

点状磁性散乱体が存在する場合の境界要素法

Boundary Element Method for Electron Transport in the presence of pointlike scatterers of magnetization

宮川 悠¹⁾, 植田 毅²⁾

Yuu MIYAGAWA and Tuyoshi UETA

- 1) 千葉大学大学院自然科学研究科 (〒 263-8522 千葉県千葉市稲毛区弥生町 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 千葉県千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail: ueta@faculty.chiba-u.jp)

The boundary element method (BEM) is so extended as to treat two-dimensional electron systems in the presence of magnetic moment islands by two ways. One is for several finite strength and finite size magnetic domains, while the other is for a lots of point-like magnetic moments. At first of all, it is shown that the existence of domain walls qualitatively does not need to be taken into consideration in ballistic transport if we assume an effective width of magnetic domain. This fact makes it easy to analyze the problems by BEM. As examples, the extended methods are applied to a quantum wire with magnetic moment islands. We directly see that magnetic scatterers, even point-like magnetic moments, lead to spin flip, localization and resonance.

Key Words: magnetic substance, boundary element method, electronic spin, magnetic domain wall, pointlike scatterer

1. はじめに

近年、電子デバイスの分野では電荷だけでなく、伝導電子のスピンの状態によりデバイスを制御するスピントロニクスが注目されている。(1) スピンのデバイスへの応用は、強磁性体中での異方性磁気抵抗効果や巨大磁気抵抗効果が発見されて以来、盛んに研究が行われている。また、二次元系における電子のバリスティックな伝導領域への磁区の導入は、かつてアンチドットが引き起こしたように様々な物理現象が期待される。(2) そこで、本研究では境界要素法を使って多数の磁性散乱体がある場合の二次元電子系の解析を行えるように境界要素法を拡張する。最初に、磁壁の影響を一次元系において議論し定性的には磁壁を考慮することなく境界要素法を使ってバリスティックな伝導現象を解析できることを示す。次に、二次元系での任意の形状で任意の強さの磁性散乱体がある場合の定式化と簡単な計算例を示す。その後、多数の点状磁性散乱体がある場合の定式化とそれを用いた、導波路に磁性散乱体が4つある系の透過、反射スペクトル、電子の確率密度の解析を示す。

2. 磁壁の影響

本研究では境界要素法を用いて二次元電子系での磁区の影響を解析することを目的としている。しかし、実際の磁区では磁壁と呼ばれるなだらかに磁気モーメントが変化する領

域が存在する。境界要素法ではこのようななだらかに空間変化するポテンシャル項を含む方程式を扱うのは困難である。そこで、まず、この磁壁がどのような影響を及ぼすかを一次元系において議論する。

電子の輸送は無次元化した Schrödinger 方程式

$$\begin{pmatrix} -\nabla^2 - M_z & M_x - iM_y \\ M_x + iM_y & -\nabla^2 + M_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (1)$$

によって記述される。ここで、 $\mathbf{M}(\mathbf{r}) = (M_x, M_y, M_z)$ は無次元化した磁気モーメントであり、 ε は無次元化した電子のエネルギーである。また、 $\psi_{\uparrow, \downarrow}$ はそれぞれ電子スピンの z 成分がアップ、ダウンの状態の波動関数である。

磁気モーメント \mathbf{M} が空間変化している場合には、磁気モーメントが一定とみなせる領域に分割する。その j 番目の領域において、 $\psi_{\pm}^{(j)}$ を

$$\psi_{\pm}^{(j)} = (M^{(j)} \pm M_z^{(j)})\psi_{\uparrow}^{(j)} \pm (M_x^{(j)} - iM_y^{(j)})\psi_{\downarrow}^{(j)} \quad (2)$$

により定義すると、 $\psi_{\pm}^{(j)}$ はそれぞれ Helmholtz 方程式

$$-\nabla^2 \psi_{\pm}^{(j)} = (\varepsilon \pm M^{(j)})\psi_{\pm}^{(j)} \quad (3)$$

に従う。ただし、 $M^{(j)} = |\mathbf{M}^{(j)}|$ である。式 (3) を用いれば、 $\psi_{\pm}^{(j)}$ に対して通常のパテンシャル問題のように解くことがで

きる。 $\psi_{\pm}^{(j)}$ がわかれば $\psi_{\uparrow}^{(j)}$, $\psi_{\downarrow}^{(j)}$ は逆変換

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{(j)} \\ \psi_{\downarrow}^{(j)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2M^{(j)}} \begin{pmatrix} \psi_{+}^{(j)} + \psi_{-}^{(j)} \\ \frac{M_x^{(j)} - M_y^{(j)}}{M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}} \psi_{+}^{(j)} - \frac{M_x^{(j)} + M_y^{(j)}}{M_x^{(j)} - iM_y^{(j)}} \psi_{-}^{(j)} \end{pmatrix} \quad (4)$$

により求めることができる。

ここで、これらの式を用いて一次元系で磁壁の影響を議論する。磁区の磁気モーメントを $M = (0, M_y, 0)$ とし、 M_y を

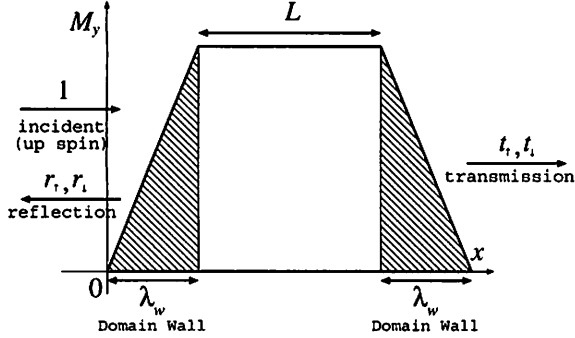


Fig. 1 A schematic picture of the magnetic domain of width L with domain wall of width λ_w .

Fig.1のように幅 L の磁区の両端に λ_w の磁壁がある場合を考える。 x 軸正の向きに振幅 1 でアップスピンの電子波が入射し、アップスピン、ダウンスピンそれぞれ振幅 $r_{\uparrow, \downarrow}$ で反射され、振幅 $t_{\uparrow, \downarrow}$ で透過するものとする。磁区を短冊状に分割し、式 (4) に対して転送行列法を用いて反射確率 $R_{\uparrow, \downarrow} = |r_{\uparrow, \downarrow}|^2$ と透過確率 $T_{\uparrow, \downarrow} = |t_{\uparrow, \downarrow}|^2$ を求めた。Fig.2 は磁壁がないと

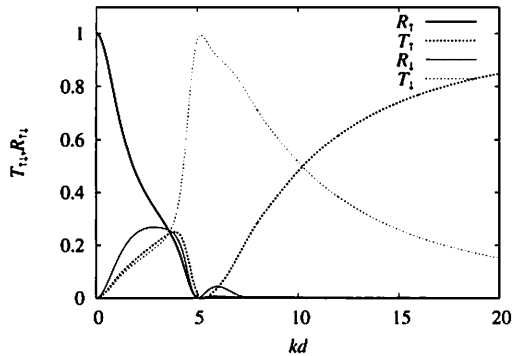


Fig. 2 Transmission and reflection spectra of up and down spins for $\lambda_w = 0$ and $L = 1$.

き、つまり、 $\lambda_w = 0$ の場合の各スピン状態の透過、反射スペクトルである。磁性散乱体によりアップスピンだけではなくダウンスピンでも反射、透過していることがわかる。次に、Fig.3 は Fig.2 の両端に幅 $\lambda_w = 1/2$ の磁壁をつけた場合である。Fig.3 と Fig.2 はかなり異なっており、磁区の両側に磁壁がある場合にはその影響によりスペクトルが変わってしまうことがわかる。そこで、磁区の幅を $L = 3/4$ としたのが Fig.4 である。Fig.4 は磁壁がない Fig.2 にかかなり近い。これは逆に言えば、磁壁がない場合でも、有効な磁区幅を考えれば

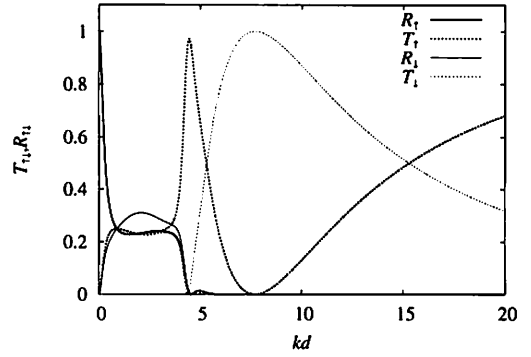


Fig. 3 Transmission and reflection spectra of up and down spins for $\lambda_w = 1/2$ and $L = 1$.

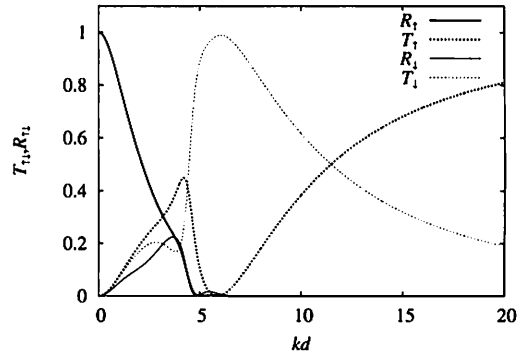


Fig. 4 Transmission and reflection spectra of up and down spins for $\lambda_w = 3/8$ and $L = 3/4$.

ば磁壁があるときと同じようなスペクトルが得られると言うことである。したがって、二次元系での磁性散乱体の影響は磁壁を考慮しなくても定性的には議論できる。

3. 任意の形状、有限強度の磁性散乱体が存在する場合の境界要素法

式 (3) に共役な Green 関数 $G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (= G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \epsilon \pm M^{(j)}))$ を用いて閉境界内の ψ_{\pm} を境界積分表示できる。式 (1) より $\psi_{\uparrow, \downarrow}$ は全領域で連続であるが、式 (4) により $M^{(j)}$ に依存する重みがかかるため、 ψ_{\pm} は連続ではない。自己無撞着な積分方程式を得るには、 $\psi_{\uparrow, \downarrow}$ を境界積分表示の方がよい。式 (2), (3), (4) および共役な Green 関数を用いて $\psi_{\uparrow, \downarrow}$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow, \downarrow} = & \frac{1}{2M^{(j)}} \sum_{s=\pm} \oint \left\{ (M^{(j)} \pm sM_x^{(j)}) \left[G_s^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi_{\uparrow, \downarrow}^{(j)}(\mathbf{r}') \right. \right. \\ & \left. \left. - \psi_{\uparrow, \downarrow}^{(j)}(\mathbf{r}') \nabla' G_s^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right] \right. \\ & \left. + s(M_x^{(j)} \mp iM_y^{(j)}) \left[G_s^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi_{\downarrow, \uparrow}^{(j)}(\mathbf{r}') \right. \right. \\ & \left. \left. - \psi_{\downarrow, \uparrow}^{(j)}(\mathbf{r}') \nabla' G_s^{(j)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right] \right\} \cdot n dS' \quad (5) \end{aligned}$$

と書ける。ただし、2, 4 行目の複号は ψ_{\uparrow} に対して $-$ をとり、 ψ_{\downarrow} に対して $+$ をとる。 \mathbf{n} は境界に対して外向きの単位法線ベクトルである。この積分表現から通常の方法に沿って、内

部に任意の形状で任意の強さの磁性散乱体がある場合の境界要素法が定式化できる。

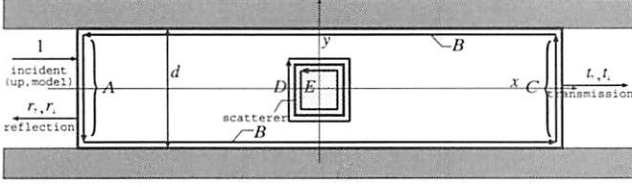


Fig. 5 A quantum wire of width d with a rectangular magnetic domain.

Fig.5 に示す幅 d の量子細線中に正方形の磁性散乱体があるモデルを考える。⁽³⁾ 境界の開口部 A と C では波動関数は導波路の固有関数で展開でき、また、B では無限に高いポテンシャルの壁があることを想定しているので波動関数は 0 になる。まとめると第 α 番目のモードが入射する場合に

$$\begin{aligned} A: \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &= \sin\left(\frac{\alpha\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(ik_{\alpha}x) \\ &+ \sum_{\beta} r_{\uparrow\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(-ik_{\beta}x) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) &= \sum_{\beta} r_{\downarrow\alpha\beta} \sin\left(\frac{\beta\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(-ik_{\beta}x) \\ B: \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}) &= 0 \\ C: \psi_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{r}) &= \sum_{\gamma} t_{\uparrow,\downarrow\alpha\gamma} \sin\left(\frac{\gamma\pi}{d}\left(y + \frac{d}{2}\right)\right) \exp(ik_{\gamma}x) \quad (6) \\ (\alpha, \beta, \gamma &= 1, 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

となる。未知変数は A では反射係数 $r_{\uparrow,\downarrow\alpha\beta}$, B では法線方向の波動関数の微係数 $\partial\psi/\partial n$, C では透過係数 $t_{\uparrow,\downarrow\alpha\gamma}$ となる。また、境界 D と E 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 (D 上) 式と内側に向いた式 (E 上) の両方が立てられるので求めることができる。アップスピンとダウンスピン両方の式を連立して解くことにより、全ての未知数を求めることができる。Fig.6 は電子の確率密度 $|\psi|^2$ を表している。このとき、スピンを $s = \uparrow, \downarrow$ で表すと、反射率 R_s , 透過率 T_s は

$$R_s = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |r_{s,\alpha\beta}|^2, \quad T_s = \sum_{\beta} \frac{k_{\beta}}{k_{\alpha}} |t_{s,\alpha\beta}|^2 \quad (7)$$

と書くことができる。この図よりアップスピンで入射した電子が磁性散乱体により散乱され、いくらかダウンスピンで反射もしくは透過している様子がよくわかる。しかし、この方法は散乱体の境界上で多くの要素をとる必要があり、計算時間がかかる。そこで、点状磁性散乱体が多数含む系を取り扱える方法を考える。

4. 多数の点状磁性散乱体がある場合の境界要素法の定式化

説明の便宜上、まず、散乱体が磁性体ではなく、ポテンシャルである場合を考え⁽⁵⁾、その後、磁性の場合に拡張する。系にポテンシャルが含まれる場合、波動関数の積分表現にはポ

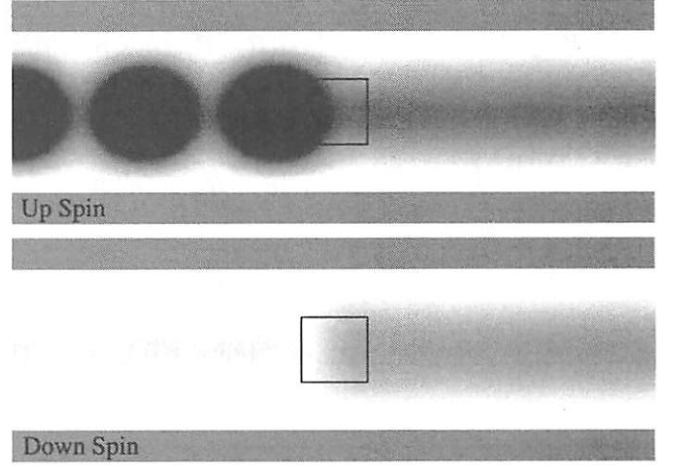


Fig. 6 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ in the configuration of Fig.5 for $kd = 5$ and $M = (0, 20, 0)$. Above figure is for up spin, below down spin. The square at the center indicates the region of the magnetic domain. The transmission and reflection probabilities are $R_{\uparrow} \approx 0.08$, $T_{\uparrow} \approx 0.47$, $R_{\downarrow} \approx 0.11$ and $T_{\downarrow} \approx 0.34$.

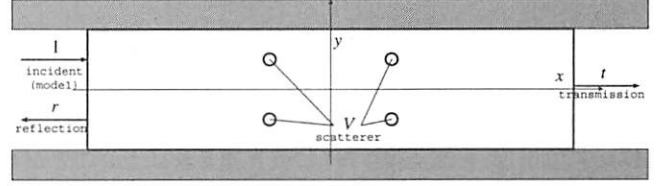


Fig. 7 A model of a quantum wire of width d with point-like scatterers.

テンシャルの体積積分の項が加わり

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \oint [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla'(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') - \psi(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot n dS' \\ &- \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') dr' \quad (8) \end{aligned}$$

となる。

1つの散乱体を半径 a , 高さ $V(\mathbf{R})$ の円柱状のポテンシャルによりモデル化すると、 N_s 個の散乱体が存在する場合の全ポテンシャルは

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N_s} V(\mathbf{R}_n) a^2 \frac{1}{\pi a^2} \theta(a - |\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|) \quad (9)$$

と書ける。ここで、 \mathbf{R}_n は n 番目の散乱体の中心の位置、 $\theta(x)$ はステップ関数である。この円柱状のポテンシャルを体積 $V a^2$ を一定に保ったままで、 $a \rightarrow 0$ の極限をとると、 $(1/\pi a^2) \theta(a - |\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|)$ は Dirac のデルタ関数 $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ となる。このとき、式 (8) の右辺第二項は

$$\int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') dr' \approx \sum_n G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) V(\mathbf{R}_n) a^2 \psi(\mathbf{R}_n) \quad (10)$$

と計算できる。しかし、右辺の和の中の $G(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n)$ について、 \mathbf{r} が \mathbf{R}_m になったとき、つまり $G(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_m)$ が Green 関数の特異性により発散してしまう。したがって、 \mathbf{r} が \mathbf{R}_m になるときは、式 (8) の右辺第二項の体積積分

$$\frac{1}{\pi a^2} \int G(\mathbf{R}_m, \mathbf{r}') \theta(a - |\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m|) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

をより正確に評価しなくてはならない。

この系の Green 関数は 0 次第 1 種 Hankel 関数を用いて

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k^2) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (11)$$

と与えられる。 a が十分に小さいことを考慮すると Hankel 関数は

$$H_0^{(1)}(z) \approx 1 + i \frac{2}{\pi} (\ln(z) + \gamma - \ln(2)) \quad (12)$$

と近似できる。(4) ここで、 γ は Euler 定数である。式 (8) の右辺第二項の体積積分において、 $\psi(\mathbf{r}')$ は散乱体のポテンシャルが有限な値を持つ範囲では余り変化しないと考えられるので、 $\psi(\mathbf{r}') \approx \psi(\mathbf{R}_m)$ として $\psi(\mathbf{r}')$ を積分の外に出し、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi a^2} \int G(\mathbf{R}_m, \mathbf{r}') \theta(a - |\mathbf{r}' - \mathbf{R}_m|) \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ & \sim -\frac{1}{4\pi} \left(2 \ln \frac{ka}{2} + 2\gamma - 1 - i\pi \right) \psi(\mathbf{R}_m) \end{aligned} \quad (13)$$

と評価できる。したがって、 \mathbf{r} が \mathbf{R}_m となるときは、 $G(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_m)$ を $-\frac{1}{4\pi} (2 \ln \frac{ka}{2} + 2\gamma - 1 - i\pi)$ に置き換えればよいことがわかる。

さて、磁性散乱体の場合を考えよう。式 (1) は

$$\begin{aligned} -\nabla'^2 \psi_{\uparrow} - (M_x - iM_y) \psi_{\downarrow} &= (k^2 + M_z) \psi_{\uparrow} \\ -\nabla'^2 \psi_{\downarrow} - (M_x + iM_y) \psi_{\uparrow} &= (k^2 - M_z) \psi_{\downarrow} \end{aligned} \quad (14)$$

となる。各々の方程式に共役な Green 関数 $G_{\uparrow, \downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (= G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k^2 \pm M_z))$ を用いて、 $\psi_{\uparrow, \downarrow}$ の積分表現

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &= \oint [G_{\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') - \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \nabla' G_{\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{n} dS' \\ &\quad - \int G_{\uparrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (-M_x(\mathbf{r}') + iM_y(\mathbf{r}')) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) &= \oint [G_{\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') - \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \nabla' G_{\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] \cdot \mathbf{n} dS' \\ &\quad - \int G_{\downarrow}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (-M_x(\mathbf{r}') - iM_y(\mathbf{r}')) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (15)$$

を得る。あとはポテンシャルの場合と同様の手順で近似し、アップスピンとダウンスピン両方が含まれた連立方程式を解けばよい。

5. 点状磁性散乱体の計算結果

Fig.7 のように 4 つのポテンシャルがある場合について計算を行った。この計算法は近似計算であるにも拘わらず、確率保存の誤差が 1% 以下に収まっており、高い計算精度を示している。これは、以降の点状磁性体のモデルの全ての計算においても同様である。Fig.8 は $a = 0.05$, $Va^2 = 1.75$ の場

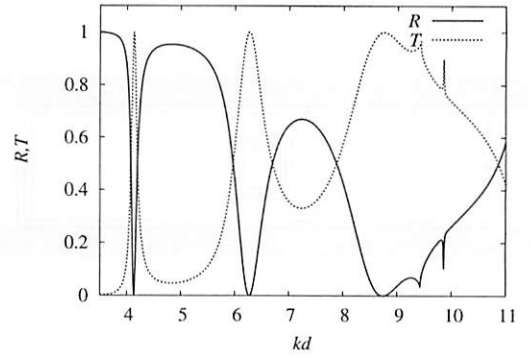


Fig. 8 The reflection and transmission spectra with four point-like scatterers of $a = 0.05$ and $Va^2 = 1.75$.

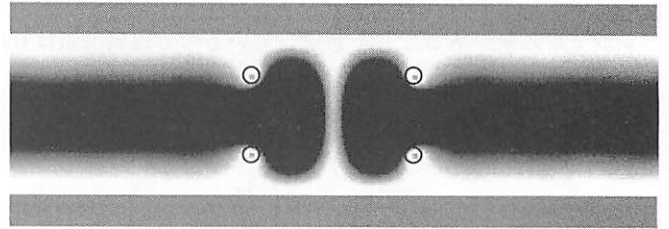


Fig. 9 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ for $kd = 6.27$. The four circles denotes the scattering areas.

合の透過、反射スペクトルである。共鳴トンネル現象にみられるようないくつかのピークが見られる。Fig.9 は、Fig.8 において透過率 T が二番目のピークとなっている $kd = 6.27$ における電子の確率密度 $|\psi|^2$ である。電子波は散乱体に囲まれた領域に局在しており、中央部に節が見られる。これは、明らかに、Fig.8 の大規模構造は x 方向のモードに対応した共鳴ピークであることを示している。次に、 T が小さなピー

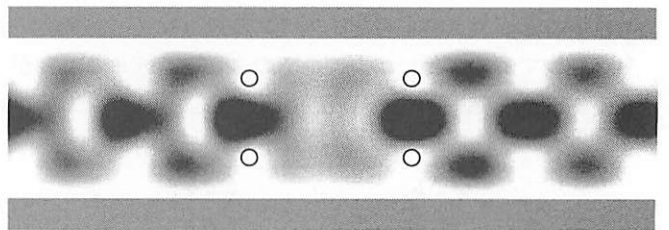


Fig. 10 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ for $kd = 9.42$.

クを示す $kd = 9.42$ における電子の確率密度を Fig.10 に示す。この図から y 方向にも散乱体の間にモードがたち、それが入射波と共鳴することにより、透過率がピークを示すと考えられる。Fig.11 に $a = 0.05$, $Ma^2 = (0, 1.75, 0)$ である磁性散乱体の場合の透過、反射スペクトルを示す。 R_{\downarrow} と T_{\downarrow} が常にほぼ 0 になっているので、Fig.11 での T_{\uparrow} と R_{\uparrow} は Fig.8 における T , R とほとんど同じになっている。つまり、この場合、意外なことにアップスピン状態とダウンスピン状態とのカップリングが全くない。それは、式 (15) において、 $\psi_{\uparrow, \downarrow}$ は自己無撞着に決定されるので、 M_y がかなり大きな値をと

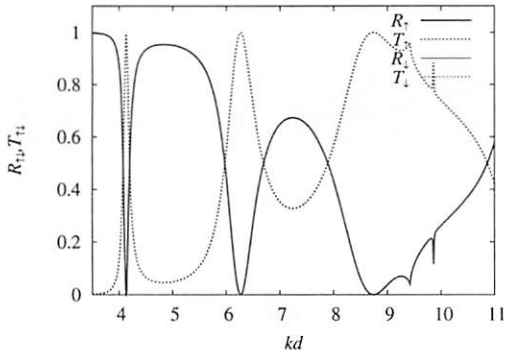


Fig.11 The reflection and transmission spectra of the quantum wire with four point-like magnetic scatterers of $a = 0.05$ and $Ma^2 = (0, 1.75, 0)$. Both R_{\downarrow} and T_{\downarrow} almost vanish over the whole of kd .

ると、 ψ_{\downarrow} が小さい値でなければならないからである。このように強い磁性散乱体があるときは電子は中に入り込めず、スピン反転がなく、ポテンシャルの時と全く同じように振る舞うのである。Fig.12 に $a = 0.05$, $Ma^2 = (0, 0.01, 0)$ の場

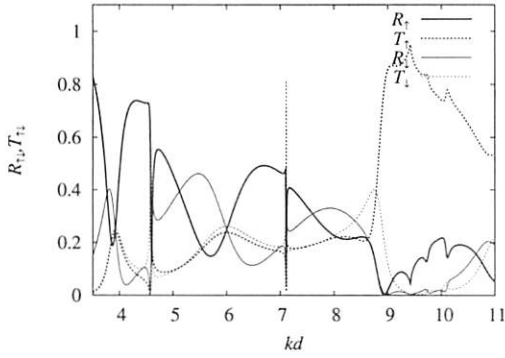


Fig.12 The reflection and transmission spectra of the quantum wire with four point-like magnetic scatterers of $a = 0.05$ and $Ma^2 = (0, 0.01, 0)$.

合の透過、反射スペクトルを示す。このスペクトルは R_{\downarrow} と T_{\downarrow} とが 0 になっておらず、複雑に変化して、アップスピンとダウンスピンとのカップリングがあることがわかる。Fig.12 において特徴的ないくつかの点で確率密度 $|\psi|^2$ を計算した。Fig.13, 14, 15 はそれぞれ $kd = 4.6$, 7.11, 9.42 の時の確率密度である。

Fig.13 は $kd = 4.6$ の時で、 R_{\uparrow} が鋭いディップとなっている点である。両方のスピン状態において 4 つの散乱体の間で強く局在している様子が分かる。電子は散乱体間で行ったり来たりするため、他方のスピン状態への遷移が頻繁に起こる。散乱体上でも電子の確率密度は高く、散乱体にぶつかることによりスピン反転が起こることがわかる。

Fig.14 は $kd = 7.11$ の時で、 T_{\downarrow} が急激なピークになっている点である。ダウンスピンでの透過確率が 80%以上になっており、アップスピンで入射したほとんどの電子がダウンスピ

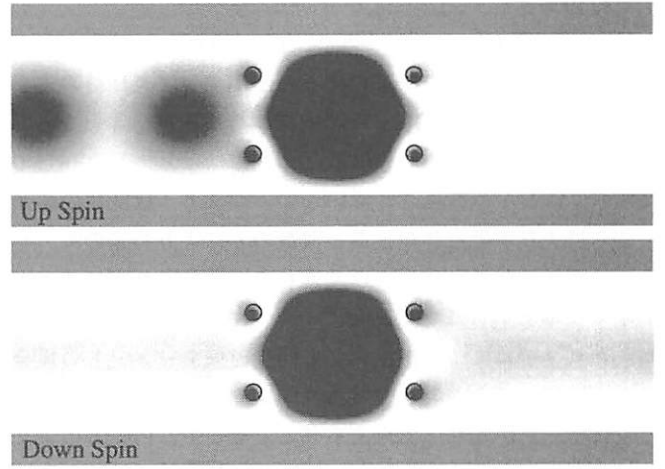


Fig. 13 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ for $kd = 4.6$, where $R_{\uparrow} \approx 0.12$, $T_{\uparrow} \approx 0.15$, $R_{\downarrow} \approx 0.30$ and $T_{\downarrow} \approx 0.43$.

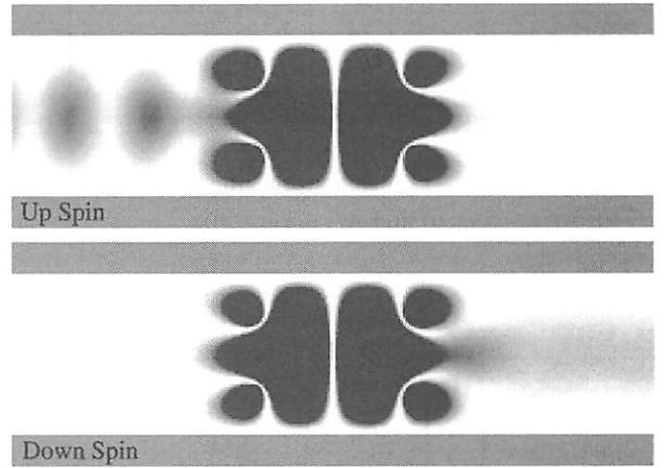


Fig. 14 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ for $kd = 7.11$, where $R_{\uparrow} \approx 0.14$, $T_{\uparrow} \approx 0.01$, $R_{\downarrow} \approx 0.03$ and $T_{\downarrow} \approx 0.82$.

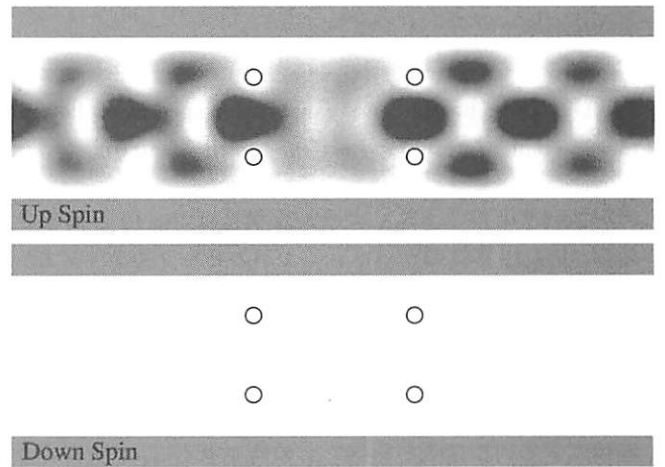


Fig. 15 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ for $kd = 9.42$, where $R_{\uparrow} \approx 0.05$, $T_{\uparrow} \approx 0.95$, $R_{\downarrow} \approx 0.00$ and $T_{\downarrow} \approx 0.00$.

ンで透過している。Fig.13 と同様に電子は散乱体間に強く局在している。また、散乱体上にも強く局在し、そこでスピン

状態が共鳴していることが分かる。

Fig.15は $kd = 9.42$ の時、 T_{\uparrow} が緩やかなピークを示す点である。入射した電子のほとんどがアップスピンのままで透過している、Fig.10とほぼ同様の確率密度分布となっている。ここで注意したいのは散乱体上にはほとんど存在しておらず、ほとんど散乱されていない。つまり、散乱体の種類や強さによらず散乱体の位置と波数のみにより特定のモードが電子波は散乱体をよけて進むので散乱されずに透過率が高くなるということである。

これまでは4つの散乱体とも同じ磁気モーメントの場合のみを計算してきた。その対称性により共鳴が起き、スペクトルにピークが現れると考えられる。そこで、Fig.16のように磁気モーメント(大きさ m)の向きを変えて対称性を壊した場合を調べた。Fig.17は $a = 0.05$, $ma^2 = 0.01$ の時の透過、

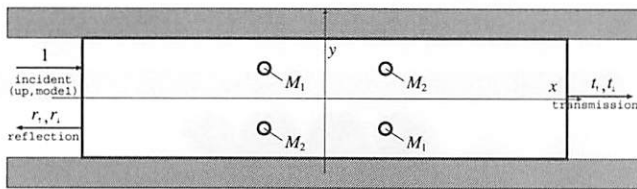


Fig. 16 Asymmetric configuration of magnetic scatterers with $M_1 = (0, m, 0)$ and $M_2 = (m, 0, 0)$.

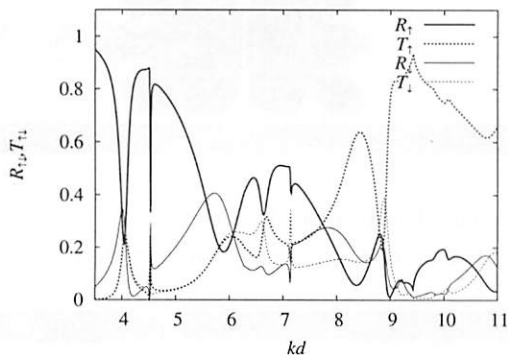


Fig. 17 The reflection and transmission spectra of the asymmetric configuration for $a = 0.05$ and $ma^2 = 0.01$.

反射スペクトルである。大まかな構造はFig.12と同じであるが、Fig.12にはなかったいくつかのピークやディップが現れている。また、Fig.12と比べてピークやディップが少しなだらかになっている。Fig.18は $kd = 8.37$ の時の電子密度である。 $kd = 8.37$ はFig.12ではみられなかった谷が R_{\uparrow} に現れている点である。新たな共鳴状態が生じたことにより、散乱体が全て同じ磁気モーメントの時よりも T_{\uparrow} が大きくなっている様子が分かる。

6. まとめ

本研究において、境界要素法を多数の磁性散乱体が含まれる系も扱えるように二つの方法で拡張した。一つは任意の形で任意の強さの磁性散乱体を含む系、もう一つは点状の磁性

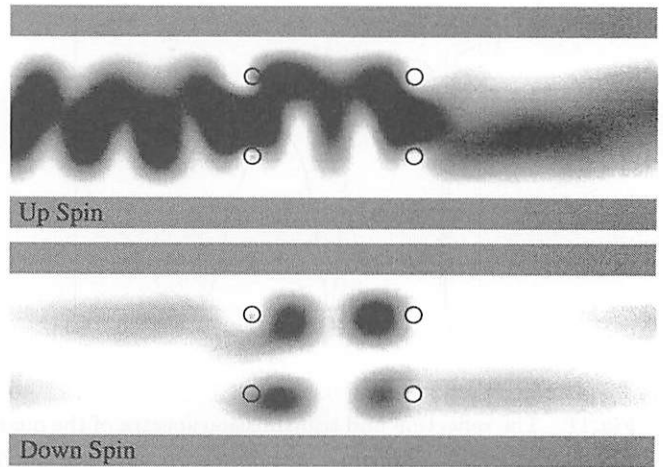


Fig. 18 The density plot of $|\psi(\mathbf{r})|^2$ for $kd = 8.37$ where $R_{\uparrow} \approx 0.05$, $T_{\uparrow} \approx 0.63$, $R_{\downarrow} \approx 0.17$ and $T_{\downarrow} \approx 0.15$.

散乱体の系を取り扱える手法である。実際にいくつかの計算例も示し、ここで拡張した方法がこのような系の解析に有効であることを示した。特に、磁性散乱体の磁気モーメントが強いときは、意外なことに、電子はスピン反転せず、ほぼポテンシャルの時と同様に振る舞うこと、また、磁気モーメントが弱いときには、磁性散乱体部分でスピン反転が起こることを確認した。本手法を多数の磁性散乱体を含む様々な形、配置の系へ適用することにより新たな現象が発見できると期待される。

参考文献

- (1) J. F. Song, Y. Ochiai, J. P. Bird: Fano resonances in open quantum dots and their application as spin filters, Applied Physics Letters Vol.82 No.25, 2003, pp.4561-4563
- (2) H. Imamura, N. Kobayashi, S. Takahashi, S. Maekawa: Conductance Quantization and Magnetoresistance in Magnetic Point Contacts, Phys. Rev. Lett. Vol.84 No.5, 2000, pp.1003-1006
- (3) Tsuyoshi Ueta: Quantum-Mechanical Analysis of Scattering of an Electron Beam in Magnetic Fields by a Finite Height Potential by means of BEM, Electronics and Communications in Japan, Part II, Vol. 85, No.3, 2002, pp.1-8.
- (4) M. Abramowitz and Irene A. Stegun: Handbook of Mathematical Functions, (Dover, New York, 1972), pp-358-360.
- (5) Tsuyoshi Ueta: Boundary Element Method for Electron Transport in the presence of pointlike scatterers in magnetic fields, Phys. Rev. B, Vol. 60, no.11, (1999) pp.8213-8217.