

2001年度卒業論文

メソスコピック系における伝導体の
コンダクタンスの計算

笹田 啓太
羽田野 研究室

青山学院大学 理工学部
物理学科 卒業論文

メソスコピック系における伝導体の
コンダクタンスの計算

笹田啓太 著

メソスコピック系における伝導体の コンダクタンスの計算

笹田啓太
羽田野研究室

2002年2月20日

概要

メソスコピックな伝導体のコンダクタンスは、伝導電子の共鳴状態の影響を強く受ける。本研究では、共鳴状態を持つハミルトニアンが非エルミートであることを指摘しつつ、このハミルトニアンに虚数ベクトルポテンシャルを導入して、コンダクタンスを計算することを目的とする。

第一に、伝導体と導線が接続されている場合には、全系のハミルトニアンはエルミートであるが、伝導体のみでは電子の出入りのある開いた系となるため、ハミルトニアンは非エルミートになり、複素エネルギー固有値を持つことを示す。

第二に、共鳴状態の波動関数は遠方で発散し、有限サイズの数値計算では扱う事が出来ない。そこで、ハミルトニアンに虚数ベクトルポテンシャルを導入して、波動関数を強制的に遠方で収束させ、共鳴状態の固有値を算出する。

最後に、算出した固有値を用いて伝導体で散乱される電子のグリーン関数を求め、ランダウアー公式からコンダクタンスを計算する。また、伝導体内の別の電子との相互作用も考慮したコンダクタンスのシフトも明らかにする。

目次

1	メソスコピック系とは...	3
2	共鳴散乱現象	4
2.1	共鳴散乱の時間的性質	5
2.2	共鳴散乱の空間的性質	6
3	非エルミートなハミルトニアン	8
3.1	虚数ベクトルポテンシャルの導入	8
3.2	ゲージ変換	8
4	共鳴散乱状態の固有値の算出	10
4.1	虚数ベクトルポテンシャルによる発散-収束転移	10
4.2	Tight-Binding Model	12
4.3	g_0 による固有値分布の移動	15
5	メソスコピックな伝導体のコンダクタンスの算出	16
5.1	Landauer 公式	17
5.2	Green 関数の利用	17
5.3	コンダクタンスの結果	18
6	まとめ	19
7	謝辞	20
A	共鳴散乱の固有値の算出	22

1 メソスコピック系とは...

近年、メソスコピックな系を扱える技術、ナノテクノロジーが発達して注目を集めている。典型的な実験の例として、2種類の半導体 GaAs-AlGaAs のヘテロ接合によってできた2次元電子ガス上に、微細加工を施して作られたデバイスが知られている [1]。この実験では、伝導体の縦の長さを L 、横幅を W 、この伝導体を流れる伝導電子の平均自由行程を l_e とすると、 $l_e \gg L, W$ といった関係が成り立っている。この状況での伝導はバリスティック伝導と呼ばれている。

このようなスケールの物性には、マクロスコピックな系では現れなかった量子的効果が大きく影響を及ぼす。このように統計力学の扱うマクロスコピック系でもなく、量子力学の扱うミクロスコピック系でもないその中間のスケールをメソスコピックな系と呼ぶ。

本研究の目的は、非エルミートなハミルトニアンを導入する新しい方法を用いてメソスコピックな系における伝導体のコンダクタンスを計算することである。

本論文の構成は、大まかに次のようになる。2章では、メソスコピック系のコンダクタンスに大きな影響を与えている共鳴散乱現象の特異な性質について説明する。3章では、その共鳴散乱を扱うために非エルミートなハミルトニアンを導入することを提案し、その利用方法を紹介する。4章では、実際に非エルミートなハミルトニアンを使って共鳴散乱の固有値を算出する。最後に、5章では算出した共鳴散乱の固有値を使って Landauer 公式からメソスコピック系でのコンダクタンスを求める。

2 共鳴散乱現象

メソスコピックな系における伝導体のコンダクタンスには、共鳴散乱現象と呼ばれる量子的な現象が大きく作用している。

メソスコピックな伝導体内にある図1の様なポテンシャルに伝導電子を入射すると考える。当然、伝導電子はポテンシャル内に入り込む。正のエネルギーを持つこの電子は、ポテンシャルの折れ目である位置 $x = -\frac{d}{2}$ と $x = \frac{d}{2}$ で反射する。また同時に一部の波動は、ポテンシャルの外へ浸み出ていることになる。このような反射が起こる理由は、ポテンシャル内外で波動関数の波数が急変するためである。

ポテンシャルの壁で反射された電子は再び壁に当たりポテンシャルの外に出ようとする。こうして、ポテンシャルの内部で反射を繰り返す『共鳴』が起こる。つまり、伝導電子がポテンシャル内に一時的に閉じ込められる。但し、閉じ込められるとは言っても負のエネルギー固有値をもつ束縛状態とは異なり、十分時間が経過すると、伝導電子はポテンシャルから遠方に散乱される。これを『共鳴散乱現象』と呼ぶ [2]。この共鳴散乱は、通常のポテンシャル散乱とは違って、共鳴状態の寿命 τ と呼ばれる系の内部に留まる滞在時間がある。そこで、共鳴散乱現象の時間的、空間的性質を以下に説明する。

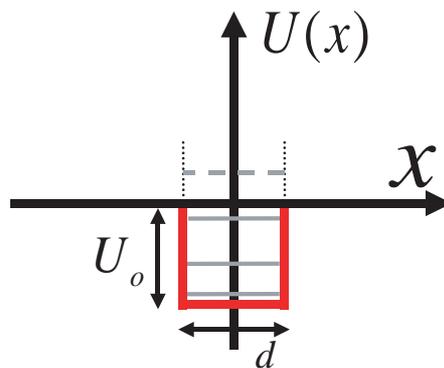


図 1: 井戸型ポテンシャル。薄線は束縛されたエネルギー準位で、破線は共鳴散乱のエネルギー準位を示す。

2.1 共鳴散乱の時間的性質

共鳴散乱状態の固有値は

$$E_n = \varepsilon_n - i\frac{\Gamma_n}{2} \quad (\text{但し } \varepsilon_n, \Gamma_n, > 0) \quad (1)$$

と複素数で表される事が古くから知られている。通常、複素数の固有値は考えにくいだが、物理的意味を考えると次のようなことが分かる。まず、時間に依存したシュレディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = H\Psi(x,t) \quad (2)$$

で与えられる。これを空間と時間の関数に変数分離する。ここで式(1)を代入すると、

$$\Psi(x,t) = \phi(x)e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} = \phi(x)e^{\frac{\varepsilon_n t}{i\hbar}} e^{-\frac{\Gamma_n t}{2\hbar}} \quad (3)$$

となる。存在確率 $P(x,t)$ は、式(3)の絶対値の2乗なので、

$$P(x,t) = |\phi(x)|^2 e^{-\frac{\Gamma_n t}{\hbar}} \quad (4)$$

となる。式(4)から、伝導電子は伝導体内に \hbar/Γ の間滞在し、最終的にはポテンシャルに散乱され、系から出ていくという電子の出入りのある開いた系であることがわかる(図2)。つまり、共鳴状態の寿命 τ は、固有値の虚部を使って

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (5)$$

で与えられている。以上が、共鳴散乱される電子が複素数固有値をもつ理由である。

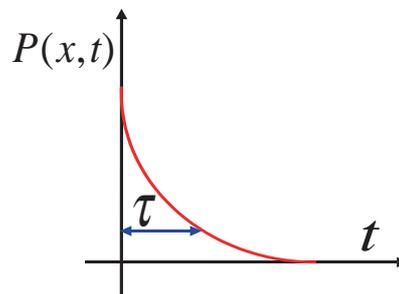


図 2: 系の内部にいる電子の存在確率 $P(x,t)$ の時間変化

2.2 共鳴散乱の空間的性質

次に、共鳴散乱の空間的な振舞いについて考える。遠方においてはポテンシャルエネルギーがゼロになるとすると、エネルギー (1) は運動エネルギーだけから成る。従って

$$E = \varepsilon - i\frac{\Gamma}{2} = \frac{\hbar^2(k - i\kappa)^2}{2m} \quad (6)$$

となり、散乱波は複素数の波数 $k - i\kappa$ を持つ平面波とすることができる。つまり

$$\phi(x) \sim e^{i(k-i\kappa)|x|} \quad (7)$$

である。極限 $x \rightarrow \pm\infty$ において、この波動関数は指数関数的に発散する。つまり伝導電子は、ポテンシャル付近にいるよりも遠方にいる確率の方が高いことがわかる (図3)。従って、複素固有値をもつ固有関数は遠方で発散する境界条件をもつことを意味している。

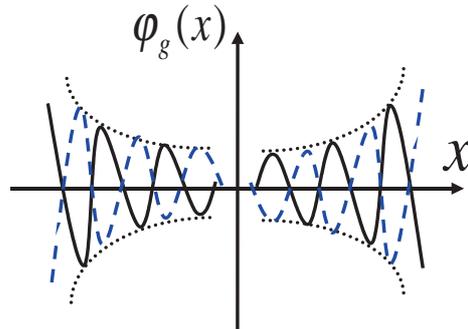


図 3: 発散した固有関数

逆に、図3のような遠方で発散する固有関数を境界条件を許すと、一般に固有値は複素数になってよいことも示せる。任意の固有関数 $\phi(x)$ に関する運動エネルギーの期待値は

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x)^* \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) dx \quad (8)$$

と書くことができる。もし、この運動エネルギーの期待値の複素共役が元の期待値に等しいならば、運動エネルギー演算子はエルミートであり、固有値は実数でなければならない。そこで式(8)の複素共役をとり、部分積分を2回行なうと

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle^* &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x) \frac{d^2}{dx^2} \phi(x)^* dx \\ &= \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle - \frac{\hbar^2}{2m} [\phi'(x)\phi(x)^* - \phi(x)^*\phi'(x)]_{-\infty}^{+\infty} \end{aligned} \quad (9)$$

が得られる。規格化された関数空間でシュレディンガー - 方程式を解く場合、式(9)の境界条件の項は0になる。つまり運動エネルギー演算子はエルミートである。逆に、もし発散した固有関数を解にもつ事が許されるならば、境界条件の項は0にはならない。つまり、運動エネルギー演算子はエルミートでなくなる。この時運動エネルギーの期待値は複素数の値になる。従って、遠方で発散する固有関数の境界条件を許すと固有値は複素数になる。

これより、複素固有値をもつ事は発散した固有関数を許すことの必要十分条件である。また、この条件はメソスコピック系での開いた量子系を扱う共鳴散乱現象を記述しているものに他ならない。

3 非エルミートなハミルトニアン

前章で共鳴散乱の固有関数は遠方で発散してしまう特徴をもっていることを説明した。そのため境界条件が無限サイズであるため数値計算が困難である。そこで発散する固有関数を扱うために、この章では非エルミートなハミルトニアンを導入することを提案する。従来の散乱問題を扱う方法では、時間に依存したシュレディンガー方程式を利用して、境界条件を与え S 行列を用いる。ここで提案する方法は従来の方法よりも多くの利点がある。

3.1 虚数ベクトルポテンシャルの導入

磁場中の荷電粒子の振舞いを記述するハミルトニアンは、エルミート演算子

$$H = \frac{(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - e\vec{A}(x))^2}{2m} + U(x) \quad (10)$$

と書くことができる。そこで、このベクトルポテンシャル $-e\vec{A}(x)$ の代わりに虚数のベクトルポテンシャル $i\vec{g}(x)$ を導入するとどうなるだろうか。つまり、非エルミートなハミルトニアン

$$H_g = \frac{(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + i\vec{g}(x))^2}{2m} + U(x) \quad (11)$$

を考える。ここで、 $\vec{g}(x)$ を虚数ベクトルポテンシャルと呼ぶ [3]。

3.2 ゲージ変換

虚数ベクトルポテンシャル $\vec{g}(x)$ に対して、ベクトルポテンシャル $\vec{A}(x)$ と同様にゲージ変換を行なう。虚数ベクトルポテンシャル $g(x) = 0$ の時のハミルトニアンを H_0 とすると、シュレディンガー方程式は、

$$H_0\phi_0(x) = E_0\phi_0(x) \quad (12)$$

となる。一方、虚数ベクトルポテンシャル $g(x) \neq 0$ の時のハミルトニアン H_g のシュレディンガー方程式を

$$H_g\phi_g(x) = E_g\phi_g(x) \quad (13)$$

と書く。ここでゲージ変換より、固有関数 $\phi_0(x)$ と $\phi_g(x)$ 、固有値 E_0 と E_g の間には

$$\phi_g(x) = e^{\hbar^{-1} \int^x g(x') dx'} \phi_0(x) \quad (14)$$

$$E_g = E_0 \quad (15)$$

という関係が成り立っている。これには、固有関数は変化するが、固有値は不変という特徴がある。

共鳴散乱現象を起こす伝導電子の固有関数は、2章よりポテンシャルから遠方に行くほど存在確率が大きくなる発散の形を成していた。そのため、固有値を求めようとしても、数値計算では無限の広がりをもつこの固有関数を計算することができない。

ところが、虚数ベクトルポテンシャル $g(x)$ を使うと、求めたい固有値は変えずに発散している固有関数を収束した局在状態にできる。すると数値計算によって直接、複素固有値が得られる。これが非エルミートなハミルトニアンの方法の骨子である。

4 共鳴散乱状態の固有値の算出

この章では、非エルミートなハミルトニアンを Tight-Binding Model で離散化して、行列表示にする。更に、虚数ベクトルポテンシャル $g(x)$ を用いて共鳴状態の固有値を算出する。

4.1 虚数ベクトルポテンシャルによる発散－収束転移

本研究では、虚数ベクトルポテンシャルに

$$g(x) = -g_0 \tanh g_0 x \quad (g_0 : \text{定数}) \quad (16)$$

を用いた (図 4)。

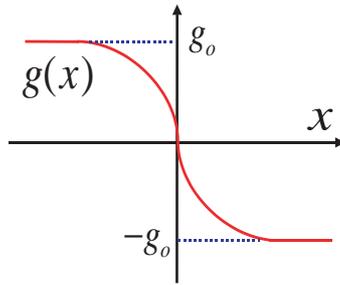


図 4: 本研究で用いた虚数ベクトルポテンシャル $g(x) = g_0 \tanh g_0 x$ 。

式 (16) を式 (14) に代入すると、固有関数は

$$\begin{aligned} \phi_g(x) &= e^{\int^x -g_0 \tanh g_0 x' dx'} \phi_0(x) \propto \frac{1}{\cosh g_0 x} \phi_0(x) \\ &\simeq e^{(-g_0 + \kappa)|x| + ik|x|} \quad (x \rightarrow \pm\infty) \end{aligned} \quad (17)$$

と変換できる。もちろん、式 (15) により

$$E_g = E_0$$

と、求めたい共鳴散乱の固有値には変化がない。

そこで、虚数ベクトルポテンシャルの定数 g_0 を徐々に大きな値に変化させる。そうすると係数 g_0 が固有関数の波数の虚部 κ を超えた時点で、発散していた固有関数は収束に向かう (図 5)。この時、無限の広がり

もっていた固有関数が局所状態である有限サイズに形を変えることで、境界条件の影響を受けることが避けられ、数値計算で固有値を求めることができる。式 (16) を用いた理由もここにある。

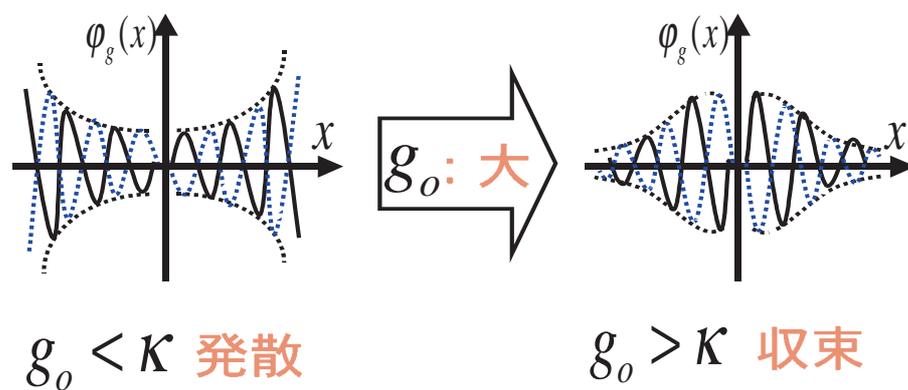


図 5: 虚数ベクトルポテンシャルの係数 g_0 が、波数成分 κ を超えると固有関数は発散状態から収束状態へ転移する。

4.2 Tight-Binding Model

今までの議論は、全て連続空間模型で説明していたが、以下では数値計算が容易な、離散化した Tight-Binding 模型 (格子模型) を用いて説明する。

初めに、虚数ベクトルポテンシャル $g(x) = 0$ の特別な場合を考える。この時ハミルトニアンは、

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad (18)$$

である。そこで空間座標を格子間隔 a に離散化して (図 6)、位置 $x = ja$ でのハミルトニアンを表すと、

$$H_0 \phi_0|_{x=ja} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_0(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=ja} + U_j \phi_j \quad (19)$$

となる。但し $\phi(x = ja)$ を ϕ_j , $U(x = ja)$ を U_j と書いた。

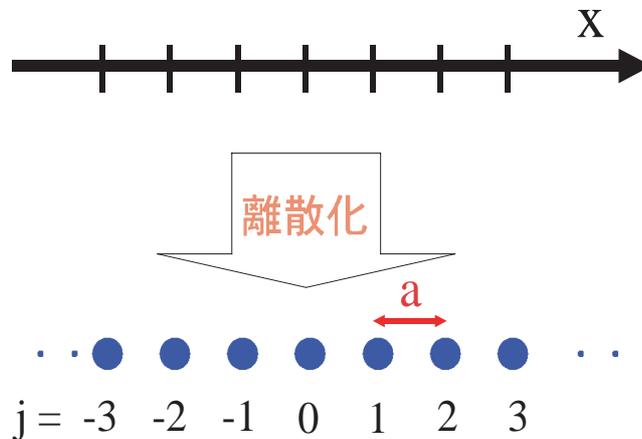


図 6: 空間の離散化。1次元の空間座標を格子間隔 a に離散化して、その格子各々に番号を割り振る。

さて、1次の偏微分を格子模型で記述すると、

$$\left. \frac{\partial \phi_0(x)}{\partial x} \right|_{x=(j+\frac{1}{2})a} \longrightarrow \frac{1}{a}(\phi_{j+1} - \phi_j) \quad (20)$$

と表せる。同様に、2階微分も

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 \phi_0(x)}{\partial x^2} \right|_{x=ja} &\longrightarrow \frac{1}{a} \left[\left. \frac{\partial \phi_0(x)}{\partial x} \right|_{x=(j+\frac{1}{2})a} - \left. \frac{\partial \phi_0(x)}{\partial x} \right|_{x=(j-\frac{1}{2})a} \right] \\ &\longrightarrow \frac{1}{a^2}(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) \end{aligned} \quad (21)$$

と表せる。従ってシュレディンガー方程式の左辺は、式(21)を式(19)に代入して

$$H_0 \phi_0|_{x=ja} = (U_j + 2t)\phi_j - t\phi_{j-1} - t\phi_{j+1} \quad (22)$$

と示せる。但し $t \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ とした。ここで、周期境界条件

$$\phi_{-N} = \phi_{N+1} \quad (23)$$

も考慮して、式(22)を行列表示すると

$$H_0 \phi_0(x)|_{x=ja} = \sum_i H_0(j, i) \phi_i \quad (24)$$

ただし、

$$H_0(j, i) = \begin{cases} U_j + 2t & (j = i \text{ の時}) \\ -t & (j \text{ と } i \text{ が最近接の時}) \\ 0 & (\text{それ以外の時}) \end{cases}$$

となり、具体的に行列表示すると次のような行列になる。

$$H_0 = \begin{pmatrix} U_{-N} + 2t & -t & 0 & 0 & 0 & \dots & -t \\ -t & \ddots & -t & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & U_{-1} + 2t & -t & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & -t & U_0 + 2t & -t & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -t & U_1 + 2t & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -t & \ddots & -t \\ -t & \dots & 0 & 0 & 0 & -t & U_N + 2t \end{pmatrix}$$

次に、虚数ベクトルポテンシャル $g(x) = -g_0 \tanh g_0 x$ を導入した非エルミートなハミルトニアンを考える。式 (24) より最近接の行列成分が、 $t \rightarrow -te^{\int_{ia}^{ja} g_0(x) dx}$ と変化するので、非エルミートなハミルトニアンは次の様になる：

$$H_g \phi_g(x)|_{x=ja} = \sum_i H_g(j, i) \phi_i \quad (25)$$

$$H_g(j, i) = \begin{cases} U_j + 2t & (j = i \text{ の時}) \\ -t \frac{\cosh g_0 ja}{\cosh g_0 ia} & (j \text{ と } i \text{ が最近接の時}) \\ 0 & (\text{それ以外の時}) \end{cases}$$

これも具体的に行列表示すると

$$H_g = \begin{pmatrix} U_{-N} + 2t & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & -t \\ \frac{-t \cosh 2g_0 a}{\cosh 3g_0 a} & \ddots & \frac{-t \cosh 2g_0 a}{\cosh g_0 a} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & U_{-1} + 2t & -t \cosh g_0 a & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & -\frac{-t}{\cosh g_0 a} & U_0 + 2t & \frac{-t}{\cosh g_0 a} & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -t \cosh g_0 a & U_1 + 2t & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{-t \cosh 2g_0 a}{\cosh g_0 a} & \ddots & \frac{-t \cosh 2g_0 a}{\cosh 3g_0 a} \\ -t & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & U_N + 2t \end{pmatrix}$$

となる。これより、行列を対角化して共鳴散乱の固有値と固有関数を求めることができる。

4.3 g_0 による固有値分布の移動

非エルミートなハミルトニアン H_g の行列から、虚数ベクトルポテンシャルの係数 g_0 を変化させ、共鳴散乱の固有値を求める。

図7のように g_0 を0から徐々に大きくしていくと、今まで動いていた固有値の値がある特定の値で止まる点が出てくる。これが、求めたい共鳴散乱の固有値である。図8は、その共鳴状態の1つで固有関数が収束していることが分かる。

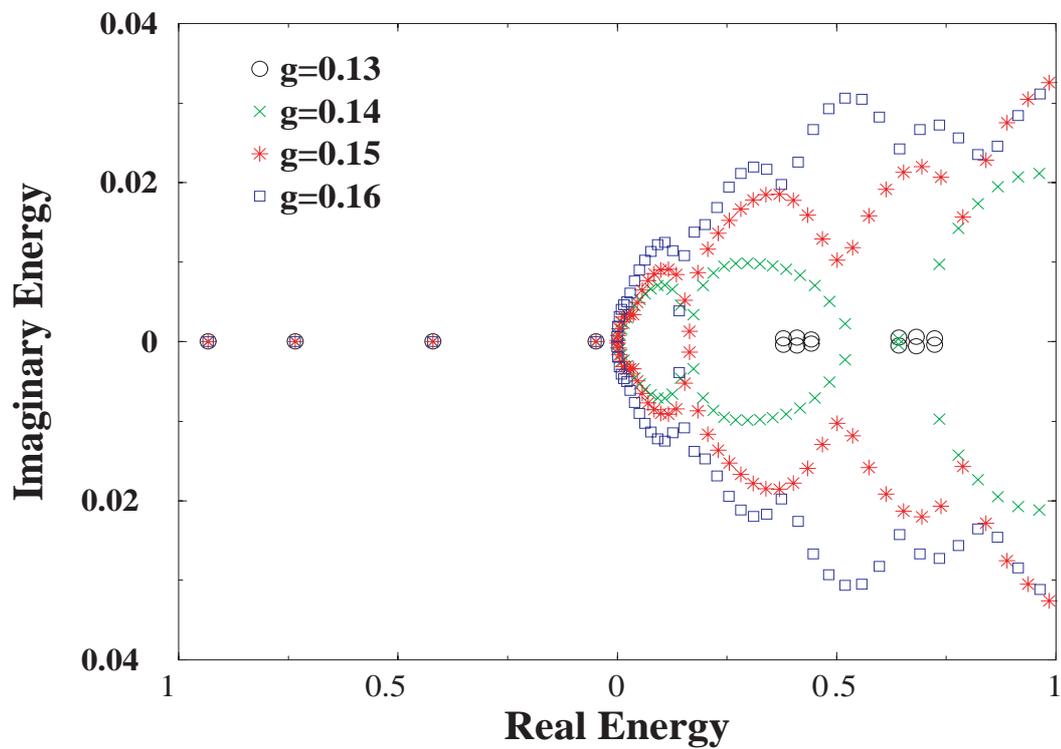


図7: 固有値分布図。固有値が虚数ベクトルポテンシャルの係数 g_0 によって変化している様子が見られる。

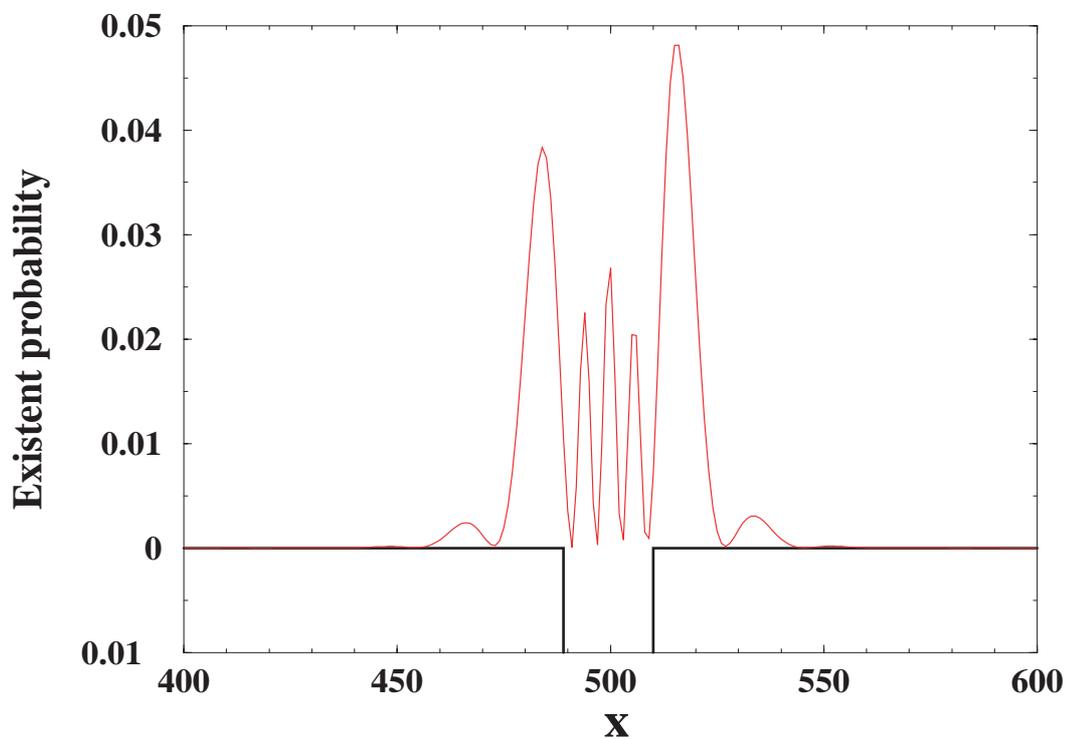


図 8: 収束した固有関数。このときのポテンシャルは、幅 $d = 20a$ (a は格子間隔), 深さ $U_0 = 1$ の引力の井戸型ポテンシャル。複素固有値 $E = 0.1083 - 0.0125i$ を持つ。

5 メソスコピックな伝導体のコンダクタンスの算出

前章より求めた共鳴散乱の固有値 $E_n = \varepsilon_n - i\Gamma_n/2$ から、この伝導体のコンダクタンスを算出する。そのために、一次元の系に対し有効的な Landauer 公式を用いる。

5.1 Landauer 公式

伝導電子のもつエネルギー E に対する伝導体のコンダクタンス $G(E)$ は、

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} T(E) \quad (26)$$

と透過関数 $T(E)$ に比例するというのが、Landauer 公式である [4]。

5.2 Green 関数の利用

透過関数 $T(E)$ を求めるために Green 関数を用いる。位置 x' による作用が位置 x に及ぼす影響は、その時の共鳴状態の固有値, 固有関数を用いて、

$$G(x, x'; E) = \sum_n \frac{|\phi_n^R(x)\rangle \langle \phi_n^L(x')|}{E - (\varepsilon_n - \frac{i\Gamma_n}{2})} \quad (27)$$

と表せる。但し $\langle \phi_n^L(x)|$ は左固有関数、 $|\phi_n^R(x)\rangle$ は右固有関数を表す。ここで注意する点は、ハミルトニアン行列 H_g が非エルミート行列であるために、一般に

$$\phi_n^L(x) \neq (\phi_n^R(x))^* \quad (28)$$

となる。

式 (27) を用いると透過関数 $T(E)$ は、

$$T(E) = |G(x, x'; E)|^2 \quad (29)$$

で与えられる。つまり、式 (29) を式 (26) に代入することで、コンダクタンス $G(E)$ を求めることができる。

5.3 コンダクタンスの結果

図1のような引力の井戸型ポテンシャル (幅 $d = 10$, 深さ $U_0 = 1$) でのコンダクタンスは、図9のようにマクロな系では現われないような量子効果を示すはずである。しかし、本研究での目的である非エルミートなハミルトニアンを導入して、図9のようなコンダクタンスの計算をすることはできなかった。

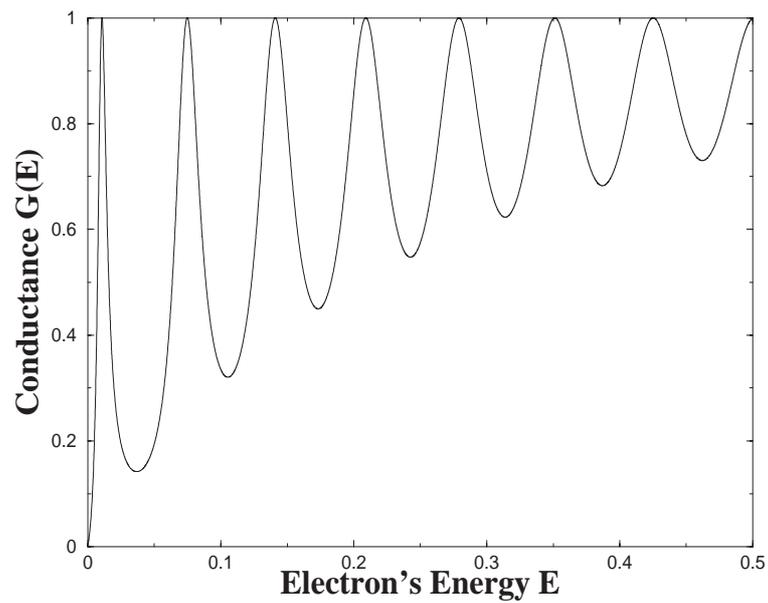


図9: 伝導電子のもつエネルギー E に対するコンダクタンス $G(E)$ (但し $\frac{2e^2}{h}$ で規格化している)。

6 まとめ

本研究の目的は、非エルミートなハミルトニアンを用いてメソスコピック系における伝導体のコンダクタンスを計算することであった。共鳴散乱の複素固有値を算出する際に、共鳴散乱の固有関数の遠方での境界条件の影響を抑えるために、虚数ベクトルポテンシャルを導入した。その係数 g_0 を徐々に大きくすると、共鳴散乱の複素固有値だけは一定の値に収束するはずであった、しかし、固有値分布図 7 では、その値を求めることができなかった。

この問題点について次のような考察をした。共鳴散乱の固有値を導き出す際に、連続模型を使わずに Tight-Binding 模型 (格子模型) を用いたことで、離散化の近似誤差の影響を無視出来なかった可能性。つまり、連続模型でなければ正確にゲージ変換できないということである。もちろん、プログラム上のバグによる影響も捨てきれない。

残念ながら、本研究では目的とした非エルミートなハミルトニアンを導入して、共鳴散乱の固有値を導き出しメソスコピック系でのコンダクタンスの計算をすることは出来なかった。ただし理論上ではこの非エルミートなハミルトニアンの導入は有効的である。また同様の研究も多く行なわれているので更にこの研究を進めていきたい。

7 謝辞

本研究を進めるにあたり羽田野先生には数々の資料と助言を頂いたのにも関わらず、初心の目標を貫徹できなかったことは大変に心残りです。同じような質問を繰り返してでも、丁寧に指導して下さいました。この場を借りて深くお礼申し上げます。また、先輩方、同級生の方々にも御礼を言いたいと思います。ありがとうございました。

参考文献

- [1] B.J.van Wees, H.van Houten, C.W.J.Beenakker, J.G.Williamson, L.P.Kouwenhoven, D.van der Marel and C.T.Foxon, 'Quantized Conductance of Point Contacts in Two-Dimensional ElectronGas, 'Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988)
- [2] 砂川重信 『散乱の量子力学』 (岩波書店,1977)
- [3] Naomichi Hatano, 'Localization in non-Hermitian quantum mechanics and flux-line pinning in superconductors, 'Physica A 254, 317-331 (1998)
- [4] S. Datta, 'Electronic Transport in Mesoscopic Systems'(Cambridge university press,1995)

A 共鳴散乱の固有値の算出

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>

#define NN 1000
#include "blaswrsp.h"
#include "f2c.h"

#define H(i,j) H[i+j*NN]
#define mass 0.5
#define length 0.5
#define V 1.0

int dgeev_(char *jobvl, char *jobvr, int *n, double *a, int *lda,
           double *wr,double *wl, double *vl, int *ldvl,double *vr,
           int *ldvr, double *work, int *lwork, int *info);

main()
{
    int i, j, k;
    static double H[NN*NN],U[NN];
    double g,t;
    FILE *datafile1, *datafile2;

    char jobvl='v';
    char jobvr='v';
    int ldvr=NN, ldvl=NN, n=NN, lda=NN, lwork=NN, info;
    static double work[NN][NN], wr[NN], wi[NN];
    static double vl[NN*NN], v1[NN*NN], vright[NN][NN], vleft[NN][NN];

    printf("g=");
    scanf("%lf",&g);
```

```

t=1./(2.*mass*length*length);

datafile1=fopen("tbn_Energy.dat");
datafile2=fopen("tbn.dat");

/* ポテンシャルを与える */
for( i=0; i<490; i++)
{
    U[i]=0.0;
}
for( i=490; i<510; i++)
{
    U[i]=-V;
}
for( i=510; i<NN; i++)
{
    U[i]=0.0;
}

/* ハミルトニアン作成 */
for( i=0; i<NN; i++)
{
    for( j=0; j<NN; i++)
    {
        if(j==i)
        {
            H( i, j )=U[i]+2.*t;
        }
        else if(j==(i-1)+NN)%NN)
        {
            H( i, j )=-t*cosh(g*length*(i-(NN-1.)/2.))
                /cosh(g*length*(j-(NN-1.)/2.));
        }
        else if(j==(i+1)+NN)%NN )
        {

```

```

        H( i, j )=-t*cosh(g*length*(i-(NN-1.)/2.))/
                                cosh(g*length*(j-(NN-1.)/2.));
    }
else
    {
        H( i, j )=0.0;
    }
}
}

/* ハミルトニアンを対角化する関数 */
dgeev_(&jobvl, &jobvr, &n, H, &lda, wr, wi, vl,
        &ldvl, vr, &ldvr, work, &lwork, $info);

/* 計算の合否の判別 */
printf("INFO=%d \n",info);

/* 固有値分布図の作成 */
for( i=0; i<NN ; i++ )
    {
        fprintf(datafile1," %lf %lf \n", er[i], wi[i]);
    }
fclose(datafile1);

/* k 番目の固有関数の特定 */
printf("k=");
scanf("%d",&k);

for( i=0; i<NN ; i++ )
    {
        for( j=0; j<NN ; j++ )
            {
                vright[i][j]=vr[i+j*NN];
                vleft[i][j]=vl[i+j*NN];
            }
    }

```

```

    }

for( i=0; i<NN ; i++ )
    {
        vectorR[i][k]=pow(vright[i][k],2.)+pow(vright[i][k+1],2.);
        vectorL[i][k]=pow(vleft[i][k],2.)+pow(vleft[i][k+1],2.);
    }

for( i=0; i<NN ; i++ )
    {
        fprintf(datafile2," %d %lf \n", i, vectorR[i][k]);
    }
fprintf(datafile2,"&\n");

for( i=0; i<NN ; i++ )
    {
        fprintf(datafile2," %d %lf \n", i, vectorL[i][k]);
    }
fclose(datafile2);
}

```