrm{i}\oint G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\varepsilon)\psi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S' \qquad (1)\end{aligned}$$

と表せる。ここで $\boldsymbol{n}$ は領域から外向き単位法線ベクトルである。

グリーン関数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\varepsilon)$ は [3]

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\varepsilon) &= e^{i(x'+x)(y-y')/2}G_0(z;\varepsilon) \\ G_0(z;\varepsilon) &\equiv \frac{1}{4\pi}\Gamma(\tfrac{1}{2}-\varepsilon)U(\tfrac{1}{2}-\varepsilon,1,z)e^{-z/2} \qquad (2)\end{aligned}$$

で与えられる。ただし、$z \equiv (\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^2/2$、$U(\frac{1}{2}-\varepsilon,1,z)$ は Kummer 関数 [4] である。

この積分表現を通常の境界要素法の手続きで数値的に解く [2]。このとき、静電ポテンシャルによる壁においては、波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}) = 0$ とする。リードを接続した部分の波動関数は磁場がかかっていない場合の固有関数を用いてまた、入射側のリード（エミッタ）内で n 番目の横モードの電子波が入射する時、エミッタでの波動関数は

$$\begin{aligned}\psi_n(\boldsymbol{r}) &= u_n^*(\boldsymbol{r}) + \sum_l r_{nl}\ u_l(\boldsymbol{r}), \qquad (3)\\ u_l(\boldsymbol{r}) &\equiv \exp(-\mathrm{i}k_l x)\ \sin\left(\tfrac{l\pi}{d}(y+\tfrac{d}{2})\right), \\ &\quad (n,l = 1,2,\dots)\end{aligned}$$

と書ける。ここで、$k_l \equiv \sqrt{k^2-(l\pi/d)^2}$ を定義した。エミッタ部分では反射係数 r_{nl} が未知変数である。

射出側のリード（コレクタ）での波動関数は同様に

$$\begin{aligned}\psi_n(\boldsymbol{r}) &= \sum_l t_{nl}\ w_l(\boldsymbol{r}), \qquad (4)\\ w_l(\boldsymbol{r}) &\equiv \exp(\mathrm{i}k_l x)\ \sin\left(\tfrac{l\pi}{d}(y+\tfrac{d}{2})\right)\end{aligned}$$

と表される。コレクタ部分では透過係数 t_{nl} が未知変数である。

n 番目の伝導モードが入射した場合の反射率、透過率はそれぞれ

$$R_n = \sum_{l=1}^{N}\frac{k_l}{k_n}|r_{nl}|^2 \qquad (5)$$

$$T_n = \sum_{l=1}^{N}\frac{k_l}{k_n}|t_{nl}|^2 \qquad (6)$$

により計算される。ここで、N は最高次伝導モードであり、本論文においては $N = 13$ となる。

計算精度は確率保存の程度を用いて行う。そのため、確率保存の程度を表す指標として

$$\Delta_n = 1 - T_n - R_n \qquad (7)$$

を定義する。

Landauer の公式 [5] を用いると、エミッタ、コレクタ間のコンダクタンス G は e^2/h(h は Plank 定数) を単位として

$$G = \sum_{n=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\frac{k_l}{k_n}|t_{nl}|^2 \qquad (8)$$

により計算される。

3. 境界要素法による計算結果

3.1. 散乱体ない場合の計算結果

散乱ポテンシャルがない場合のコンダクタンス G の磁場依存性を Fig.3 に示す。散乱体がない場合の計算は、グリーン関数が解析的に発散する $\varepsilon = E/\hbar\omega_c$ が半整数となるような磁場の極近傍以外では $\Delta < 3\times10^{-2}$ であり、高精度な計算が実現している。$\tilde{B} = 2.8$ において第 13 モードが入射した場合の確率密度 $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ を Fig.4 に示す。

3.2. SGM 画像

量子ドット内に置かれた STM のプローブの影響を半径 $a/l = 0.2$ の円柱状の無限に高いポテンシャルでモデル化す

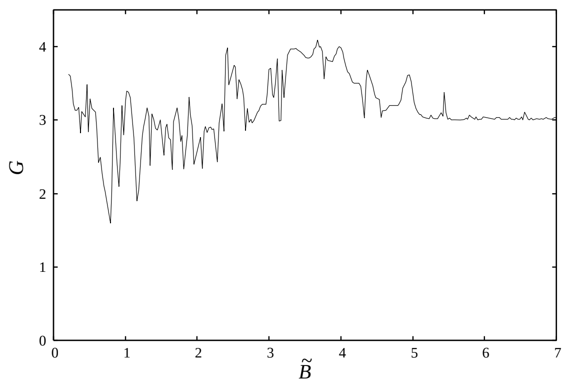

Fig. 3　Magnetic-field dependence of the conductance in the system without a scattering potential.

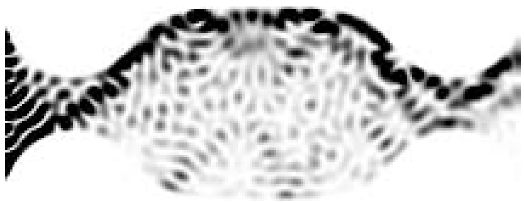

Fig. 4　$|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ for the 13th mode incidence and $\tilde{B} = 2.8$.

る。すなわち、円周上で波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}) = 0$ という境界条件を付加する。

円の中心の位置を変化させながら、中心の位置にその場合のコンダクタンスを配置したものが SGM 画像である。$\tilde{B} = 2.8$ の場合の SGM 画像を Fig.5 に示す。黒を最小値、白

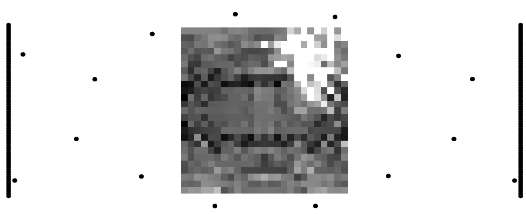

Fig. 5　SGM image for $\tilde{B} = 2.8$.

を最大値として密度プロットしている。各々の位置での計算についてもほとんどの場合計算精度は散乱体がない場合と変わらず、$\Delta < 10^{-3}$ を実現している。しかしながら、右上に現れている白い点は計算誤差が $\Delta > 3 \times 10^{-2}$ を超える場合である。計算誤差の大きな場合の確率密度の例を Fig.6 に示す。これより、計算誤差が大きいときには散乱体の周りに本来励起されない局在モードが励起されていることが分かる。すなわち、所謂「見かけの固有振動数問題」である (6, 7, 8, 9, 10)。

特に、散乱体がコレクタの近傍にある場合に計算誤差が大きくなっている。これは、本来コレクタ内の波動関数と結合しない見かけの局在モードがコレクタ内の計算誤差のために結合したためと考えられる。他方、磁場がかかっていない場合、このような計算を行っても特定の場所で計算精度が悪くなる現象は見られていない。これは、古典的には電子は磁場

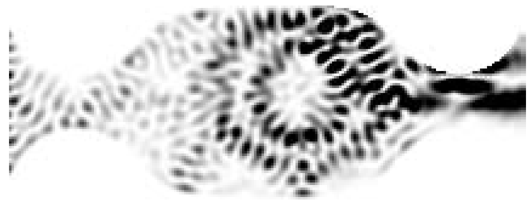

Fig. 6　$|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ for the 13th mode incidence and $\tilde{B} = 2.8$.

中でサイクロトロン運動（円運動）をするため、量子力学的にはエッジ状態以外は局在モードとなるという非常に局在しやすい性質が起因していると考えられる (11)。

伝導問題においては波動関数を計算したとき見かけの局在モードが励起されていたとしても問題ないが、その局在モードがリード内の状態と結合し、確率の保存性に影響を与えると致命的である。

4. 確率保存の保証方法

工学分野においては見かけの固有モードの励起を排除するための方法はいくつか提案されている。見かけの固有モードを励起する原因となっている系内に開いた穴などの境界の外にもノードをとり、自己無撞着な方程式を加味する簡易的方法、また、境界上で波動関数の自己無撞着性の方程式だけでなく、波動関数の法線微分の自己無撞着性の方程式を導入する決定的方法などが考えられる (6, 7, 8, 9, 10)。

しかし、前者の方法では計算精度がノードの取り方に依存していたり、また、後者の方法は確実な方法ではあるが、超特異積分が現れるなど、取り扱いが煩雑であったりする。さらに、磁場中の電子伝導問題では、散乱体の周りを周回する局在モードが存在し得、この局在モードが異常に大きく励起されることがあり、計算精度を落とす原因となっている。また、特に磁場中の伝導特性解析においては見かけの固有モードの励起を抑えるよりも確率を保存させることが重要である。そこで、本論文では通常の境界要素法に対して、確率保存則を付加条件として課すことにより、例え離散化誤差があろうとも常に伝導問題を扱える計算手法を試みる。

確率の保存則は

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) &= 0 \qquad (9) \\ \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) &\equiv \frac{1}{2}\{\psi^*(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\nabla - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}) \\ &\quad + \psi(\boldsymbol{r})(\mathrm{i}\nabla - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\psi^*(\boldsymbol{r})\} \end{aligned}$$

と表される。これを表面積分（2 次元であるから閉曲線の周回積分）すると、リード部分以外では $\psi(\boldsymbol{r}) = 0$ という境界条件が課されているから

$$\begin{aligned} 0 &= \int \nabla \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} = \oint \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{n} dS \\ &= \frac{1}{2}\oint \{\psi^*(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\nabla - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}) \\ &\quad + \psi(\boldsymbol{r})(\mathrm{i}\nabla - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\psi^*(\boldsymbol{r})\} d\boldsymbol{r} \\ &= \sum_{l=1}^{N} k_l |r_{nl}|^2 + \sum_{l=1}^{N} k_l |t_{nl}|^2 - k_n = -k_n \Delta_n \qquad (10) \end{aligned}$$

を得る。

この確率の保存の式を未定乗数 λ を用いて自己無撞着な方程式に付加すると

$$
\begin{aligned}
\psi(\boldsymbol{r}) \quad = \quad & \oint \left[G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\left(\nabla' + i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)\psi(\boldsymbol{r}')\right. \\
& \left. - \psi(\boldsymbol{r}')\left(\nabla' - i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\right]\cdot \boldsymbol{n} dS' \\
& +\lambda \frac{1}{2}\oint \left[\psi^*(\boldsymbol{r}')\left(-\mathrm{i}\nabla' - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)\psi(\boldsymbol{r}')\right. \\
& \left. + \psi(\boldsymbol{r}')\left(\mathrm{i}\nabla' - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)\psi^*(\boldsymbol{r}')\right]\cdot \boldsymbol{n} dS' \qquad (11) \\
= \quad & \oint \left[G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\left(\nabla' + i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)\psi(\boldsymbol{r}')\right. \\
& \left. - \psi(\boldsymbol{r}')\left(\nabla' - i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\right]\cdot \boldsymbol{n} dS' \\
& +\lambda\left(\sum_{l=1}^{N} k_l |r_{nl}|^2 + \sum_{l=1}^{N} k_l |t_{nl}|^2 - k_n\right) \qquad (12)
\end{aligned}
$$

を得る。

この方程式は境界上の波動関数の法線微分および $\{r_l\}$, $\{t_l\}$ を未知変数とするので、非線形な方程式である。

そこで、この方程式を $\lambda = 0$ の場合の $\{r_{nl}\}$, $\{t_{nl}\}$ の値を初期値として反復法で解く。繰り返しの数を i として

$$
\begin{aligned}
\psi_i(\boldsymbol{r}) + \lambda k_n \quad = \quad & \oint \left[G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\left(\nabla' + i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)\psi_i(\boldsymbol{r}')\right. \\
& \left. - \psi_i(\boldsymbol{r}')\left(\nabla' - i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\right]\cdot \boldsymbol{n}' dS' \\
& +\lambda \sum_{l=1}^{N} k_l \left(r^*_{nl,i-1} r_{nl,i} + t^*_{nl,i-1} t_{nl,i}\right) \qquad (13)
\end{aligned}
$$

とする。

まず、$\lambda = 0$ の場合の計算を行い、その解の $\{r_{nl}\}$, $\{t_{nl}\}$ を用いて、有限の λ について、式 (13) の最終項の $r^*_{nl,i-1}$ および $t^*_{nl,i-1}$ を評価し、連立方程式を解く。これで得た解の $\{r_{nl}\}$, $\{t_{nl}\}$ を用いて同様のことを繰り返す。未だ詳しい解析は行っていないが、これまでに計算した全ての場合において反復は 1 回で収束している。

5. 確率保存の未定乗数依存性

確率保存の程度を表す指標 Δ_n が 0 となる λ の値を求めることにより、確率を保存させることができる。Δ_n を λ に対してプロットし、Δ_n が 0 となる λ を求める。基本モードが入射した場合（$n = 1$）に、様々な磁場について Δ_1 の λ に対する変化を Fig.6 に示す。Fig.7 より、Δ_n は $\lambda = 0$ 近傍でほぼ上に凸もしくは下に凸の放物線となっており、λ に 2 次の依存性があることが分かる。また、Δ_n が 0 とならず、この方法では確率を保存させることができない場合もあることが分かる。この場合、λ を複素数とすれば、$\Delta_n(\lambda) = 0$ を満たす λ が存在する可能性があり、試みたがいずれの場合も $\Delta_n(\lambda) = 0$ を満たす λ は存在しなかった。

$\Delta_n(\lambda) = 0$ が実数解を持つ場合、通常、2 つの異なる解を持つ。理想的には符合の異なる絶対値の同じ解となるが、離散化誤差などのために放物線の形が崩れ、異なる値の解になっているものと考えられる。

6. 確率を保存する未定乗数の近似解

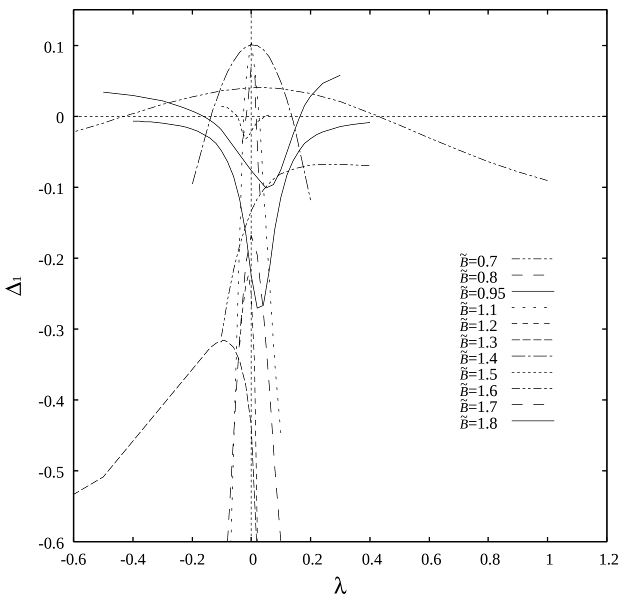

Fig. 7　λ-dependence of Δ_1 for the fundamental mode incidence.

λ を変えて同じ計算を繰り返し、ようやく $\Delta_n(\lambda) = 0$ を満たす λ の値を求めていたのでは効率が悪い。そこで、この解の近似表現を求める。

簡単のために未定乗数を含まない方程式を

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \qquad (14)$$

と書く。ただし、A は係数行列、$\boldsymbol{x}$ は未知変数のベクトルである。ベクトル $\boldsymbol{b}$ は入射波に起因する非斉次項である。また、未定乗数 λ を含む方程式を

$$\left(A + \lambda B(\boldsymbol{x}')\right)\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{b} + \lambda \boldsymbol{e} \qquad (15)$$

と書く。このとき、確率の保存の式は

$$B(\boldsymbol{x}')\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{e} \qquad (16)$$

となる。

λ は小さいとして、

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + \lambda \boldsymbol{\xi} \qquad (17)$$

と展開すると、式 (15) は

$$
\begin{aligned}
\left\{A + \lambda B(\boldsymbol{x} + \lambda\boldsymbol{\xi})\right\}(\boldsymbol{x} + \lambda\boldsymbol{\xi}) \quad &= \quad \boldsymbol{b} + \lambda \boldsymbol{e} \\
A\boldsymbol{x} + \lambda A\boldsymbol{\xi} + \lambda B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x} + \lambda^2 B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x} + \lambda^2 B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi} \quad &= \quad \boldsymbol{b} + \lambda \boldsymbol{e}
\end{aligned}
$$

のように展開できる。λ, λ^2 のオーダーの式より

$$
\begin{aligned}
A\boldsymbol{\xi} + B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x} \quad &= \quad \boldsymbol{e} \qquad (18) \\
B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x} + B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi} \quad &= \quad \boldsymbol{0} \qquad (19)
\end{aligned}
$$

を得る。ここで、$B'(\boldsymbol{x})$ は

$$B'(\boldsymbol{x}) \equiv \left.\frac{dB(\boldsymbol{x}')}{d\lambda}\right|_{\lambda=0} \qquad (20)$$

により定義した。

一方、式 (16)、(17) より

$$\begin{aligned} B(\boldsymbol{x}+\lambda\boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{x}+\lambda\boldsymbol{\xi}) &= \boldsymbol{e} \\ B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}+\lambda B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}+\lambda B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi}+\lambda^2 B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi} &= \boldsymbol{e} \end{aligned}$$

となり、ここで、式 (19) を用いると

$$B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}+\lambda^2 B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{e} \tag{21}$$

を得る。

$\lambda=0$ の場合の確率の流れの収支の式を

$$B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{e}' \tag{22}$$

と書くと、式 (18)、(21) より、

$$\begin{aligned} A\boldsymbol{\xi} &= \boldsymbol{e}-\boldsymbol{e}' \quad (23) \\ \lambda^2 B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi} &= \boldsymbol{e}-\boldsymbol{e}' \quad (24) \end{aligned}$$

式 (23) より、$\boldsymbol{\xi}$ は

$$\boldsymbol{\xi}=A^{-1}\left(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{e}'\right) \tag{25}$$

と求まる。ここで、行列 A は $\lambda=0$ の場合の連立方程式の係数行列であるから、その連立方程式が解ける限り、A の逆行列は存在するので $\boldsymbol{\xi}$ は求められる。

演算 $B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}$ はベクトル $\boldsymbol{x}$ から成分 $\{r_l\}$, $\{t_l\}$ を抜出し、確率の流れを計算するから、$B(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^\dagger\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{x}$、即ち、

$$B(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^\dagger\boldsymbol{\beta} \tag{26}$$

と表現できる。ここで、$\boldsymbol{\beta}$ はある行列である。したがって、

$$B(\boldsymbol{x}')=\boldsymbol{x}'^\dagger\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{x}+\lambda\boldsymbol{\xi})^\dagger\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{x}^\dagger\boldsymbol{\beta}+\lambda\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{\beta}$$

から、

$$B'(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{\beta} \tag{27}$$

と書ける。

式 (24) より

$$\begin{aligned} \lambda^2 B'(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\xi} &= \lambda^2\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{e}-\boldsymbol{e}' \\ \lambda &= \pm\sqrt{\left(\boldsymbol{\xi}^\dagger\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\xi}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{e}'\right)} \quad (28) \end{aligned}$$

と確率を保存させる λ を近似的に求められる。ここで、$\boldsymbol{\xi}$ は式 (25) から求められたものである。

数値計算により求めた確率を保存させる λ を λ_0、式 (25)、(28) から求めた λ を λ_1 として、その相関を Fig.8 に示す。この図より、磁場の大きさに関係なく、λ が 0 近傍では λ_1 は非常によく λ_0 を近似することが分かる。

7. 最適未定乗数の決定の可能性

ここで、確率を保存する 2 つの異なる λ（$\lambda_\pm$ とする）のどちらを採用するかが問題となる。そこで、基本モードを入射した場合の λ に対する透過率の変化を Fig.9 に示す。図中には確率が保存している $\lambda_\pm$ の値をマークしてある。透過率

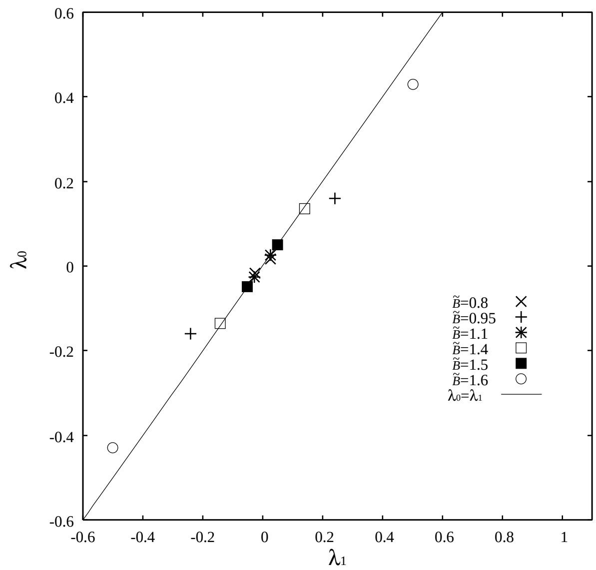

Fig. 8 Correlation between λ_1 and λ_0.

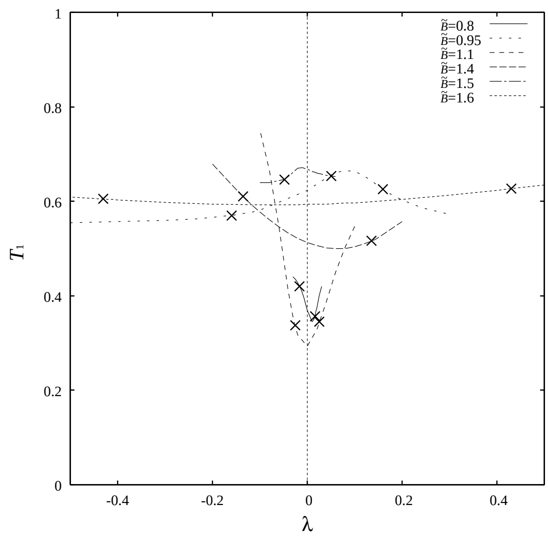

Fig. 9 λ-dependence of the transmission probability T_1 for the fundamental mode incidence.

$T_1(\lambda)$ が原点に対してほぼ対称な場合には $T(\lambda_-)\sim T_1(\lambda_+)$ であることが分かる。しかし、透過率 $T_1(\lambda)$ が原点に対して対称でない場合には、$T_1(\lambda_\pm)$ はそれぞれ異なる値となっている。理想的には $\lambda_\pm$ どちらの場合にも同じ透過率、反射率を与えると考えられるが、離散化誤差などのために異なる値を与えるようになったと考えられる。

$T_1(\lambda_+), T_1(\lambda_-)$ の値の異なる場合の例として、$\tilde{B}=1.4$ の場合、基本モードが入射した場合の透過率 T の λ 依存性を Fig.10 に示す。図中には Δ の値をエラーバーとして示してある。この場合、$\lambda_\pm=\pm0.136$ であり、各々の場合の透過率は $T_1(\lambda_+)=0.516209$, $T_1(\lambda_-)=0.610972$ であり、約 0.1 の差がある。

$\lambda_\pm=\pm0.136$ それぞれの場合の波動関数（確率密度）のようすを Fig.11, 12 に示す。 これらから、透過率には差があっ

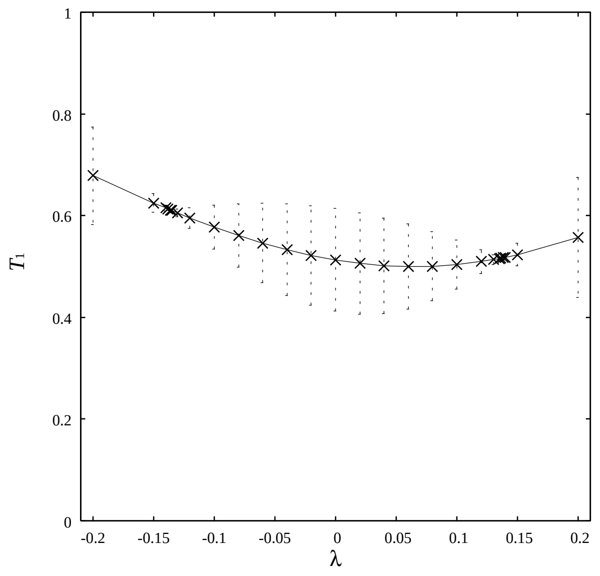

Fig. 10 λ-dependence of the transmission probability T_1 with the error bar for the fundamental mode incidence and $\tilde{B} = 1.4$.

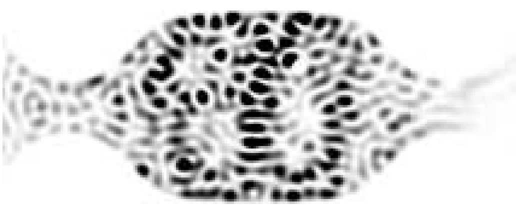

Fig. 11 $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ with $\lambda_+ = 0.136$ for the fundamental mode incidence and $\tilde{B} = 1.4$.

ても、確率密度はほとんど目立った差がないことが分かる。

$\lambda_\pm$ の値のどちらが正しい値であるかは現状では不明である。今後、有限要素法など他の計算手法による解析との比較、また、λ_1 の近似精度を上げるなど $\lambda_\pm$ のどちらを採用するべきかの検討が課題となる。

8. 結言

開放量子ドットに散乱体を導入した SGM 画像の計算において、散乱体の位置に依存して「見かけの局在モード」を励起し、確率の保存精度が悪くなる問題を題材に、境界要素法に確率保存則を条件として付加した手法を提案した。

未定乗数法を用いて確率保存則を条件導入し、未定乗数を変化させることにより確率を保存させる未定乗数を決定できること示した。また、未定乗数を変化させ数値解析する必要がないように確率を保存させる未定乗数の値に対する近似解を求め、その近似解が数値計算より得られた値と非常によく一致していることを示した。これにより、未定乗数法で確率の保存条件を課すことにより、確率の保存を保証する境界要素法の可能性を示した。

しかしながら、確率を保存させる未定乗数は異なる２つの解を持つ。それぞれに対する透過率の値も異なる場合が多く、現状ではどちらを採用するかを決定する根拠がない。有限要素法など他の計算手法による解析との比較、また、未定乗数の近似解の近似精度を上げるなど、どちらを採用するべきかが今後の検討課題となる。

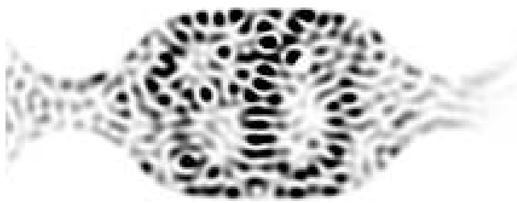

Fig.12 $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ with $\lambda_- = -0.136$ for the fundamental mode incidence and $\tilde{B} = 1.4$.

参考文献

(1) N. Aoki, A. Burke, R. Akis, D. K. Ferry, and Y. Ochiai : Int. Conf. on Nanoscience and Technology, (2006).

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

(3) Tsuyoshi Ueta : Green's function of a charged particle in magnetic fields, J. Phys. Soc. Jpn., **61** (1992), pp. 4314–4324.

(4) M. Abramowitz and Irene A. Stegun : Handbook of Mathematical Functions, (1972), Dover, pp. 358–360.

(5) S. Datta: Elctronic Transport in Mesoscopic Systems, (1995), Cambridge University Press.

(6) A. J. Burton and G. F. Miller: The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems, Proc. Roy. Soc. Lond. A., **323** (1971), pp. 201–210.

(7) 小林 昭一 (編) : 波動解析と境界要素法, (2000), 京都大学学術出版会.

(8) 田中正隆，松本敏郎，荒井雄理：見かけの固有振動数の影響を除いた音場の新しい BEM 解析法（半無限 2 次元場での検討），計算数理工学論文集，**5** (2005) pp. 1–6.

(9) 荒井雄理，田中正隆，松本敏郎：見かけの固有振動数問題を回避する音響境界要素解析（半無限 2 次元場での検討），計算数理工学論文集，**5** (2005) pp. 135–138.

(10) 田中正隆，荒井雄理，志水克大：境界要素法を用いるときに見かけの固有値問題が生じる音場の高精度固有値解析，計算数理工学論文集，**6** (2006) pp. 33–38.

(11) 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.