

エネルギースペクトルによる1次元二重周期超格子の構造決定

DETERMINATION OF A STRUCTURE OF A DUAL-PERIODIC SUPERLATTICE
FROM AN ENERGY SPECTRUM

植田 毅

Tsuyoshi UETA

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

The present paper presents a solution for an inverse problem, which determines structures of a dual-periodic superlattice from given photonic or electronic band structures. The tight-binding model is employed by assuming strong localization of light or electron in layers with a high dielectric constant or a lower electrostatic potential. A general formulation to determine modulated dielectric constants or electrostatic potentials of layers from energy spectrum structures is given. The problem is reduced to an algebraic problem. Two example problems are practically solved.

Key Words: Superlattice, Dual Periodicity, Inverse Problem, Tight-Binding Approximation

1. はじめに

島田らは, Hofstadter⁽¹⁾が見出した磁場中の強束縛電子⁽²⁾が示すバンドのフラクタル的分裂が本質的に系の二重周期性にあることから, 誘電体多層膜(超格子)に二重周期性を導入し(誘電率の空間変化の模型を Fig.1 に示す), その周期を変化させると, 磁場中の強束縛電子同様, フォトニックバンドが自己相似的なバタフライダイアグラムに成ることを理論的に示した⁽³⁾. これは, 利用できる物質の誘電率の範囲, 加工精度などの制約のある中で, 二重周期性を導入し, その周期を変化させることにより, 自由にバンド構造を設計できることを意味していた. 例えば, 従来は単一波長の光にしか分離できなかった光ファイバグレーティング⁽⁴⁾に二重周期性を導入することにより, 複数波長の光分離機能をもたせられる可能性がある⁽⁵⁾.

また, 電子伝導においても, 半導体超格子を量子力学的バンドパスフィルターとして利用することが提案されている. その特性の改善のため, 変調を導入した超格子の研究が盛んである⁽⁶⁾.

しかし, 二重周期超格子を実用化する場合に, 特定のエネルギーバンドを実現するために, パラメータをどのように設定すればよいかという問題がある. つまり, 必要なバンド構造から超格子の構造を決定する方法を確立する必要がある.

本論文では, 強束縛近似^(2, 7)を用いて, エネルギースペクトルから二重周期超格子の構造を決定する一般的定式化を行う. 本手法の計算精度, 有効性を確認するために, 既知の

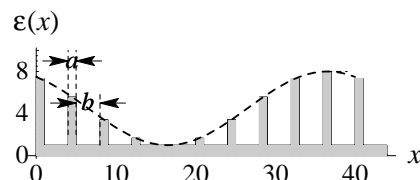


Fig. 1 A model of dielectric functions $\varepsilon(x)$ for typical dual-periodic superlattices defined by eq.(3): $\varepsilon_{min} = 1$, $\varepsilon_{max} = 8$, $b/a = 1$, $p = 1/10$.

二重周期フォトニック結晶のバンド構造を用いて逆問題の設定をした具体的計算例を示す.

2. 逆問題の定式化

まず, 二重周期多層膜(フォトニック結晶)における電場の支配方程式を考える. 多層膜は厚さ a , 比誘電率 ε_a の層 A と厚さ b , 比誘電率 ε_b の層 B からなるとし, その誘電率は矩形的に変化するとする. 二重周期性を導入するために, l 番目の層 A の比誘電率を

$$\varepsilon_a(l) = \frac{\varepsilon_{max} + \varepsilon_{min}}{2} + \frac{\varepsilon_{max} - \varepsilon_{min}}{2} \cos(2\pi pl) \quad (1)$$

のように変化させる. ここで, ε_{max} , ε_{min} , p が二重周期多層膜を特徴付けるパラメータである. ただし, p は $p = m/n$ (m, n は互いに素な自然数) のように有理数にとる.

光が多層膜に垂直に入射する場合を考えると、Maxwell 方程式は厳密に

$$\mathbf{0} = \frac{d^2 \mathbf{E}}{dx^2} + \varepsilon(x) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{E} \quad (2)$$

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_b + \sum_i (\varepsilon_a(i) - \varepsilon_b) U(x - i(a+b)) \quad (3)$$

$$U(x) \equiv \begin{cases} 1 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, a < x \end{cases}$$

となる (Fig.1). ここで、 c は真空中の光速であり、 x 軸を多層膜の厚さ方向に取った。この方程式の解には、誘電率の小さい層 B に局在するモードもあるが、逆に、層 A に強く局在するモードも存在している⁽⁵⁾。このように、層 A に強く局在するモードを考える場合、強束縛近似⁽²⁾ がよい近似を与えると考えられる⁽⁷⁾。強束縛方程式は、 $p=1$ の場合、つまり、単周期の場合、単一バンド模型であるから、単周期のバンドが各々十分分離しているときにより良い近似となる。

式 (2) はスカラー化できることも考慮すると、

$$\psi_{l+1} - 2\psi_l + \psi_{l-1} + \varepsilon_a(l) \left(\frac{\omega(a+b)}{c}\right)^2 \psi_l = 0 \quad (4)$$

のように強束縛近似される。この方程式は、 l 番目のサイト (層 A) の電場を代表する量 ψ_l を用いて、間隔 $a+b$ (周期) で式 (2) を差分近似したものと考えればよい。

電子系では、支配方程式はシュレディンガー方程式であり、ポテンシャルエネルギー $V(x)$ に二重周期性を与える。シュレディンガー方程式は元来スカラーの Helmholtz 方程式であるから、式 (2) において $\varepsilon(x) \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$ を $E - V(x)$ (ただし、 E は電子のエネルギー) と置き換えたものと同様の方程式となる。電子が強く局在する層の l 番目のもののポテンシャルを V_l とすると、強束縛方程式は

$$\psi_{l+1} - 2\psi_l + \psi_{l-1} + (E - V_l)(a+b)^2 \psi_l = 0$$

となる。

この形の方程式のバンド構造の解析は文献 (8) に詳しく、逆問題にも示唆を与える。

本論文では、フォトニック結晶のエネルギースペクトルの構造を与えて、誘電率を決定する逆問題を考える。したがって、比誘電率は式 (1) の $\varepsilon_a(l)$ により与えられるのではなく、未知変数となる。そこで、 l 番目のサイトの比誘電率 ε_l を未知変数として導入する。ただし、周期性を考えて $\varepsilon_{l+n} = \varepsilon_l$ とする。

このとき、 $\lambda \equiv (\omega(a+b)/c)^2$ および $\beta_l \equiv 2 - \varepsilon_l \lambda$ を定義すると、式 (4) は

$$\begin{pmatrix} \psi_{l+1} \\ \psi_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_l & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_l \\ \psi_{l-1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

と、行列表示できる。電子系の場合は、 $\lambda \equiv E(a+b)^2 - 2$ 、 $\beta_l \equiv v_l - \lambda$ 、 $v_l \equiv V_l(a+b)^2$ と定義すればよい。

式 (5) を繰り返し用いると

$$\begin{pmatrix} \psi_{l+n} \\ \psi_{l+n-1} \end{pmatrix} = T_n(l) \begin{pmatrix} \psi_l \\ \psi_{l-1} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$T_n(l) \equiv \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} \beta_{l+j} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

を得る。ただし、積の記号 $\prod_{j=1}^n$ は j の小さいものから右に来るように順序付けするものとする。

一方、系の周期性から Bloch の定理が成り立ち、

$$\begin{pmatrix} \psi_{l+n} \\ \psi_{l+n-1} \end{pmatrix} = e^{iq} \begin{pmatrix} \psi_l \\ \psi_{l-1} \end{pmatrix} \quad (8)$$

を得る。 i は虚数単位であり、 q は無次元化した波数である。

式 (6)、(8) より、

$$T_n(l) \begin{pmatrix} \psi^{(l)} \\ \psi^{(l-1)} \end{pmatrix} = e^{iq} \begin{pmatrix} \psi^{(l)} \\ \psi^{(l-1)} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

を得る。 e^{iq} は l に依存しないから、 $T_n(0)$ を考えれば十分である。

ここで、行列 $T_n(0)$ の 4 成分 a_n, b_n, c_n, d_n

$$\begin{pmatrix} a_n & b_n \\ c_n & d_n \end{pmatrix} \equiv T_n(0) = \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} \beta_j & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

のように導入する。

転送行列の性質から要求され、かつ、具体的に計算すれば

$$a_n d_n - b_n c_n = \det T_n(0) = 1 \quad (11)$$

であるから、

$$\Delta_n(\lambda) \equiv \text{Tr } T_n(0) = a_n + d_n \quad (12)$$

を用いると、

$$e^{iq} = \Delta_n(\lambda)/2 \pm \sqrt{(\Delta_n(\lambda)/2)^2 - 1} \quad (13)$$

$$= \exp(\pm i \cos^{-1}(\Delta_n(\lambda)/2)), \quad (14)$$

と書ける。これより、エネルギーバンド構造を与える式

$$\Delta_n(\lambda) = 2 \cos q \quad (15)$$

を得る。このように、エネルギーバンドを決定する問題は $\Delta_n(\lambda)$ 、つまり、 a_n, b_n, c_n, d_n を決定することに帰着する。

$T_n(0)$ の定義式 (7) より、 a_n, b_n, c_n, d_n に対する漸化式

$$\begin{aligned} a_n &= \beta_n a_{n-1} - a_{n-2} \quad (n \geq 2), \\ a_1 &= 2 - \varepsilon_1 \lambda, \quad a_0 = 1 \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} b_n &= \beta_n b_{n-1} - b_{n-2} \quad (n \geq 2), \\ b_1 &= -1, \quad b_0 = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

$$c_n = a_{n-1} \quad (18)$$

$$d_n = b_{n-1} \quad (19)$$

を得る (電子系の場合、 $a_1 = v_1 - \lambda$) .

この結果および式 (12) より

$$\Delta_n(\lambda) = a_n + b_{n-1} \quad (20)$$

となる。

これから、 $\Delta_n(\lambda)$ は λ の n 次多項式であることが分かる。その定数項 $\Delta_n(0)$ は、式 (16), (17) において、 $\lambda = 0$ とすることに、

$$\begin{aligned} \Delta_n(0) &= (a_n + b_{n-1})|_{\lambda=0} \\ &= (a_1 + b_0)|_{\lambda=0} \\ &= 2 \end{aligned} \quad (21)$$

と与えられ、定数である (電子系では $\Delta_n(0)$ は $\{v_l\}$ を含む)。また、

$$\lambda^n \text{ の係数} = (-1)^n \prod_{j=1}^n \varepsilon_j$$

であることも容易に分かる。電子系の場合は λ^n の係数 = 1 である。

エネルギーバンドは式 (15) で与えられ、 $\lambda \equiv (\omega(a+b)/c)^2$ で定義されるから、この λ の n 次方程式の正の解からバンドが求まる (電子系の場合、 λ が正である必要はない)。

文献 (3) に示されているように、 $p = m/n$ のときバンドは n のサブバンドに分裂する。その n のサブバンドの $2n$ のバンド端は

$$\Delta_n(\lambda) = 2 \quad (22)$$

および

$$\Delta_n(\lambda) = -2 \quad (23)$$

の解で与えられる。 $\Delta_n(\lambda)$ の定数項は 2 であるから、方程式 (22) は必ず $\lambda = 0$ の解を持つ。つまり、最下端のサブバンドの下端は必ず $\omega = 0$ となる。このように、式 (22) は低エネルギー側から奇数番目のサブバンドの下端および偶数番目のものの上端を与え、逆に、式 (23) は奇数番目のサブバンドの上端および偶数番目のものの下端を与える。

逆問題ではバンド端のエネルギー (周波数) の値を与えて、誘電率の組 $\{\varepsilon_j\}$ を決定する。しかし、バンド端の数は $2n$ であり、未知変数である誘電率の組 $\{\varepsilon_j\}$ の自由度は n である。このことから、原理的に全てのバンド端を指定することはできない。式 (22) はすでに一つの解が分かっているので、単独では全ての $\{\varepsilon_j\}$ を決定することはできない。そこで、式 (23) のみを用いることにする。この場合、最下端のサブバンドは上下端ともに決定されることになる。電子系の場合、式 (22) は $\lambda = 0$ を解として持たないので、式 (22) 単独で構造を決定することができる。

指定するバンド端、この場合は奇数番目のサブバンドの上端および偶数番目のもの下端が $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ であるとすると、式 (23) は必ずこれらを解にもつ。このことから、 λ^n の係数も考慮に入れると、恒等的に

$$\Delta_n(\lambda) + 2 = \prod_{j=1}^n (-\varepsilon_j)(\lambda - \lambda_j) \quad (24)$$

が成り立つ。この両辺の各次数の係数を比較することにより、誘電率の組 $\{\varepsilon_j\}$ を決定する方程式

$$\left. \frac{d^l}{d\lambda^l} (\Delta_n(\lambda) + 2) \right|_{\lambda=0} = \left. \frac{d^l}{d\lambda^l} \left(\prod_{j=1}^n \varepsilon_j (\lambda_j - \lambda) \right) \right|_{\lambda=0} \quad (25)$$

($l = 0, 1, \dots, n-1$) が得られる。この n 本の方程式を連立させ、 $\{\varepsilon_j\}$ について解くことにより、二重周期系を決定することができる。

例えば、 $l = 0$ の方程式は

$$\Delta_n(0) + 2 = 4 = \prod_{j=1}^n \varepsilon_j \lambda_j,$$

となる。

同様に、電子系の場合の方程式は

$$\left. \frac{d^l}{d\lambda^l} (\Delta_n(\lambda) + 2) \right|_{\lambda=0} = \left. \frac{d^l}{d\lambda^l} \left(\prod_{j=1}^n (\lambda_j - \lambda) \right) \right|_{\lambda=0}$$

である。

求めた複数の $\{\varepsilon_j\}$ それぞれに対し、第一 Brillouin 域の中央 ($q = 0$) でのバンドのエネルギーの値を計算し、要求したバンド (もしくはそれに似た) 構造を持つものを解とする。

求めた二重周期系の中に、要求したバンド構造をとるものがない場合、それは要求しているバンド構造が二重周期系では実現できないものであることを意味する。

3. 計算結果

$a_n, b_{n-1}, \Delta_n(\lambda)$ を漸化式から求め、式 (25) から連立方程式を導出する具体的な計算は、単純な代数計算ではあるが、かなり面倒な計算となる。しかし、数式処理、数値計算の行える Mathematica⁽⁹⁾ を用いれば、20 行程度のプログラムで実現することができる。このとき、Mathematica は多項式の各次数の係数を求める関数 (Coefficient) を備えているので、式 (25) に従い微分を実行する必要はない。 $n = 5$ の場合の具体的な計算例として、Fig.2 に示すバンド構造を与

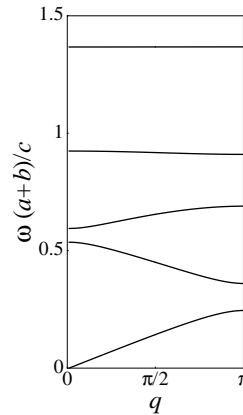


Fig. 2 A sample bandstructure for $n = 5$.

える $\{\varepsilon_j\}$ を決定する. バンド端の値は

$$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5) = (0.06035199663904461, 0.12968984721324198, 0.47563301955506165, 0.827995040806912, 1.8704240555172833)$$

と与えられる. このとき, 解くべき連立方程式は

$$\begin{aligned} 5(e[1] + e[2] + e[3] + e[4] + e[5]) &= 11.25 \\ 4e[1]e[2] + 6e[1]e[3] + 4e[2]e[3] + 6e[1]e[4] + 6e[2]e[4] + 4e[3]e[4] + 4e[1]e[5] + 6e[2]e[5] + 6e[3]e[5] + 4e[4]e[5] &= 9.01698 \\ 3e[1]e[2]e[3] + 4e[1]e[2]e[4] + 4e[1]e[3]e[4] + 3e[2]e[3]e[4] + 3e[1]e[2]e[5] + 4e[1]e[3]e[5] + 4e[2]e[3]e[5] + 3e[1]e[4]e[5] + 4e[2]e[4]e[5] + 3e[3]e[4]e[5] &= 2.38882 \\ 2(e[1]e[2]e[3]e[4] + e[1]e[2]e[3]e[5] + e[1]e[2]e[4]e[5] + e[1]e[3]e[4]e[5] + e[2]e[3]e[4]e[5]) &= 0.233395 \\ e[1]e[2]e[3]e[4]e[5] &= 0.00693781 \end{aligned}$$

のようになる. ここで, 式 (25) のままでは方程式の係数が大きくなり過ぎ, 解けないため, $\{\lambda_j\}$ を 10 倍し, $e[j] \equiv \varepsilon_j/10$ とスケールしている. この連立方程式は 1 次の方程式ではないけれども, Mathematica 4.1 で (NSolve 関数を用いて) 数値的に解くことができる. その解は $n!$ 組得られ, $n = 5$ のときでさえ, 120 組もの解が現れる. その内, $\{\varepsilon_j\}$ の全てが完全に実数として得られたものは 40 組である. その中でも同じ形状のもの位相をずらす, つまり, $\{\varepsilon_j\}$ をサイクリックに入れ替える自由度が 5, 時間 (左右) 反転対称性の自由度 2 がある. 計算精度による差も考慮すると, 40 組の解に含まれる異なった形状は 3 種類であった.

$$\begin{aligned} e[1] &\rightarrow 0.5105371570959996 \\ e[2] &\rightarrow 0.12691113986236213 \\ e[3] &\rightarrow 0.34327868850767757 \\ e[4] &\rightarrow 0.33323770035195555 \\ e[5] &\rightarrow 0.9360353141820058 \end{aligned}$$

の位相をずらしたものの, 反転させたものが, 重解を含め, 8

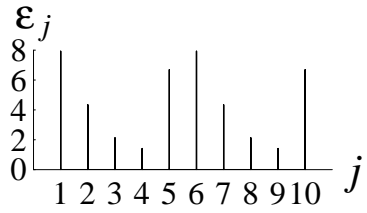
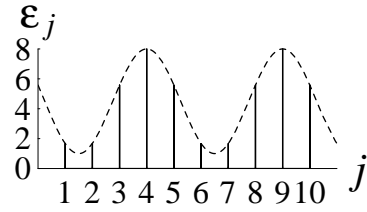
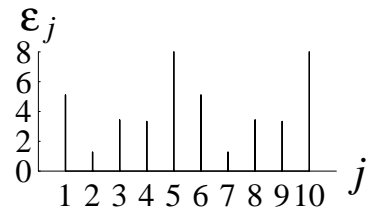


Fig. 3 Plots of $\{\varepsilon_j\}$ derived from the three solutions.

組,

$$\begin{aligned} e[1] &\rightarrow 0.16689153117516606 \\ e[2] &\rightarrow 0.16679656972326043 \\ e[3] &\rightarrow 0.5581559501303253 \\ e[4] &\rightarrow 0.8000000007562085 \\ e[5] &\rightarrow 0.5581559482150402 \end{aligned}$$

の系列の解が 14 組,

$$\begin{aligned} e[1] &\rightarrow 0.7927282394907179 \\ e[2] &\rightarrow 0.4339388184515803 \\ e[3] &\rightarrow 0.21322062396750502 \\ e[4] &\rightarrow 0.14146268551372365 \\ e[5] &\rightarrow 0.6686496325764735 \end{aligned}$$

の系列の解が 18 組である.

これら 3 種の解から与えられる $\{\varepsilon_j\}$ を周期性を考慮し Fig.3 に図示する. これら 3 種の解についてバンド計算をすると, それらは全て, 計算精度内で問題設定で与えたバンド構造と一致した.

ここでは, 式 (1) において, $\varepsilon_{min} = 1, \varepsilon_{max} = 8, p = 1/5$ として, $\varepsilon_j = \varepsilon_a(j)$ のように設定した場合, つまり

$$\begin{aligned} (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5) &= (5.5815594803123165, 1.668440519687684, 1.668440519687684, 5.5815594803123165, 8.) \end{aligned}$$

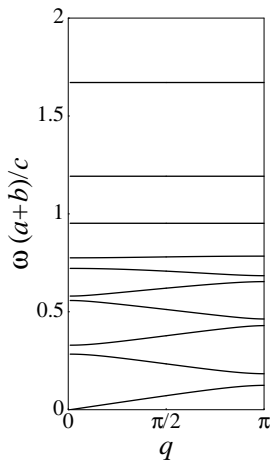


Fig. 4 A sample bandstructure for $n = 10$.

の場合のバンド構造を用いていた。 $\varepsilon_j = 10e[j]$ であるから、2つ目の系列の解が 0.028%以内の誤差で $\varepsilon_j = \varepsilon_a(j-4)$ となっており、これを再現している。また、問題設定で与えたバンド構造はこれ以外に、2種類の形状で実現できることが分る。

しかし、 $\{\varepsilon_j\}$ 全てを未知変数にすると、自由度が大き過ぎ、効率が悪い。実際、この方法では $n=5$ まではノートパソコン (CPU: mobile pentium II 400MHz, メモリ: 64MHz) 上の Mathematica 4.1 for Windows で4分ほどで解けるが、 $n=6$ になると、千葉大学総合メディア基盤センターの SUN enterprise 10000 (64CPU) 上の Mathematica 4.0 for UNIX でも解けない。これは $n!$ 個の自由度 (解) を持つためである。

そこで、構造に制限をかけるために、 $n = \text{偶数}$ として

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{max}, \varepsilon_{n/2} = \varepsilon_{min}, \varepsilon_{n/2-j} = \varepsilon_{n/2+j} \\ (j = 1, 2, \dots, n/2 - 1)$$

なる条件を課す。

$n = 10$ の場合の具体的計算例として、Fig.4 に示すバンド構造を与える $\{\varepsilon_j\}$ を決定する。バンド端の値は

$$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7, \lambda_8, \lambda_9, \lambda_{10}) = \\ (0.015505725179109725, 0.033708981936201046, \\ 0.18454967318096185, 0.21455019452116053, \\ 0.4280458398238361, 0.46827116057809387, \\ 0.6150991567365949, 0.9062035003224886, \\ 1.4217019465412792, 2.7921685041038375)$$

と与えられる。

このとき、未知変数は $e[1], e[2], e[3], e[4]$ で、解くべき連立方程式は

$$\begin{aligned} 7343.09e[1]^2 e[2]^2 e[3]^2 e[4]^2 &= 4 \\ 9 + 20(e[1] + e[2] + e[3] + e[4]) &= 45. \\ 2 + \frac{96}{5}e[1] + 16e[1]^2 + \\ \frac{149}{5}e[2] + 60e[1]e[2] + 24e[2]^2 + \\ \frac{184}{5}e[3] + 80e[1]e[3] + 68e[2]e[3] + \\ 24e[3]^2 + \frac{201}{5}e[4] + 92e[1]e[4] + \\ 80e[2]e[4] + 60e[3]e[4] + 16e[4]^2 &= 151.027 \\ \frac{16}{5}e[1] + \frac{48}{5}e[1]^2 + \\ \frac{24}{5}e[2] + 46e[1]e[2] + \\ 28e[1]^2 e[2] + \frac{114}{5}e[2]^2 + \\ 36e[1]e[2]^2 + \frac{24}{5}e[3] + \\ \frac{312}{5}e[1]e[3] + 48e[1]^2 e[3] + \\ \frac{396}{5}e[2]e[3] + 152e[1]e[2]e[3] + \\ 40e[2]^2 e[3] + \frac{156}{5}e[3]^2 + \\ 64e[1]e[3]^2 + 40e[2]e[3]^2 + \\ \frac{16}{5}e[4] + \frac{342}{5}e[1]e[4] + \\ 60e[1]^2 e[4] + 96e[2]e[4] + \\ 200e[1]e[2]e[4] + 64e[2]^2 e[4] + \\ \frac{454}{5}e[3]e[4] + 200e[1]e[3]e[4] + \\ 152e[2]e[3]e[4] + 36e[3]^2 e[4] + \\ \frac{132}{5}e[4]^2 + 60e[1]e[4]^2 + \\ 48e[2]e[4]^2 + 28e[3]e[4]^2 &= 193.465 \end{aligned}$$

となる。これから求まる解は 4 8 組である。その内、実数の解は

$$\begin{aligned} e[1] &\rightarrow 0.7169300291968179 \\ e[2] &\rightarrow 0.6273723329659947 \\ e[3] &\rightarrow 0.2327987974701756 \\ e[4] &\rightarrow 0.22289884036701196 \end{aligned}$$

と

$$\begin{aligned} e[1] &\rightarrow 0.7331559480217225 \\ e[2] &\rightarrow 0.5581559480487492 \\ e[3] &\rightarrow 0.34184405196325046 \\ e[4] &\rightarrow 0.1668440519662782 \end{aligned}$$

の 2 組である。

この 2 組の解それぞれについて、エネルギーバンドを計算すると、後者の解のエネルギーバンドは問題設定で与えたものに計算精度内で完全に一致した。また、前者の解のエネルギーバンドを Fig.5 に実線で示す。比較のため問題設定で

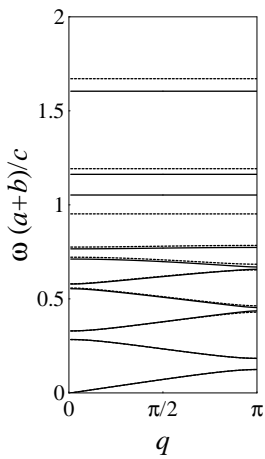


Fig. 5 The bandstructure for the former of the solutions (solid line).

与えたエネルギーバンドを破線で示してある．両者は低エネルギーではよく一致しているが，高エネルギーになるにつれ，ずれが大きくなっている．高エネルギー領域では，第一 Brillouin 域の端においてもずれており，この解の計算精度に問題があることが分かる．この解は，低エネルギーにおけるバンドの一致から，異なるバンド構造を与えるものではなく，計算誤差により，高エネルギー領域におけるバンドがずれたものと考えられる．この計算誤差は未知変数は4個であるが，解く方程式の次数が高くなっているのが原因と考えられる．

この問題設定では， $\varepsilon_{min} = 1$, $\varepsilon_{max} = 8$, $p = 1/10$ に対して， $\varepsilon_j = \varepsilon_a(j)$ のようにした場合，つまり

$$(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4) = (7.3315594803123165, 5.5815594803123165, 3.418440519687684, 1.668440519687684)$$

の場合のバンド構造を用いていた．後者の解は 1.3×10^{-9} %以上の精度でこれを再現している．

4. 結言

エネルギースペクトルから二重周期超格子の構造を決定する逆問題を強束縛近似で取り扱った．

原理的に全てのバンド端の位置を指定することはできないことが分かった．第一 Brillouin 域の端におけるエネルギーバンドの値を指定することにより，各サイトの誘電率を決定する方程式を導出し，Mathematica を用いて実際に解けることを示した．全てのサイトの誘電率を未知変数とした場合，自由度が大きく（大きな n ），本質的に同じ形状を表す解が多重に得られた．また，この多重性が計算規模を大きくし，周期の長い系の取り扱いを困難にしていた．この多重度を避けるために誘電率に条件をつけることで，周期の長い系も取

り扱えるようになった．

本論文では本手法の評価を行うため，二重周期系の順問題の解を用いて逆問題を設定したため，必ず $\{\varepsilon_j\}$ が実数である解が存在した．しかし，実際に必要とする透過，反射スペクトル（バンド構造）から逆問題を設定した場合，実数の解が存在しないこともある．実数解の存在する条件などの研究が必要である．また，本手法においても，より計算精度よく計算するため，より大きな周期（大きな n ）の場合も取り扱えるように，改善する必要がある．

本論文では強束縛近似を用いたが，式 (2) を転送行列法で解く場合でも，バンドを決定する方程式は形式的には式 (15) と同じになる．このとき $\Delta_n(\lambda)$ は一周期分の転送行列のトレースとして定義される．しかし，この方程式は超越方程式となる．この超越方程式の性質を調べる必要もある．

工学的多層膜において，エネルギースペクトルから構造を決定する逆問題では透過（もしくは反射）スペクトルをフーリエ変換する手法が用いられることがある．しかし，この手法では，透過係数，反射係数の位相を無視し，解の多重性が現れない等，数学的基礎に問題がある．また，本論文で扱った例のように非常に幅の狭いバンドが存在する場合の取扱いは難しい．

参考文献

- (1) D. R. Hofstadter : Energy Levels and Wave Functions of Bloch Electrons in Rational and Irrational Magnetic Fields, Phys. Rev. B, **14**(1976), pp. 2239–2249.
- (2) S. Datta : Electronic Transport in Mesoscopic Systems, (1995), Cambridge University Press.
- (3) Ryoko Shimada, Takao Koda, Tsuyoshi Ueta, and Ohtaka : Energy Spectra in Dual-Periodic Multilayer Structures, J. Phys. Soc. Jpn., **67**(1998), pp. 3414–3419.
- (4) 小向哲郎, 山本貴司, 今井健之, 中沢正隆 : ファイバーグレーティングのスペクトルフィルタリングへの応用, 信学論 C-I, **J80-C-I**(1997) pp. 32–40.
- (5) 島田良子 : 低次元周期性を有するフォトニック結晶の構造と光物性, 博士論文 (2000), 日本女子大学.
- (6) I. Gómez, F. Domínguez-Adame, E. Diez and V. Bellani : Electron Transport across a Gaussian Superlattice, J. Appl. Phys., **85**(1999), pp. 3916–3918.
- (7) E. Lidorikis, M. M. Sigalas, E. N. Economou, and C. M. Soukoulis : Tight-Binding Parametrization for Photonic Band Gap Materials, Phys. Rev. Lett., **81**(1998) pp. 1405–1408.
- (8) D. G. Pettifor, and D. L. Weaire ed. : The Recursion Method and Its Applications, (1985), Springer-Verlag.
- (9) S. Wolfram : The Mathematica Book 4th ed., (1999), Cambridge Univ. Press.