

境界要素法を用いた磁場中乱雑形状量子ドットの 統計的伝導特性の解析

BEM ANALYSIS OF STATISTICAL PROPERTIES OF QUANTUM TRANSPORT THROUGH TWO-DIMENSIONAL RANDOM-SHAPED QUANTUM DOTS

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)

In the present paper, we consider randomly deformed circular quantum dots with two waveguides (an emitter and a collector) in magnetic fields. Transport properties through them are investigated by means of the boundary element method. The fraction of the current carried by each propagating mode in the waveguide is calculated for transmission currents when each propagating mode is incident. By taking the statistical average in shape, it is shown that a universal frequency distribution is obtained for a sufficiently random system even though magnetic fields are so strong that electron waves form edge states. Then, the transmission currents are randomly distributed over all propagating modes. On average, each propagating mode carries the same current as in the absence of a magnetic field.

Key Words: Quantum Dots, Electron Transport, Random Shape, Boundary Element Method, Magnetic Fields

1. はじめに

メゾスコピックな系の電子伝導問題では入力導波路（エミッタ）の中に大きな系（リザーバ）からどのような状態の電子波が入射するかが重要となる。古典的ビリヤードモデルでは、無限に大きなリザーバ内に電子が一様に分布し、ランダムに運動しているとして取り扱ってきた。⁽¹⁾しかし、このような系を量子力学的には取り扱えない。

最近、リザーバの特性を調べるための有限の大きさのモデルとして、Fig.1に示すような乱雑に変形した円形量子ドットに2つの導波管（エミッタ、コレクタ）を取り付けた系の統計的な伝導特性が提案され、古典的なビリヤードモデル⁽²⁾および量子論的な境界要素法⁽³⁾を用いて解析された。

ビリヤードモデルでは、形状についての統計平均を取ることにより、透過電流のコレクタ導波路内での角度分布、横方向の空間分布を求め、十分乱雑な系においては、角度分布、空間分布ともに入射モードによらない普遍的な分布となり、それは無限に大きな古典的なリザーバのモデルのそれと一致することが見出された。これらの結果から、このような系は無限に大きなリザーバを有限の大きさでモデル化するものとして、また、量子カオスの対象として注目されている。

量子論的境界要素法を用いた解析では以下のことが示されている。⁽³⁾形状の乱雑さがある程度以上大きくなれば、電子はドットの中で多数回散乱され、拡散的になる。コレクタ内の各伝導モードが運ぶ透過電流の割合 p に対するさまざまな形のドットについての統計的度数分布は入射モードに依存しない、1つの分布関数

$$f(p) = (N-1)(1-p)^{N-2} \quad (1)$$

(N : 伝導モードの数)

に収束する。平均としては各伝導モードは同じ割合で電流を運び、モードの占有率は高モードのものほど高くなっている。また、透過係数の位相がそれらが属するモードや入射モードに関係なく、ランダムであることも確認されている。⁽⁴⁾

本論文ではエミッタとコレクタを持つ乱雑形状量子ドットに磁場がかかっているときの統計的伝導特性を解析する。磁場が強くなり、サイクロトロン半径が小さくなると電子はドットの壁に沿ったエッジ状態を形成する。このようなときには電子波はドットの壁で乱雑に散乱されることはなくなり、散乱による電子波の擾乱が起こらなくなると考えられる。磁場を強くしていった場合の特性の変化に注目する。

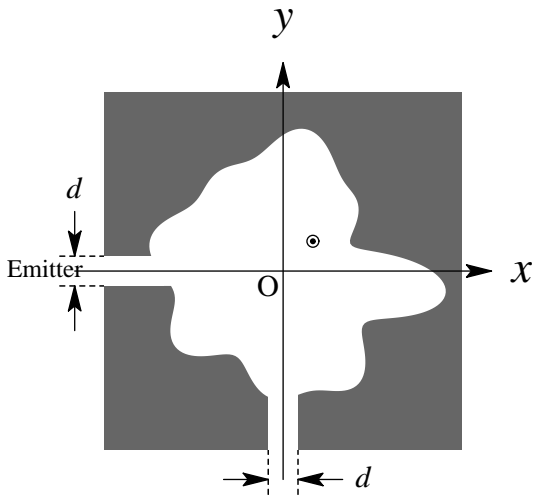


Fig. 1 Example of a rough quantum dot with two waveguides and the definition of the coordinate system.

2. 定式化

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 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (0, Bx, 0)$ とする。

以下では、長さ ℓ_B とエネルギー ε はそれぞれ磁氣的長さ $\ell_B \equiv \sqrt{\hbar/|qB|}$ 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 $K \equiv \sqrt{2\varepsilon}$ 、電荷も含めたベクトルポテンシャル $-q\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (0, -qBx, 0)$ は $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (0, x, 0)$ と表される。ここで、 $q (< 0)$ 、 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 2π で割ったものである。

このとき、磁場中の電子に対するシュレディンガー方程式は

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

と書ける。

これらに共役な方程式

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

を満たすグリーン関数は⁽⁵⁾

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

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⁽⁶⁾ である。

これを用いると、閉境界で囲まれた領域内の波動関数は境

界に沿った線積分を用いて

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

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。

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、

$$c(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \text{p.v.} \oint dS' \left(G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right. \\ \left. + 2i G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) \psi(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{n} \right. \\ \left. - \psi(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)}{\partial n'} \right) \quad (6)$$

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。⁽⁷⁾ 境界が点 \mathbf{r} で滑らかであれば $c(\mathbf{r}) = 1/2$ となる。

section 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。

界面の荒さを取り入れた量子ドットの形状を極座標表示で

$$r(\theta) = r_{\max} + \sum_{n=1}^M a_n \frac{a_{\max}}{2} \cos(n\theta + \pi \delta_n) \quad (7)$$

のように定義する。 r_{\max} は変形前のドットの半径であり、 a_{\max} は変形の強さを表すパラメーターとなる。また、 a_n 、 δ_n は全て独立な $[0:1]$ の範囲の一様乱数である。 M を変えることにより荒れの細かさを制御できる。このように定義されたドットに、Fig.1 に示すように、 x 軸に平行に幅 d のエミッタ、同じ幅のコレクタを y 軸に平行に取りつける。

ドットの外側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 (6) の右辺は第 1 項目のみが残る。ドットの境界は入射波の波長の $1/6$ の長さに離散化し、そこでの境界積分は波動関数の法線方向微分を線形補間することにより計算される。各ノードでの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。さらに、入射モードに関しては、入射モードが変わった場合に依存性があるかどうかのみを問題としているので、本問題の解析にはエミッタ内の磁場中の影響を無視して問題ない（もちろん、磁場中の固有関数を用いた計算も可能である）。このため、量子ドット内のベクトルポテンシャルは $\mathbf{A} = (0, x, 0)$ のように選んでいるので、エミッタの接続境界に沿ってベクトルポテンシャルの連続性が満たされるように、エミッタ内つまり $x < x_{\min}$ の領域では $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (0, x_{\min}, 0)$ とする。

エミッタ内で α 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ベクトルポテンシャルがない場合の解

をゲージ変換して

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(\mathbf{r}) &= e^{-iyx_{\min}} \left(u_\alpha^*(\mathbf{r}) + \sum_\beta r_{\alpha\beta} u_\beta(\mathbf{r}) \right), \\ u_\alpha(\mathbf{r}) &\equiv \exp(-ik_\alpha x) \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right), \\ &(\alpha, \beta = 1, 2, \dots).\end{aligned}\quad (8)$$

と書ける。ただし、 $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ の第 1 項目は入射波であり、必ず伝導モードである。エミッタ部分では反射係数 $r_{\alpha\beta}$ が未知変数である。

透過波については正確に磁場中の固有モードが運ぶ電流を計算する必要があるため、コレクタ部分での波動関数はその中に形成される磁場中の固有関数（エッジ状態） $\chi(\mathbf{r}, \kappa_\lambda)$ を用いて

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\lambda t_{\alpha\lambda} \chi(\mathbf{r}, \kappa_\lambda), \quad (9)$$

のように展開される。固有関数 $\chi(\mathbf{r}, \kappa_\lambda)$ は規格化されているものとする。ここで、エッジ状態は

$$\chi(\mathbf{r}, \kappa) \equiv \exp(i\kappa y) \varphi(x, \kappa), \quad (10)$$

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

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + (\kappa + x)^2 \right] \varphi(x, \kappa) = 2\varepsilon\varphi(x, \kappa) \quad (11)$$

と、コレクタ壁での境界条件 $\varphi(x = \pm d/2, \kappa) = 0$ で決定される固有状態である。このとき、Schult ら⁽⁸⁾ が指摘しているように、 ε が大きいときには実数と純虚数の波数だけではなく、複素数の固有波数が現れることに注意しなければならない。複素固有波数の虚部は純虚数の波数の虚部よりも小さいので、これを展開に取り込み忘れると収束性に重大な影響を与える。固有波数 κ_λ は式 (9) がコレクタ内で外向波を表すように取る。展開係数 $t_{\alpha\lambda}$ が未知変数となる。

式 (6) 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。^(7, 9) 離散化して得られる連立方程式を $\partial\psi_i/\partial n'$, $r_{\alpha\beta}$, $t_{\alpha\lambda}$ について解く。この解を式 (5) に代入すれば、ドット内での波動関数の値が得られる。

エミッタでの反射波の中で第 β モードが担う電流および全反射電流は

$$j_{\alpha\beta}^R = k_\beta |r_{\alpha\beta}|^2 \quad (12)$$

$$j_\alpha^R = \sum_\beta j_{\alpha\beta}^R \quad (13)$$

で与えられ、また、コレクタへの透過波うち、第 λ モードが運ぶ電流および全透過電流は⁽¹⁰⁾

$$j_{\alpha\lambda}^T = |t_{\alpha\lambda}|^2 \int_{-d/2}^{d/2} (\kappa_\lambda + x) |\varphi(x, \kappa_\lambda)|^2 dx \quad (14)$$

$$j_\alpha^T = \sum_\lambda j_{\alpha\lambda}^T \quad (15)$$

で与えられる。

3. 計算結果



Fig. 2 A contour plot of an electron density in a sample dot for $Kd = \sqrt{32}\pi$, $\tilde{B} = 4$ and the fundamental mode incidence.

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 $B_0 \equiv \hbar/|q|d^2$ 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であるという意味がある。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。

ドットの大きさ、乱雑さのパラメーターは $r_{\max}/d = 4.0$, $a_{\max} = 1.0$, $M = 9$ の場合を考える。式 (8) の展開は本論文の計算の範囲で 34 以上のエバネセントモードを含む、40 の固有関数を取る。式 (9) の展開のエッジ状態の項数は数値計算において計算精度内で求まる全てのモードを用いる。本論文の計算範囲内では、10 以上のエバネセントモード（複素固有波数モードも含む）を含み、12 から 20 のモードで展開している。ドットの境界に取ったノードの数は形状、波数、磁場強度により大きく異なる。全波数 $Kd = \sqrt{150}\pi$, $\tilde{B} = 9$ の場合、4000 程度となる。本論文では全波数 $Kd = \sqrt{32}\pi$ の場合の計算結果を示す。

ここでは、コレクタ内の各伝導モードが透過波の電流を運んでいる割合をさまざまな形のドットについて計算し、統計的度数分布を求めた。ドットの形に対する統計処理においては、1000 のサンプルうち確率保存の誤差が 5% 以下のものを選んでいく（誤差 1% 以下のサンプルでも同様の結果であるが、統計性を上げるため 5% 以下とした）。

磁場強度 $\tilde{B} = 4$ の場合の結果を Fig. 2, 3 に示す。この場合、エミッタ、コレクタ内の伝導モードの数は 3 であり、磁場がかかっていない場合と同じである。Fig. 2 の電子密度分布からも分かるように、磁場の影響はそれほど強くなく、電子波はドット内全体に広がり、十分擾乱されていることが分かる。度数分布は、エミッタ内の第 α モードが入射した場合のコレクタ内での伝導モード (λ) の運ぶ電流の割合、すなわち、

$$p_{\alpha\lambda} = j_{\alpha\lambda}^T / j_\alpha^T \quad (16)$$

を横軸とし、その値を持つサンプルの頻度を表している。Fig.3には各入射モード α に対する、コレクタ内の全ての伝導モード λ の分布関数を示してあるが、これらから、磁場中でも磁場がかかっていないとき同様、分布関数は α, λ に依存せず、普遍的な形を持ち、それは磁場がかかっていないときに与えられた関数形、式(1)に完全に一致していることが分かる。

次に、磁場がさらに強い、 $\tilde{B} = 9$ の場合の結果をFig.4, 5に示す。この場合も、コレクタ内の伝導モードの数はまだ3であるが、電子密度分布を見ると、サイクロトロン半径が小さくなり、ドットの中央部に電子波が到達しないようになっていることが分かる。これは、電子波の擾乱に大きな影響を与えるにもかかわらず、度数分布は式(1)に従っていることが分かる。

さらに、磁場を強くした、 $\tilde{B} = 16$ の場合の結果をFig.6, 7に示す。電子密度分布を見ると、サイクロトロン半径がドットの大きさに比べ極めて小さくなり、電子波はドット内でエッジ状態を形成し、壁に沿って伝導していることが分かる。この場合、コレクタ内の伝導モードの数は2となっている(エミッタには磁場がかかっていないので伝導モードの数は変化しない)。このような状況では、乱雑な形による散乱による電子波の擾乱は期待できない。それにもかかわらず、度数分布は伝導モード数 $N = 2$ の場合の式(1)に従っている。

4. 結言

境界要素法を用いて、エミッタ、コレクタを持つ乱雑形状量子ドットの磁場中での統計的伝導特性を解析した。その結果、磁場が強くエッジ状態が形成され、境界散乱による擾乱が期待できない場合においても、電子波は十分攪乱されることが分かった。形状変化により、ドット境界の距離の変化があること、また、境界の湾曲によりエッジ状態間の遷移が起こることが、その要因と考えられる。

本論文には示していないが、波数を変えた場合の結果⁽¹¹⁾を総合すると、十分攪乱された系において、コレクタ内の各伝導モードが担っている透過電流の割合の度数分布関数は磁場がない場合同様、式(1)で与えられる、透過電流は磁場強度、波数に依らず、全ての伝導モードにランダムに分配される、コレクタ内の各伝導モードが運ぶ電流の平均値は等しい。この法則は磁場のあるなしに関わらない非常に普遍的な法則であり、物理学上非常に重要な知見である。

ここで用いた手法では、磁場がかかっていないときと同等、もしくはそれ以上の計算精度が得られており、乱雑系の量子伝導の解析に大きな貢献をすると考えられる。しかし、磁場中の計算では、それ独自の困難も判明した。磁場がかかっていない場合には、波数だけで系の離散化メッシュが決定されるが、磁場中では波長、磁氣的長さ $l_B \equiv \sqrt{\hbar/qB}$ の二つの長さ尺度がある。そのため、磁場の強さ(d)に比例して、メッシュの数を増やすことになる。全波数 $Kd = \sqrt{150}\pi$ 、 $\tilde{B} = 9$ の場合には行列の次元が 5000×5000 ほどになり、1つのパラメータに対して、1000のサンプルの計算を行うのに

2ヶ月を要した。しかし、グリーン関数がサイクロトロン直径程度でガウシアン減衰するので、磁場が強くなれば、有効な値を持つ距離が短くなるので、工夫する余地が十分ある。

参考文献

- (1) 小林俊一：固体物理, (1991), 丸善, pp. 114-119.
- (2) 植田 毅：量子化ビリヤード模型による2次元乱雑形状量子ドットの統計的伝導特性の解析, 電子情報通信学会論文誌 C, **J83-C** (2000), pp. 359-361.
- (3) Tsuyoshi Ueta : Statistical Properties of Quantum Transport through Two-Dimensional Random-shaped Quantum Dots, Electronics and Communications in Japan, Part 2, **83** (2000), pp. 42-48.
- (4) 植田 毅：2次元乱雑形状量子ドットの透過, 反射係数の位相の統計特性, 電子情報通信学会論文誌 C-I, **J82-C-I** (1999), pp. 653-655.
- (5) Tsuyoshi Ueta : Green's Function of a Charged Particle in Magnetic Fields, J. Phys. Soc. Jpn., **61** (1992), pp. 4314-4324.
- (6) M. Abramowitz and I. A. Stegun : Handbook of Mathematical Functions, (1970), Dover Publ.
- (7) C. A. Brebbia : The Boundary Element Method for Engineers, (1978), Pentech Press.
- (8) R. L. Schult, H. W. Wyld and D. G. Ravenhall : Quantum Hall Effect and General Narrow-Wire Circuits, Phys. Rev. B, **41** (1990), pp. 12760-12780.
- (9) Tsuyoshi Ueta : Boundary Element Method for Electron Waves in Uniform Magnetic Fields, Engineering Analysis with Boundary Elements, **17** (1996), pp. 69-74.
- (10) J. J. Sakurai : Modern Quantum Mechanics, (1994), Addison-Wesley Publishing, pp. 130-135.
- (11) 植田 毅：磁場中乱雑形状量子ドットの統計的伝導特性, 日本物理学会 2001年秋季大会, 講演番号：20aYH-4 (2001).

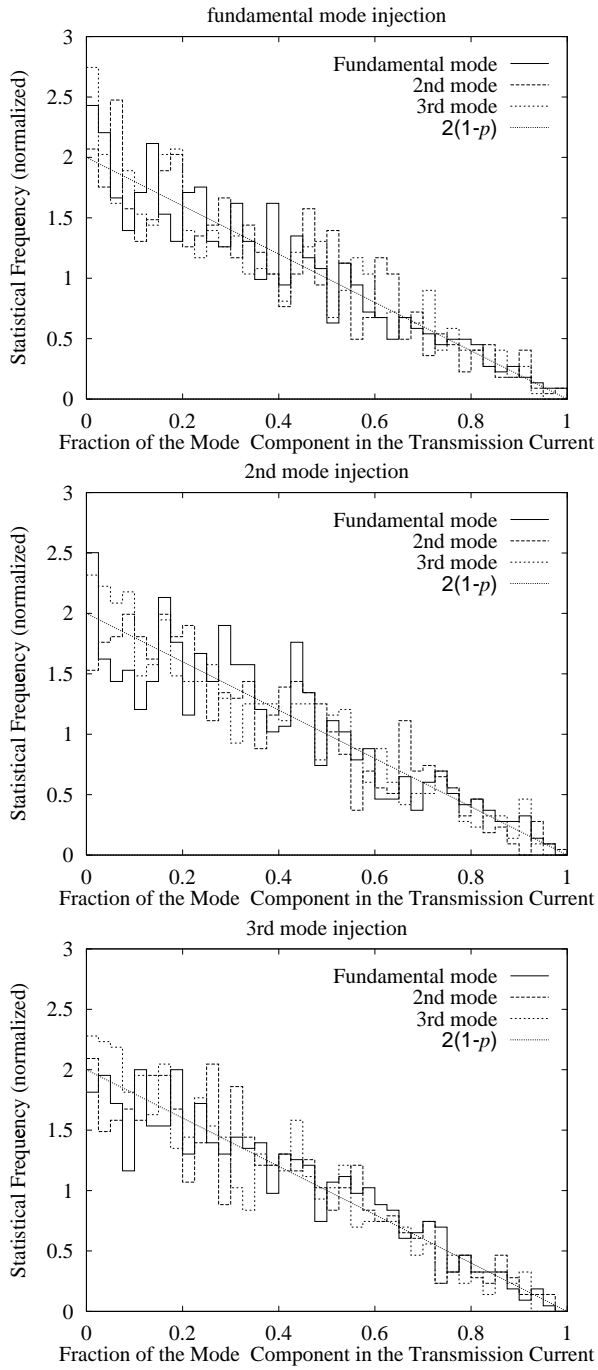


Fig. 3 The frequency distributions for the fraction of the transmission current carried by each propagating mode when each of three propagating modes is incident for $Kd = \sqrt{32\pi}$, $\tilde{B} = 4$.

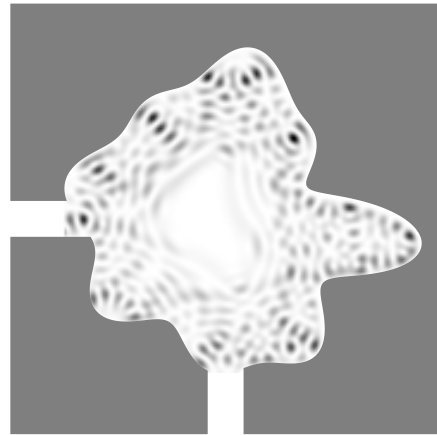


Fig. 4 A contour plot of an electron density in a sample dot for $Kd = \sqrt{32\pi}$, $\tilde{B} = 9$ and the fundamental mode incidence.

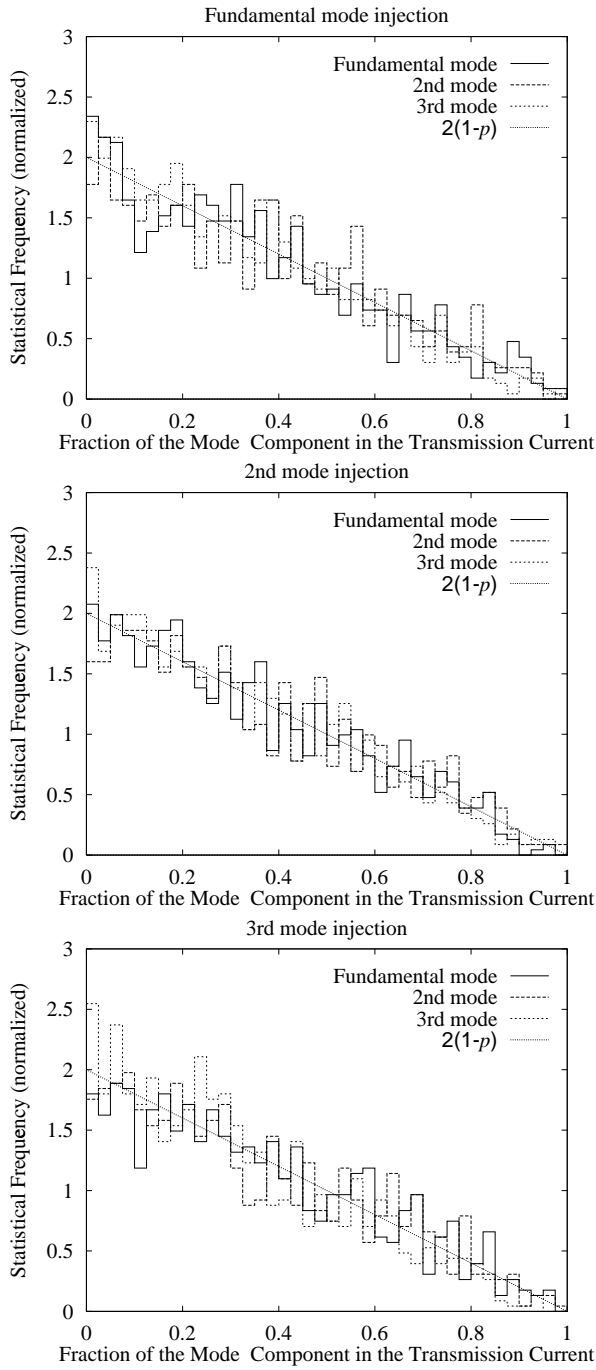


Fig. 5 The frequency distributions for the fraction of the transmission current carried by each propagating mode when each of three propagating modes is incident for $Kd = \sqrt{32\pi}$, $\tilde{B} = 9$.



Fig. 6 A contour plot of an electron density in a sample dot for $Kd = \sqrt{32\pi}$, $\tilde{B} = 16$ and the fundamental mode incidence.

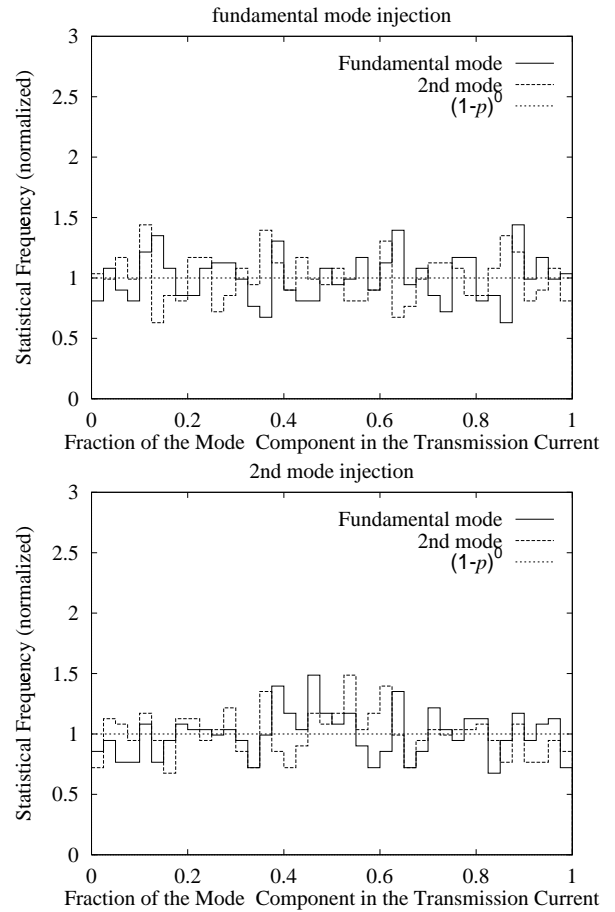


Fig. 7 The frequency distributions for the fraction of the transmission current carried by each propagating mode when each of three propagating modes is incident for $Kd = \sqrt{32\pi}$, $\tilde{B} = 16$.