

# 領域分割法による有限ポテンシャルによる磁場中電子ビームの散乱の解析

## BEM ANALYSIS OF SCATTERING OF AN ELECTRON BEAM IN MAGNETIC FIELDS BY A FINITE POTENTIAL

植田 毅

Tsuyoshi UETA

千葉大学工学部応用物理 (〒 263 千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail:ueta@j90.tg.chiba-u.ac.jp)

In the present paper, an electron beam scattering by a potential of finite height in magnetic fields is analyzed by means of the boundary element method. The scattering potential is assumed to be constant. The system is partitioned into domains with and without the scattering potential. The integral equations in each domain are simultaneously solved. In this manner, both of the wave function and its normal derivative on the boundary between both domains are unknown variables and obtained as a direct solution. The method is applied to a magnetic electron focusing geometry with a square scattering potential between an emitter and a collector. Electron distributions are calculated. Results are physically interpreted and the efficiency of the method is discussed.

**Key Words :** *Finite potential, Electron Transport, Domain Partition, Magnetic Field, Boundary Element Method*

### 1. 緒言

有限系で散乱断面積の小さな散乱体が多数存在する場合を取扱えるよう磁場中の電子に対する境界要素法が拡張された<sup>(1)</sup>. この方法により初めて磁場中の電子ビームの散乱状態が計算できるようになった.

しかしながら, 現実の実験で用いられる系の散乱体は有限の大きさを持ち, 散乱体内への電子波の浸透もある. また, 光学におけるプリズムやレンズのように, ポテンシャルの存在による電子ビームの屈折を積極的に利用したデバイスも提案され<sup>(2),(3)</sup>, このような系の特性解析の必要もある.

これまで, ポテンシャルによる波束の散乱過程については半古典的, 量子力学的にも多くの研究がなされているが<sup>(4)</sup>, 磁場中の電子ビームの透過, 散乱の量子力学的研究はこれまでなされたことがない. これは, 磁場中でのポテンシャルの差による電子ビームの屈折,

反射に関する知見を得るために重要である.

本研究では一様磁場中で, 有限な強さのポテンシャルがあるときの, 電子ビームの散乱を境界要素法により解析する. 有限ポテンシャルは一定の値をとるとする. ポテンシャルが存在する領域と無い領域を分割し, おおのこの領域についての積分方程式を連立させることにより, 解を得る.

応用例として, 磁気電子集束系のエミッタ, コレクタ間に正方形の一定値をもつ有限の高さのポテンシャルが存在する系 (Fig.1) を解析する. Fig.1において, 濃い灰色の部分は磁気電子集束系を形作る無限に高い壁であり, 薄い灰色の部分が有限の高さの散乱ポテンシャルである. 得られた結果から, エミッタから射出されたほぼ古典的軌道に沿っている電子ビームがポテンシャルにより散乱, 屈折する様子を物理的に考察する.

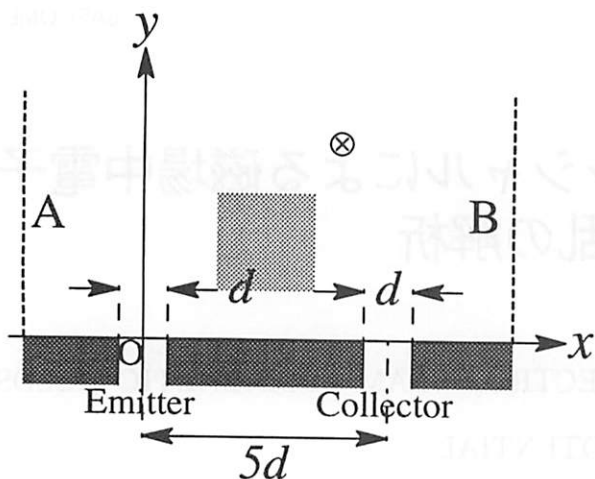


Fig.1 The magnetic electron focusing geometry with a square potential of a finite height and the definition of the coordinate system.

## 2. 積分方程式

$x, y$ 軸を Fig.1のように定義し、平面に垂直な一様磁場  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  を発生するベクトルポテンシャルを  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = B(-y, 0, 0)$  とする。

以下では、長さ  $l_B \equiv \sqrt{\hbar/|qB|}$  とサイクロトロンエネルギー  $\hbar\omega_c$  ( $\omega_c = |qB|/m^*$ ) 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、 $q, m^*$  はそれぞれ電子の電荷、半導体内での電子の有効質量である。 $\hbar$  は Dirac 定数、Planck 定数を  $2\pi$  で割ったものである。

一定値のポテンシャルを考えるので、ポテンシャルが存在する領域 (Fig.1 薄灰色部分)、しない領域に分割する方法を用いる。

ポテンシャルが存在しないときの電子のエネルギーを  $\varepsilon$ 、ポテンシャルの値を  $v$  とすると、ポテンシャルが存在している領域における電子のエネルギーは  $\varepsilon' = \varepsilon - v$  となる。ただし、 $\varepsilon' > 0$  の場合を考える。

このとき、ポテンシャルが存在しない領域における磁場中の電子に対するシュレディンガー方程式は

$$\frac{1}{2}(-i\nabla - \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

ポテンシャルが存在する領域では

$$\frac{1}{2}(-i\nabla - \mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon'\psi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

となる。

これらに共役な方程式

$$[i\nabla' - \mathbf{A}(\mathbf{r}')]^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = 2\varepsilon G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3)$$

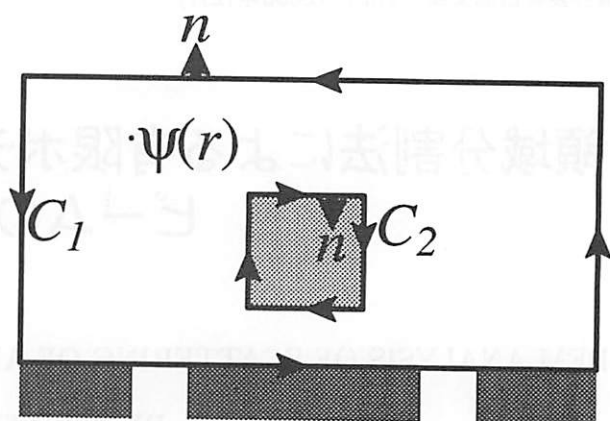


Fig.2 Contour for evaluation of the wave function in the zero-potential region.

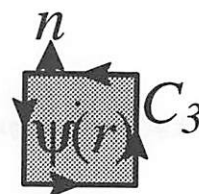


Fig.3 Contour for evaluation of the wave function in the potential region.

を満たすグリーン関数は<sup>(5)</sup>

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) = e^{i(x'-x)(y+y')/2} G_0(z; \varepsilon) \\ G_0(z; \varepsilon) \equiv \frac{1}{4\pi} \Gamma(\frac{1}{2} - \varepsilon) U(\frac{1}{2} - \varepsilon, 1, z) e^{-z/2} \quad (4)$$

で与えられる。ただし、 $z \equiv (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2/2$ 、 $U(\frac{1}{2} - \varepsilon, 1, z)$  は Kummer 関数<sup>(6)</sup>である。

これを用いると、ポテンシャルのない領域の波動関数は Fig.2 に示す経路  $C_1, C_2$  に沿った線積分を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{C_1+C_2} [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \nabla' \psi(\mathbf{r}') \\ - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)] \cdot \mathbf{n} dS' \\ - 2i \int_{C_1+C_2} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \psi(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n} dS' \quad (5)$$

と表せる。ここで  $\mathbf{n}$  は領域から外向き単位法線ベクトルである。また、経路  $C_2$  では経路  $C_1$  と逆回りの積分になっていることに注意しなければならない。

Fig.3 に示す経路  $C_3$  を用いると、ポテンシャルが存在する領域の波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{C_3} [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon') \nabla' \psi(\mathbf{r}') \\ - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon')] \cdot \mathbf{n} dS'$$

$$-2i \int_{C_3} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon') \psi(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot n dS' \quad (6)$$

と与えられる。

各々の領域内の点 $\mathbf{r}$ を境界に近づけると、以下のような積分方程式が得られる、

$$c(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \text{p.v.} \int_{C_1+C_2} dS' \left( G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}')}{\partial n'} - 2iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \psi(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n} - \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)}{\partial n'} \right) \quad (7)$$

$$c(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \text{p.v.} \int_{C_3} dS' \left( G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon') \frac{\partial \psi(\mathbf{r}')}{\partial n'} - 2iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon') \psi(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n} - \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon')}{\partial n'} \right). \quad (8)$$

ここで、記号 p.v. と  $\partial/\partial n'$  はそれぞれ Cauchy の主値積分と外向き法線方向微分を表す。係数  $c(\mathbf{r})$  は境界上の点 $\mathbf{r}$ での境界の作る内角が  $\theta(\mathbf{r})$  であれば  $c(\mathbf{r}) = \theta(\mathbf{r})/2\pi$  である<sup>(7)</sup>。境界が点 $\mathbf{r}$ で滑らかであれば  $c(\mathbf{r}) = 1/2$  となる。

### 3. 境界条件と離散化

境界積分を実行するための境界条件と離散化方法を示す。

磁場中では、古典力学的には電子は壁や散乱ポテンシャルによる反射と円(サイクロトロン)運動(半径  $r_c \equiv K = \sqrt{2\varepsilon}$ )を繰り返しながら壁やポテンシャルに沿って進んで行くスキッピング軌道を描く。従って、古典的な電子は壁や散乱ポテンシャルから  $2r_c$  より遠くに到達することはない。量子力学的には、これがグリーン関数の  $2r_c$  以遠での急激なガウシアン減衰に現れている。電子は壁や散乱ポテンシャルからサイクロトロン直径以内の範囲で存在し、それ以遠における波動関数の振幅はほとんどない。この事実は散乱ポテンシャルが存在する場合もポテンシャル境界以外における境界条件は散乱ポテンシャルが存在しない場合と同様の扱いを可能とする。

電子は右回りにのみ回転するため、壁付近に局在しながら、境界 B(Fig.1) の方向へ進む。このため境界 B の壁に近い部分のみ境界積分を行えばよさそうであるが、それだけでは十分ではない。というのは、磁場のかかった系では時間反転対称性が破れているため、境界 A で電子は境界内から流れ得るという境界条件のもとに境界積分を行わないと、境界 A から電子波が流れ込む解も許してしまうからである。このことはグリーン関数のベクトルポテンシャルのゲージによらない部分  $G_0(z; \varepsilon)$  が実数であり、外向波、内向波の区別がないことにも現れている。

まず、経路  $C_1$  における境界条件を示す。これは、散乱ポテンシャルが存在しない場合と基本的に同じである。

境界壁は無限に高いポテンシャルを仮定する。壁では波動関数  $\psi(\mathbf{r}')$  の値は 0 であり、式 (7) の  $\psi(\mathbf{r})$  の右辺は第一項目のみが残る。波動関数の法線方向微分  $\partial\psi/\partial n'$  が未知変数となる。

ここではサイクロトロン直径がエミッタ、コレクタの幅よりも十分大きい、弱磁場の場合を考えているので、導波管内の電子状態への磁場の影響は小さい。このため、両導波管内つまり  $y < 0$  の領域では  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$  とする。 $y > 0$  におけるベクトルポテンシャルは  $\mathbf{A} = (-y, 0, 0)$  のように選んでいるので、このとき  $x$  軸に沿ってベクトルポテンシャルの連続性が満たされている。

エミッタ内で  $\alpha$  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

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(\mathbf{r}) &= u_\alpha^*(\mathbf{r}) + \sum_\beta r_{\alpha\beta} u_\beta(\mathbf{r}), \\ u_\alpha(\mathbf{r}) &\equiv \exp(-ik_\alpha y) \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}(x + \frac{d}{2})\right), \\ &(\alpha, \beta = 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (9)$$

と書ける。エミッタ部分では反射係数  $r_{\alpha\beta}$  が未知変数である。

コレクタでの波動関数は同様に

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\lambda t_{\alpha\lambda} w_\lambda(\mathbf{r}), \quad (10)$$

$$w_\lambda(\mathbf{r}) \equiv \exp(-ik_{y,\lambda} y) \sqrt{\frac{2}{d}} \sin(k_{x,\lambda}(x + \frac{d}{2} - L))$$

と表される。ここで、 $L$  はエミッタとコレクタの間隔で、 $L = 5d$  である。コレクタ部分では透過係数  $t_{\alpha\lambda}$  が未知変数である。

境界 A, B では便宜上十分広い(サイクロトロン半径の 4 倍の)幅の導波管を考え、波動関数はその中に形成されるエッジ状態(固有関数)  $\chi(\mathbf{r}, \kappa_\delta)$  を用いてそれぞれ

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\delta s_{\alpha\delta} \chi(\mathbf{r}, \kappa_\delta), \quad (11)$$

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\sigma u_{\alpha\sigma} \chi(\mathbf{r}, \kappa_\sigma) \quad (12)$$

のように展開される。ここで、エッジ状態は

$$\chi(\mathbf{r}, \kappa) \equiv \exp(ik_x x) \varphi(y, \kappa), \quad (13)$$

で定義される。但し、 $\varphi(y, \kappa)$  は微分方程式

$$\left[ -\frac{d^2}{dy^2} + (\kappa + y)^2 \right] \varphi(y, \kappa) = 2\varepsilon \varphi(y, \kappa) \quad (14)$$

と、壁と壁から十分遠くに取った境界での境界条件  $\varphi(y, \kappa) = 0$  で決定される固有状態である。固有波数

$\kappa_\delta$ と $\kappa_\sigma$ は式(11)と(12)がそれぞれ境界AとBで外向波を表すように取る. 展開係数 $s_{\alpha\delta}$ ,  $u_{\alpha\sigma}$ が未知変数となる.

経路 $C_2$ ,  $C_3$ においては, 離散化された各分点において波動関数 $\psi$ , その法線方向の微係数 $\partial\psi/\partial n'$ 両方が未知変数となる. これらの経路上における波動関数およびその微係数, それぞれの連続性から, 経路 $C_2$ ,  $C_3$ における積分は同一の変数を用いて実行する. このとき経路 $C_2$ の法線ベクトルと経路 $C_3$ の法線ベクトルは逆向きであるので注意を要する. ポテンシャル境界上の波動関数の値は式(7), (8)を異なる2つの方程式から評価されるため, 2つの未知数, 波動関数およびその法線方向微分が決定される.

式(7), (8)の離散化の具体的な手順は一次要素を用いた一般的な方法に従う<sup>(7),(8)</sup>. 但し, ここでは古典力学の解から電子の存在確率の変化の激しいであろうと予測される部分に節点を集中させている. また, ポテンシャルの存在する領域が正方形であるため, 頂点では法線方向が特異になる. そこで, 頂点近傍では各辺一つずつ分点を取る, 2点法を用いている. 離散化して得られる連立方程式を $\partial\psi_i/\partial n'$ ,  $r_{\alpha\beta}$ ,  $s_{\alpha\delta}$ ,  $t_{\alpha\lambda}$ ,  $u_{\alpha\sigma}$ ,  $\psi_i$ ,  $\partial\psi_i/\partial n'$ について解く. この解を式(5), (6)に代入すれば, ポテンシャルがない領域, ポテンシャルが存在している領域, 各々の波動関数の値が得られる.

エミッタでの反射確率, コレクタ, 境界A, Bへの透過確率はそれぞれ

$$R = \sum_{\beta} \frac{v_{\beta}}{v_{\alpha}} |r_{\alpha\beta}|^2, \quad T = \sum_{\lambda} \frac{v_{\lambda}}{v_{\alpha}} |t_{\alpha\lambda}|^2$$

$$T_A = \sum_{\delta} \frac{v_{\delta}}{v_{\alpha}} |s_{\alpha\delta}|^2, \quad T_B = \sum_{\sigma} \frac{v_{\sigma}}{v_{\alpha}} |u_{\alpha\sigma}|^2$$

により計算される. ここで,  $v_{\alpha}$ ,  $v_{\beta}$ ,  $v_{\lambda}$ ,  $v_{\delta}$ ,  $v_{\sigma}$ はそれぞれ $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\lambda$ ,  $\delta$ ,  $\sigma$ で記述される量子状態の群速度である.

#### 4. 計算結果

磁場の強さを表す無次元パラメーター $\tilde{B} \equiv B/B_0 (= d^2)$ を導入する. ここで,  $B_0$ は $B_0 \equiv \hbar/qd^2$ と定義され,  $\tilde{B}$ は一辺 $d$ の正方形を貫く磁束密度を磁束量子でスケールしたものという意味がある. 例えば, 導波管の幅が250 nmのとき,  $\tilde{B} = 1$ は約0.01 Tの磁束密度を表す.

入射電子波のエネルギーに関するパラメーターは $Kd = 15\sqrt{2}$ とする. 散乱ポテンシャルの大きさは $vd^2 = 100$ , 正方形の存在領域の中心座標を $(5d/2, 2d)$ , 一辺の長さを $2d$ とした. 無次元化されたエネルギーは $(Kd)^2/2 = 225$ であるので, ポテン

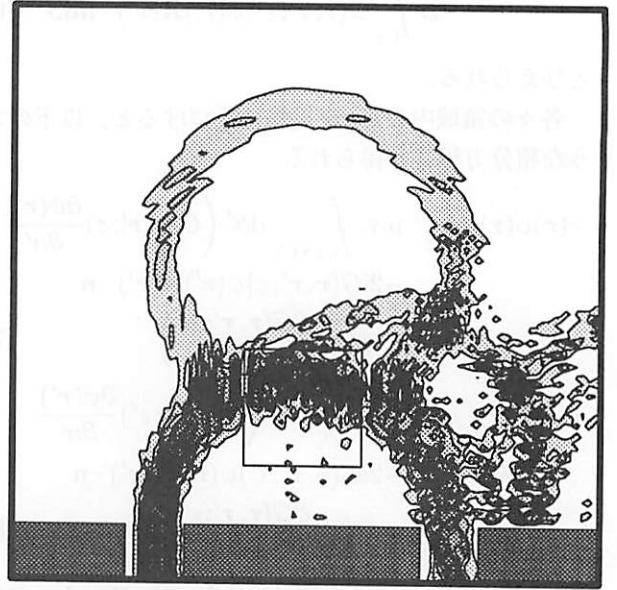


Fig.4 Contour of the density of the electrons for  $vd^2 = 100$  at  $\tilde{B} = 201/24$ .

シャルの存在領域においても電子のエネルギーは正であり, トネル領域とはなっていない.

有限なポテンシャルに衝突することにより, 透過, 反射を起こす電子ビームの様子を見るために,  $\tilde{B} = 201/24 = 8.375$ での電子密度の等高線を Fig.4に示す. 比較のために散乱ポテンシャルが存在しないときのビームの様子を Fig.5に示す. 電子ビームの多くはポテンシャル領域に透過し, 残りの部分が広がることなくビームにコリメートされたまま円軌道を描いていることが分かる. また, 透過したビームの一部はポテンシャル領域を斜めにすり抜け, プリズム効果を示している部分があることが分かる. ポテンシャル領域内ではサイクロトロン半径は小さくなるはずであるが, その領域が小さいためかあまりはっきりとはしていない. 今後, 詳しい解析すすめる場合には, ポテンシャル領域をより大きく取る必要がある.

磁場が強い場合の例として,  $\tilde{B} = 421/24 = 17.54$ での電子密度の等高線を Fig.6に示す. ポテンシャル領域の境界を実線で示してある(以下同様). 比較のために散乱ポテンシャルが存在しないときのビームの様子を Fig.7に示す. 電子ビームは透過, 反射をくり返し, ポテンシャル領域の周りに局在していることが分かる. しかし, コレクタを越えて下流側に向かっている部分は散乱等の影響を受け, ポテンシャルがないときは周期が変化してはいるけれども, まだ, ビームとしてスキッピング軌道を形成している様子が分かる.

電子がポテンシャル領域周辺に局在し, 干渉を起こすため電子の確率分布が非常に複雑になる. この構造は電子の波長よりも細くなる. このことが, しばしば計算精度を落とす原因となっている.

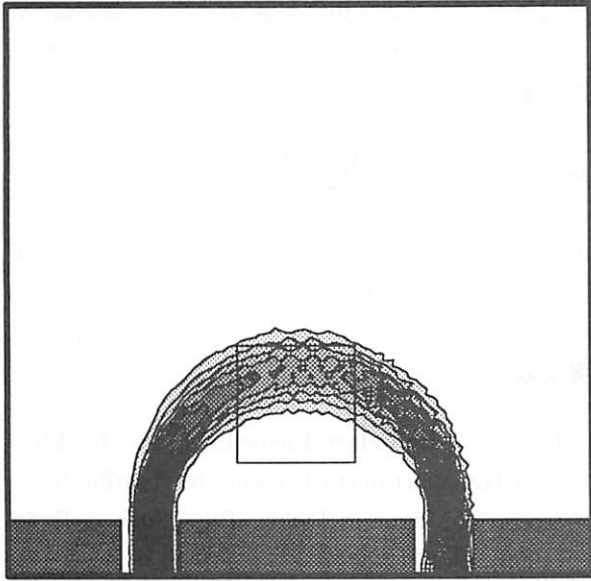


Fig.5 Contour of the density of the electrons for  $vd^2 = 0$  at  $\tilde{B} = 201/24$ .

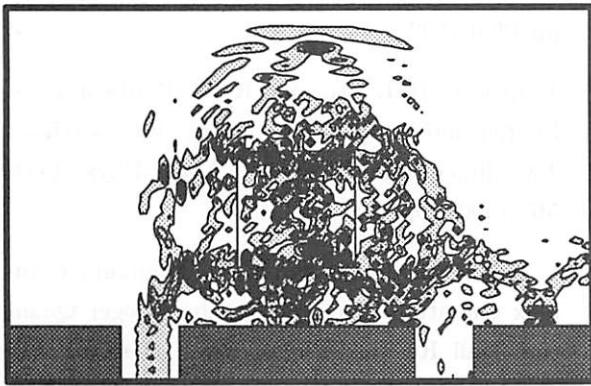


Fig.6 Contour of the density of the electrons for  $vd^2 = 100$  at  $\tilde{B} = 421/24$ .

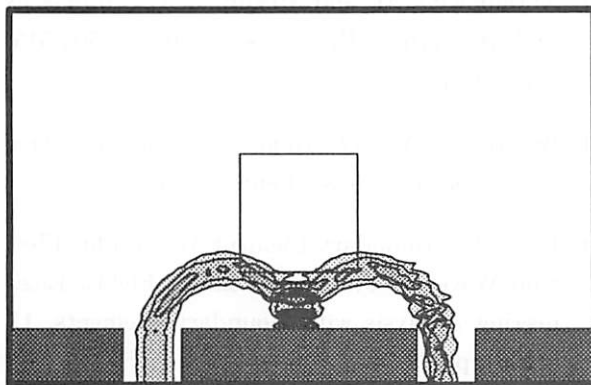


Fig.7 Contour of the density of the electrons for  $vd^2 = 0$  at  $\tilde{B} = 421/24$ .

ここでの計算においては、正方形のポテンシャル境界の一边を100分割して計算している。ポテンシャル境界上の未知変数の数は  $4 \times 100 \times 2 = 800$  となる。磁場の強さにより多少異なるが、トータル未知数が約1400であるので、いかにポテンシャル境界上の離散化が不利か分かる。

計算は全て alpha21264(667MHz を 700MHz にクロックアップ, Cache : 4MB/CPU) CPU を2個搭載のワークステーション (RAM:1 4GB, 公称 1.2Gflops/CPU) を用いて行った。OS は RedHat Linux と Compaq Tru64 UNIX で、使用コンパイラは前者では Compaq Fortran for Linux Alpha(g77 よりパフォーマンスは10倍改善されることを確認済)、後者の場合は Compaq DIGITAL Fortran を用いた。計算時間は磁場の値によって多少異なるが、最も時間のかかる、最も磁場の弱い場合においても、一つの磁場に対して、連立方程式を解くまでに約7分、波動関数を計算する時間も約30分程度であった。この計算時間であれば、実用の範囲であると考えられる。

## 5. 結論および議論

一様磁場中で、有限な強さのポテンシャルがあるときに、電子ビームの散乱を境界要素法を用いて解析した。有限ポテンシャルは一定の値をとると仮定した。ポテンシャルが存在する領域と無い領域を分割し、各々の領域についての積分方程式を連立させることにより解を得た。磁場中の電子ビームの有限の強さのポテンシャルによる反射、屈折の法則を厳密に量子力学的に議論されたことが未だかつてなかったが、本手法はそれを可能とする。

しかし、問題点も多い。まず一つ目は、確率の保存が破られるケースが極めて多いことである。本論文の計算においてはエネルギーつまり  $Kd$  を一定として磁場を変化させているが、計算例の半数以上において、確率の保存に10%以上の誤差がある。この原因は今後の詳しい解析が必要である。以下に述べることも関連していると思われるが、それとは別に磁場中の電子の波動関数がサイクロトロン半径以上には広がらず、散乱体の周りに強く局在するため、小さな離散化誤差が重大な誤差をもたらしている可能性がある。また、第3節においても指摘したが、磁場中の電子のシュレディンガー方程式は時間反転対称性が破られており、グリーン関数は本論文で示したものが唯一のものである。磁場がかかっていない場合のように、グリーン関数に外向波、内向波の境界条件はない。このために、入力に対する反応以外の解を誘起してしまう傾向が強い。これに対する対策も必要であろう。

二つ目はポテンシャルが存在する領域が点在し、全体での境界の距離が長く、電子の波長が短くなるほど、分点数が増えることが問題となる。本手法の場合、有限ポテンシャルの境界上の分点では波動関数およびその法線方向微分両方が未知変数であり、有限ポテンシャルの境界上の分点の数が増えるのは重大な問題である。アンチドットアレイのように多数の散乱体がある場合や境界の構造が複雑な場合にはより深刻となる。

三つ目は磁場中自由空間の電子のグリーン関数の性質によるものである。グリーン関数は $\Gamma(\frac{1}{2} - \varepsilon)$ を含むため、 $\varepsilon = n + \frac{1}{2}$  ( $n:0$  以上の整数) において発散する。この発散は磁場中の電子の状態が無限空間において、ランダウ量子化され、エネルギーが離散的な値 $\varepsilon = n + \frac{1}{2}$ しか取らないことに起因している。境界があるような系においては、エッジ状態が存在し、エネルギーは連続値を取り得るので本来このような特異性を含んでいない。無限空間におけるグリーン関数を用いる境界要素法の抱える問題である。これはポテンシャルが存在しないときにおいても問題であるが、ポテンシャルが存在するときにはより頻繁に起こるようになる。本論文で示した、ポテンシャルのある領域を分割する方法ではポテンシャルの高さの種類分のエネルギーに対してグリーン関数を求めねばならない。その全てのエネルギーの値が $\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$ から離れていなければならない。特に、 $\varepsilon$ は $\varepsilon \equiv \frac{1}{2}(Kd)^2/\tilde{B}$ のように定義される。エネルギーつまり $Kd$ を一定として磁場変化を考えると、発散の間隔は

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{B} &= \frac{1}{2}(Kd)^2 \left( \frac{1}{\varepsilon_n} - \frac{1}{\varepsilon_{n+1}} \right) \\ &= \frac{(Kd)^2}{2(n + \frac{1}{2})(n + \frac{3}{2})} \end{aligned}$$

となる。 $n$ が大きいとき、つまり、弱磁場における発散の間隔はきわめて小さくなり、磁場が弱いほど頻繁にグリーン関数の発散が起こる。しかし、数学的には発散点の分布の測度は0であるので、 $(Kd)^2$ を無理数に設定することによりグリーン関数の発散はほぼ確実に回避できる。

一つ目、二つ目の問題点の解決法として高速多重極展開法の応用が考えられる。これまでに2次元ヘルムホルツ方程式に対して高速多重極展開法が適用されている<sup>(9)</sup>。2次元ヘルムホルツ方程式の場合にはベッセル(ハンケル)関数を用いて多重極展開されているが、磁場中電子に関しては $z$ 方向の角運動量、ハミルトニアンの同時固有関数

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | n, m \rangle &= N_{n,m} e^{-im\phi - r^2/4} \left( \frac{r^2}{2} \right)^{\frac{m}{2}} L_n^{(m)} \left( \frac{r^2}{2} \right) \\ N_{n,m} &\equiv \sqrt{\frac{n!}{2\pi(n+m)!}} \end{aligned} \quad (15)$$

で展開するのが、有利であると考えられる。ここで、 $L_n^{(m)}$ はラゲールの陪多項式であり、 $r, \phi$ は極座標、 $n$  ( $\geq 0$ )、 $m$  ( $\geq -n$ )はエネルギー、角運動量の量子数である。また、グリーン関数は

$$G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{\infty} \frac{\langle \mathbf{r}_2 | n, m \rangle \langle n, m | \mathbf{r}_1 \rangle}{\varepsilon - (n + \frac{1}{2})} \quad (16)$$

と展開できる。これらの表現を用いて同様の形式で実現することが今後の課題である。

## 参考文献

- (1) Ueta, T. : Boundary Element Method for Electron Transport in the Presence of Pointlike Scatterers in Magnetic Fields, Phys. Rev. B 60 (1999), pp.8213-8217.
- (2) J. Spector, H. L. Stormer, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer and K. W. West : Electron Focusing in Two-dimensional Systems by means of an Electrostatic Lens, Appl. Phys. Lett. 56 (1990), pp.1290-1292.
- (3) J. Spector, H. L. Stormer, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer and K. W. West : Refractive Switch for Two-dimensional Electrons, Appl. Phys. Lett. 56 (1990), pp.2433-2435.
- (4) V. Nikos Nicopoulos and S. A. Trugman : Complex Quantum Dynamics in the Integer Quantum Hall Regime, Phys. Rev. B 45 (1992), pp.11004-11015.
- (5) Ueta, T. : Green's Function of a Charged Particle in Magnetic Fields, J. Phys. Soc. Jpn., 61(1992), pp.4314-4324.
- (6) Abramowitz, M. and Stegun, I. A. : *Handbook of Mathematical Functions*, (1970), pp.504-515, Dover Publ.
- (7) Brebbia, C. A. : *The Boundary Element Method for Engineers*, (1978), Pentech Press.
- (8) Ueta, T. : Boundary Element Method for Electron Waves in Uniform Magnetic Fields, Engineering Analysis with Boundary Elements, 17 (1996), pp.69-74.
- (9) 福井卓雄、勝本順三 : 高速多重極境界要素法による2次元散乱問題の解析, BTEC 論文集, 7 (1997), pp.47-52.