博士論文解説

磁場中のアンチドット格子に関する研究

瓜生 誠司

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 東京都港区六本木 7-22-1, 東京大学物性研究所 E-mail: uryu@kodama.issp.u-tokyo.ac.jp

(1998年2月27日受理)

1. 序論

シリコン電界効果型トランジスタや GaAs/AlGaAs ヘテロ界面などに実現される二次元電子系は量子ホール効果を始めとして固体物理における新しい分野を切り開いてきたが [1]、近年の微細加工技術の進歩によりそれらに量子点や量子細線など様々な構造を人工的に作ることが可能になった。点状の斥力ポテンシャル(アンチドット)が格子状に配置されたアンチドット格子と呼ばれる構造は、しばしば高移動度の GaAs/AlGaAs ヘテロ界面に作製され、そこでは電子はバルク中の不純物よりも主にアンチドットポテンシャルの散乱を受けるバリスティックな系である。このアンチドット格子は制御可能な人工原子からなる二次元格子として注目されており、古典的な領域から量子力学的な領域までを実現することができる。古典的領域ではカオス系として、半古典的及び量子力学的な領域では量子力オスの観点や特有の干渉効果に興味が持たれている。

また一様磁場中では、古典的なサイクロトロン軌道の直径とアンチドットポテンシャルの周期との整合性が重要な役割を果たし、整合ピークと呼ばれる幾何学的共鳴現象が生じることが知られている [2]。量子効果では、アハロノフ-ボーム(AB)効果型振動 [3,4]、アルトシュラー-アロノフ-スピバーク (AAS) 振動 [5,6]、アンダーソン局在 [7] などが観測され、それぞれにアンチドット格子特有の現象が見られる。

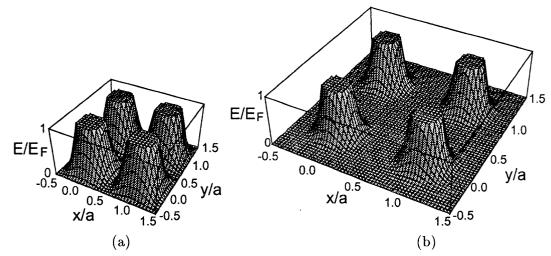
これまでの研究によって、整合ピークは磁気フォーカシング効果によって理論的によく理解されている [8]。また、AB 効果型振動については量子論や半古典論による多くの研究がなされている [3,9-13]。さらに AAS 振動の数値計算によって、アンチドットポテンシャルの不規則さが重要な役割を果たすことがわかったが [14,15]、アンチドット格子におけるアンダーソン局在の理論的研究は大きなサイズの取り扱いが困難なために今のところ発表されていない。

本論文では、主に磁場中のアンチドット格子における輸送現象の数値的研究を行なった。まず最初に、アンチドット格子を量子交差点の二次元配列でモデル化し単一交差点での散乱(S)行列によって系全体を特徴付けるという新しい描像を用いた。この方法は数値計算を大幅に簡単化できるために大きな系の計算が可能になり、アンチドット格子のアンダーソン局在を扱えるようになった。また、輸送現象において重要と考えられるアンチドットポテンシャルの不規則さを取り扱うことができるという利点もある。

この論文は以下のように構成されている:2章では、アンチドット格子における磁気輸送現象を概観し、本研究の動機と目的について述べる。3章ではS行列を用いた電子状態の定式化とアンチドット正方格子における結果を、4章では磁気輸送現象について、5章ではアンダーソン局在の結果を述べ、6章をまとめとする。

2. アンチドット格子における磁気輸送現象

この章ではアンチドット格子における輸送現象について概観する。以下では整合ピーク、AB効果型振動、AAS振動、及び絶縁体-量子ホール液体転移をとりあげる。



第1図 アンチドット正方格子のモデルポテンシャル (a) d/a=0.5、 $\beta=1$. (b) d/a=0.3、 $\beta=4$. フェルミエネルギーでの断面を示す。

2.1. アンチドット格子

アンチドット格子とは周期的な強い斥力ポテンシャルによって変調を受けた二次元電子系である。高移動度の GaAs/AlGaAs ヘテロ界面に作製される典型的なものでは、フェルミ波長 $\lambda_{\rm F}$ がおよそ 500Å、アンチドットポテンシャル加工前の弾性散乱長 $l_{\rm e}$ と 4.2 K での位相緩和長 $l_{\rm p}$ が約 10μ m であり、システムサイズ L を変えることによってコヒーレントな系($L \ll l_{\rm p}$)からインコヒーレントな系($L \gg l_{\rm b}$)まで実現できる。

さて、アンチドット格子のポテンシャルとしてしばしば以下のようなモデルポテンシャルが用いられる。第1図はその例である。

$$V(\mathbf{r}) = U_0 F(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \tag{2.1}$$

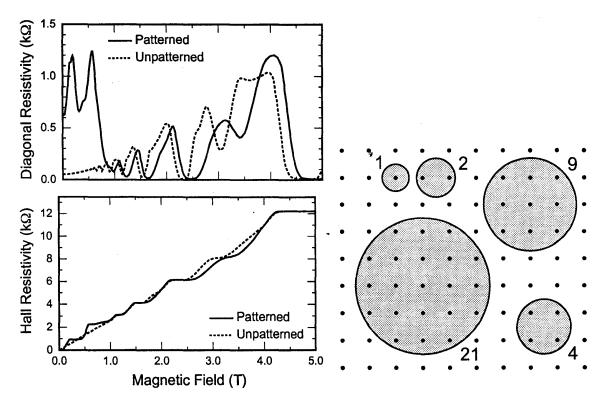
ここで $F(\mathbf{r})$ はウィグナー-サイツ胞内で以下のように定義される。

$$F(\mathbf{r}) = \left| \cos \left(\frac{\pi x}{a} \right) \cos \left(\frac{\pi y}{a} \right) \right|^{2\beta}, \tag{2.2}$$

 U_0 はポテンシャルの最大値、 a はポテンシャル周期、 β はポテンシャル勾配のパラメターである。ドットの直径 d は最近接ドット間を結ぶ線上で定義する。d/a で定義されるアスペクト比はアンチドット格子系において重要なパラメターとなる。自己無撞着な計算結果によれば [16,17]、典型的なドットの直径 $d\sim1000$ Å に対する β の値は $d/a\sim0.5$ の時 $\beta\sim1$ 、 $d/a\sim0.4$ の時 $\beta\sim2$ 、 $d/a\sim0.3$ の時 $\beta\sim4$ 程度である。

2.2. 整合ピーク

第2図は (a) 縦抵抗と (b) ホール抵抗の磁場依存性を観測した実験結果である [2]。弱磁場 (B < 1.0T) では、縦抵抗に二つのピーク構造が現れ、一方ホール抵抗はステップ構造を示す。これらのピークは第3図に示すような、サイクロトロン軌道の直径とアンチドットポテンシャルの格子定数がほぼ整合する磁場で生じるため、整合ピークと呼ばれる。この整合ピークに対する数値計算 [18] から、カオス軌道の重要性が示唆されており、ランナウェイ軌道と呼ばれる、一方向にアンチドットをホッピングして行く特異的な軌道の寄与が研究された [19-22]。また、大きな d/a に対して磁場 $2R_c = a$ (R_c : サイクロトロン軌道の半径)で 電気伝導度 σ_{xx} にディップ構造を観測しているものや [23]、ホール抵抗のステップ構造を実験、理論的に研究したものもある [24]。

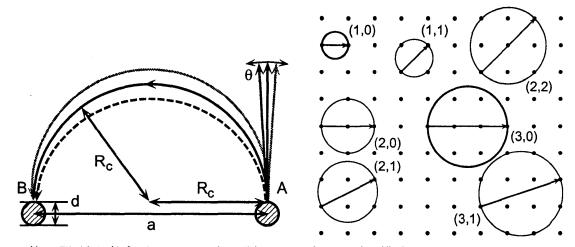


第2図 (左) アンチドットポテンシャルがある場合(実線)とない場合(点線)の ρ_{xx} と ρ_{xy} [2]。縦抵抗には二つのピーク構造が、ホール抵抗にはステップ構造が 現れる。

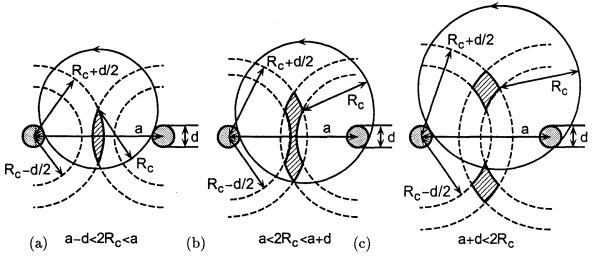
第3図(右)ピン止め軌道。サイクロトロン軌道がアンチドット1,2,4,9,21を 囲む時に抵抗がピーク値をとると考えられた。

この整合ピークは、基本的には磁気フォーカシングによって次のように理解される [8]。最初に d/a が小さい極限を考えよう。この時、電子のアンチドットによる散乱は全くランダムであり、各散乱は独立であると考えられる。磁場中で有限の電気伝導度を得るには、サイクロトロン軌道の重心の移動が必要であるが、 $2R_c < a$ では、電子は一つのアンチドットに散乱され続けるために、電気伝導度はゼロになる。 $2R_c > a-d$ になって始めて電子はアンチドット中を拡散できるようになる。隣会うアンチドットに続けて散乱される確率は、磁気フォーカシング効果により $2R_c = a$ で最大となる。実際、動径方向からの入射角度の微小なずれ θ に対して、隣会うアンチドットに到達する電子の位置のずれは $2R_c\theta^2$ のオーダーである(第4図参照)。この磁気フォーカシング効果により、 $2R_c = a$ では電子の拡散が強められ電気伝導度が増大する。なお、ここで述べている磁気フォーカシング効果は、他で示唆されているアンチドット間のチャネルから入射し、チャネルに到達する場合の磁気フォーカシング効果 [21,25,26] とは異なったものである。

第 5 図は二つの格子点の距離がサイクロトロン軌道の直径と等しくなる条件を表したもので、この図において、整合条件 $2R_c=a$ は $(\pm 1,0)$ または $(0,\pm 1)$ で表されている。条件 $2R_c=a$ から磁場を弱くしていくと、 $2R_c=\sqrt{2}a$ で $(\pm 1,\pm 1)$ の磁気フォーカシングによる電気伝導度のピークが予想されるが、この軌道は他のアンチドットに散乱されるので寄与は小さい。次のピークは $(\pm 2,0)$, $(0,\pm 2)$, $(\pm 2,\pm 1)$, $(\pm 1,\pm 2)$ の軌道で生じるが、これらは近い整合磁場 $2R_c=2a$ と $2R_c=\sqrt{5}a$ を与える。この場合も他のアンチドットに散乱されるので寄与は小さい。三番目のピークは $(\pm 2,\pm 2)$, $(\pm 3,0)$, $(0,\pm 3)$, $(\pm 3,\pm 1)$, $(\pm 1,\pm 3)$ の軌道によって生じる。 $(\pm 3,0)$ と $(0,\pm 3)$ の軌道は他のアンチドットによって散乱されないので、 $2R_c=3a$ のピークは強くなる。実験でも $2R_c=3a$ に強いピークが観測されている。このようにして、ほとんどすべての整合ピークは磁気フォーカシングによって説明できる。



第4図(左)整合ピークを生じる磁気フォーカシングの摸式図 第5図(右)サイクロトロン軌道の重心が移動する拡散軌道の例



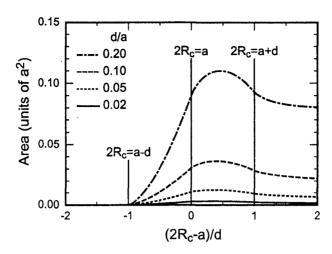
第6図 斜線部分は隣会う二つのアンチドットを横切るサイクロトロン軌道の重心の位置を示す。

a が短くなると、アンチドットの大きさが無視できなくなり整合条件が変更される。以下では、この効果を $2R_c=a$ での整合ピークに注目して考察する。第 6 図 は隣会うアンチドットに散乱されるサイクロトロン軌道の重心の範囲を示したものであり、 $a-d<2R_c< a, a<2R_c< a+d, a+d<2R_c$ の三つに分類される。第 7 図 は磁場の関数としてその面積を示したものであり、 $2R_c=a+fd$ で最大値をとることがわかる(f<0.5 である)。この面積は電気伝導度に寄与する拡散軌道の位相空間を占める体積に比例することから、整合ピークはおよそ d/a に比例して弱磁場側にずれることがわかる。

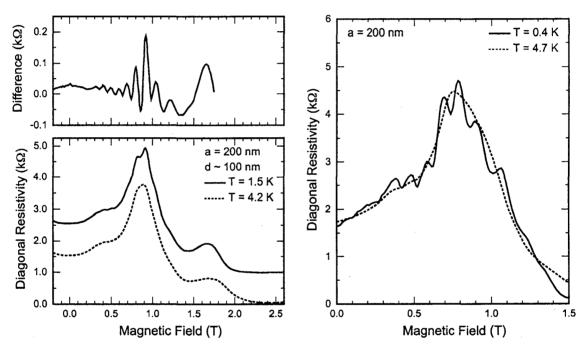
2.3. アハロノフ-ボーム効果型振動

アンチドット格子で観測される顕著な量子効果の一つは、 $2R_c=a$ の磁気抵抗の整合ピークの周りの微小振動である [3,4]。第8図と第9図に示すように、縦抵抗の整合ピーク付近に、周期がほぼ $\Delta B \sim \Phi_0/a^2$ の振動が観測される。ここで Φ_0 は磁束量子 $\Phi_0=ch/e$ である。通常のAB 効果とは異なりシステムサイズが位相緩和長よりも大きいことから、この振動は電子状態の周期的な構造の現れであると考えられる。

アンチドット格子は古典的にはカオス系であることから、この微小振動の周期軌道理論に



第7図 隣会う二つのアンチドットを横切るサイクロトロン軌道の重心の範囲の面積電気伝導度は $2R_c \sim a$ で、およそ面積に比例する。

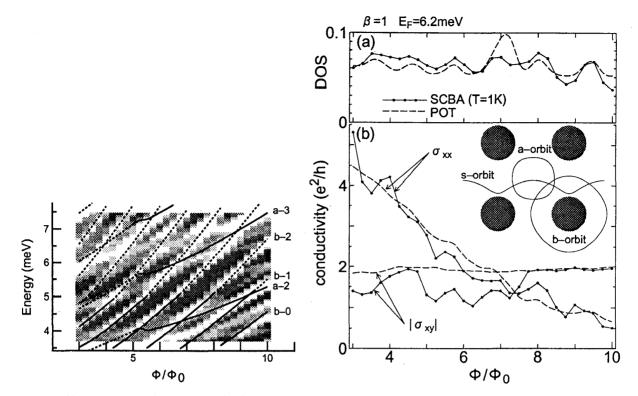


第8図(左)(a)縦抵抗の磁場依存性と(b)4.2 Kと1.5 Kの縦抵抗の差[4]。 第9図(右)整合ピーク付近の微小振動[3]。

基づいた解釈が試みられている。それによると、状態密度の量子補正は各周期軌道からの寄与の和で表されるが、いくつかの周期軌道の半古典的量子化が AB 効果型振動の周期と近い振動を与えることが示唆されている [3]。第10 図はセルフコンシステントボルン近似 (SCBA)による状態密度の結果と第11 図挿入図に示された周期軌道 (a) と (b) の量子化準位を比較したものである。量子化準位は概ね一致しているが説明できない部分もある。

半古典的久保公式 [9-11,27] によれば、電気伝導度とホール伝導度は状態密度の構造と同位相になるが、SCBA による結果と半古典論による計算結果を比較した第 11 図 [11] はそうなっていない。確かに状態密度に関しては両者は良く一致しているのだが、SCBA による電気伝導度は強磁場側では半古典論の結果と同位相、弱磁場側では逆位相になっており、さらにホール伝導度は半古典論では再現できていない。

この不一致は以下のような効果によると考えられている。整合ピークの磁場付近では、前



第10図(左)状態密度の等高表示。白い部分は高密度を表す。実線と点線は第11図に示された軌道(a)と(b)の量子化準位を示す。実線は安定軌道を点線は不安定軌道を示す。

第11図(右)(a) 状態密度と(b) 電気伝導度とホール伝導度。実線は SCBA、点線は半古典論の結果。

節で述べたように電子の拡散が相対的に増大するが、これらの拡散軌道は周期軌道によって摂動を受け、準位反発や散乱の結果、電気伝導度が減少する。このような効果は半古典論には全く採り入れられていない。

AB 効果型振動の機構としての周期軌道の輸送現象への寄与の仕方には、以下のようなものが挙げられる:

- (i) 拡散軌道が周期軌道による摂動を受け準位反発を生じる。このとき、電気伝導度は状態密度と逆位相になる[11]。
- (ii) 拡散軌道が周期軌道による摂動を受け散乱が増大する。このとき、電気伝導度は状態密度 と逆位相になる。
- (iii) 周期軌道がホッピングにより電流を運ぶ。このとき、電気伝導度は状態密度と同位相になる [3,11]。

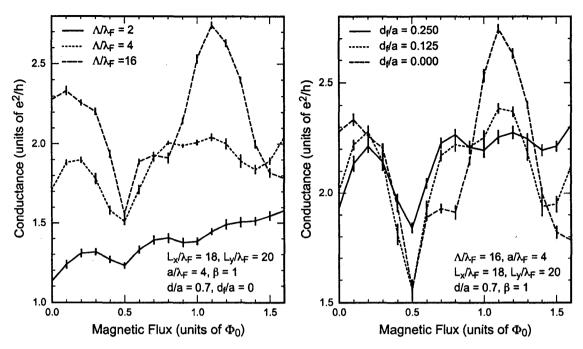
他方、周期軌道によらない機構も考えられる:

(iv) 磁場中の格子模型ではエネルギーバンドは自己相似なバタフライスペクトルになる [28]。 この場合平均の群速度はプラケットを貫く磁束が磁束量子の整数倍のときに最大となるため、電気伝導度も最大になると予想される [11,29]。

現在のところ、AB 効果型振動がこれらのうちのどれか一つ、またはどの組合せで生じているのか、明確には理解されていない。

2.4. アルトシュラー-アロノフ-スピバーク振動

アンチドット格子では、単位胞を貫く磁束の関数として $\Phi_0/2$ 周期のアルトシュラー-アロ



第 12 図 (左) 短距離不純物のあるアンチドット三角格子における電気伝導度。横軸は単位胞を貫く磁束を表す [15]。

第13図(右)直径の揺らぎのあるアンチドット三角格子における電気伝導度[15]。

ノフ-スピバーク (AAS) 振動 [30] が観測されているが [4]、その AAS 振動には (1) 振動は正方格子よりも三角格子の方が強い、(2) 負の磁気抵抗を伴うといった特徴がある。

これらは、理論的によく理解されている [14,15]。 AAS 振動がアンチドット三角格子において強く正方格子で弱いのは [14,15]、電子の軌道の違い、つまり、電子は正方格子よりも三角格子においてより頻繁に散乱され複雑な軌道を描くことによる。また、負の磁気抵抗は弱局在効果である。第 12 図は短距離不純物のあるアンチドット三角格子におけるコンダクタンスの計算結果である。平均自由行程 $\Lambda/\lambda_F=16$ と $\Lambda/\lambda_F=4$ では、AB 振動のために AAS 振動ははっきりしないが、短い平均自由行程 $\Lambda/\lambda_F=2$ と $\Lambda/\lambda_F=1/2$ では、AAS 振動が明かである。しかしこのようにポテンシャル周期よりも短い平均自由行程は通常の拡散領域の AAS 振動である。一方、第 13 図は直径の揺らぎのあるアンチドット三角格子におけるコンダクタンスの計算結果である。直径の揺らぎを大きくし標準偏差 d_f が $d_f/a=0.07$ では、明かな AAS 振動が現れている。この d_f の値は実験で見積もられる値と同程度である。

AAS 振動に関する以上の結果から、アンチドット格子における輸送現象においては、アンチドットポテンシャルの不規則さが重要な役割を演じていることが分かる。よって、本論文の計算においても短距離不純物とアンチドットポテンシャルの揺らぎの両方を考慮する。

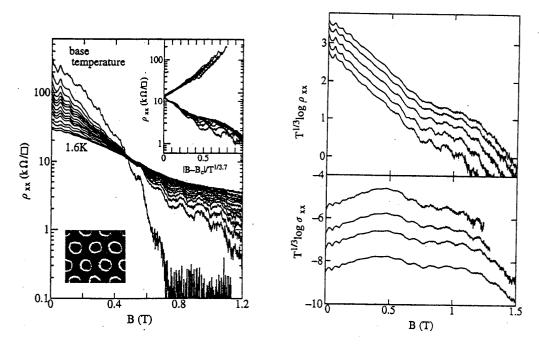
2.5. 絶縁体-量子ホール液体転移

アンチドット三角格子では絶縁体-量子ホール液体転移が観測されている [7]。第 14 図は様々な温度での縦抵抗の磁場依存性を示したもので、磁場を加えると絶縁体から量子ホール液体への転移が $B_c=0.47$ T で生じることが分かる。現実の系では第 14 図の挿入図のようにアンチドットは不規則であるために電子は局在すると考えられる。

この結果は次のような特徴がある:一つは温度依存性がモット型の可変領域ホッピング伝導、つまり、

$$\rho = \rho_0 \exp[(T_0/T)^{1/3}] \tag{2.3}$$

を示すことである。ここで、 ρ_0 は温度によらない定数である。 T_0 は局在長 ξ と $T_0 \propto 1/\xi^2 D(E)$



第14図(左)様々な温度での縦抵抗の磁場依存性。挿入図はアンチドット格子の電子顕微鏡写真である[7]。

第 15 図 (右) いくつかの温度での $T^{1/3}\log \rho_{xx}$ と $T^{1/3}\log \sigma_{xx}$ の磁場依存性 [7]。

の関係にある。ここで D(E) はエネルギー E での状態密度である。ゼロ磁場での局在長はおよそ a と同程度と見積もられている。一方、磁場依存性については、抵抗はゼロ磁場付近で $\Phi_0/2$ 周期の振動を、 $B>B_c$ で Φ_0 周期の振動を示しており、前者は AAS 振動に、後者は AB 効果型振動に類似している。第 15 図は、

$$T^{1/3}\log\rho_{xx} = T^{1/3}\log\rho_0 + T_0^{1/3},\tag{2.4}$$

を示したもので、振動の振幅はほとんど温度によらないことがわかる。状態密度 D(E) は弱磁場では磁場にあまり依存しないと期待されるので、ゼロ磁場付近での抵抗の振動が局在長の振動に起因していると考えられる。

3. 電子状態

この章ではS行列を用いてアンチドット格子をモデル化し、量子力学的電子状態を調べる。 また、その結果を周期軌道理論を用いて半古典的に解析する。

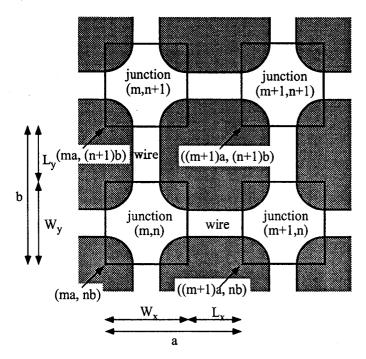
3.1. S 行列による定式化

a. S 行列

まず最初にアンチドット格子を第 16 図に示すような量子交差点の二次元配列でモデル化する。ここでは、一般のアンチドット長方格子に対して定式化を行なう。各交差点は x 方向の幅 W_x 、 y 方向の幅 W_y で、x,y 方向にそれぞれ長さ L_x,L_y の細線でつながっている。よって、x 方向のポテンシャル周期は $a=W_x+L_x$ であり、y 方向は $b=W_y+L_y$ である。系に垂直で一様な磁場 B がかけられる場合を考える。

第17 図は無限に長い量子細線の交差点の摸式図である。便宜上、系を $1\sim4$ で示した細線領域と中央の交差点領域に分ける。座標原点を交差点の左下に選ぶ。二次元 xy 平面でハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(x, y), \tag{3.1}$$



第16図 二次元交差点配列の摸式図

と書ける。ここで、 m^* は電子の有効質量、V(x,y) は閉じ込めポテンシャル、 $\mathbf A$ はベクトルポテンシャルである。以下ではゲージを

$$\mathbf{A} = (-By, 0). \tag{3.2}$$

に選ぶが、エネルギーバンド、状態密度、電気伝導度はゲージにはよらない。

さて、細線1~4内での波動関数は以下のように書ける。

$$\begin{split} &\psi_{1\nu\pm}^{(0,0)} = \frac{1}{\sqrt{v_{\nu}^{x}}} \exp\left[\mathrm{i}\left(\pm\kappa_{\nu}^{x} + \frac{W_{y}}{2l^{2}}\right)\left(x + \frac{L_{x}}{2}\right)\right] \eta_{\nu\pm}(y), \\ &\psi_{2\nu\pm}^{(0,0)} = \frac{1}{\sqrt{v_{\nu}^{y}}} \exp\left[\mathrm{i}\left(\pm\kappa_{\nu}^{y} - \frac{W_{x}}{2l^{2}}\right)\left(y + \frac{L_{y}}{2}\right)\right] \exp\left(\mathrm{i}\frac{xy}{l^{2}}\right) \, \xi_{\nu\pm}(x), \\ &\psi_{3\nu\pm}^{(0,0)} = \frac{1}{\sqrt{v_{\nu}^{x}}} \exp\left[\mathrm{i}\left(\pm\kappa_{\nu}^{x} + \frac{W_{y}}{2l^{2}}\right)\left(x - W_{x} - \frac{L_{x}}{2}\right)\right] \eta_{\nu\pm}(y), \\ &\psi_{4\nu\pm}^{(0,0)} = \frac{1}{\sqrt{v_{\nu}^{y}}} \exp\left[\mathrm{i}\left(\pm\kappa_{\nu}^{y} - \frac{W_{x}}{2l^{2}}\right)\left(y - W_{y} - \frac{L_{y}}{2}\right)\right] \exp\left(\mathrm{i}\frac{xy}{l^{2}}\right) \, \xi_{\nu\pm}(x). \end{split} \tag{3.3}$$

各細線におけるモードを $\nu\pm$ で示す。モードは実数の波数を持つ進行波と、虚数の波数を持つ減衰波の二種類に分けられ、各 ν に対して波数 κ_{ν} を、進行波に対しては正であるように、減衰波に対してはその虚部が正であるように定義する。符合 + (-) は正(負)の方向に進行または減衰するモードを表す。 $\eta_{\nu\pm}(y)$ は x 方向に延びる細線の y 方向の運動に対する波動関数、 $\xi_{\nu\pm}(x)$ は y 方向に延びる細線のゲージ $\mathbf{A}'=(0,Bx)$ の下での x 方向の運動に対する波動関数であり、これらは以下の方程式の解である:

$$\label{eq:continuous_equation} \begin{split} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_{\rm c}^2 (y \mp l^2 \kappa_{\nu}^x - W_y/2)^2 + V(y) \right] \eta_{\nu\pm}(y) = E \eta_{\nu\pm}(y), \\ & \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m^* \omega_{\rm c}^2 (x \pm l^2 \kappa_{\nu}^y - W_x/2)^2 + V(x) \right] \xi_{\nu\pm}(x) = E \xi_{\nu\pm}(x), \end{split}$$

ここで、E はエネルギー、 $\omega_{\rm c}=eB/m^*c$ はサイクロトロン周波数である。進行波の群速度 v_x^x,v_y^y は次で与えられる。

$$v_{\nu}^{x} = \frac{\hbar}{m^{*}} \int dy \, \eta_{\nu+}^{*}(y) \left(\kappa_{\nu}^{x} + \frac{W_{y}}{2l^{2}} - \frac{y}{l^{2}} \right) \eta_{\nu+}(y),$$

$$v_{\nu}^{y} = \frac{\hbar}{m^{*}} \int dx \, \xi_{\nu+}^{*}(x) \left(\kappa_{\nu}^{y} - \frac{W_{x}}{2l^{2}} + \frac{x}{l^{2}} \right) \xi_{\nu+}(x) .$$
(3.5)

進行波の規格化因子は群速度が正になるように選ぶが、減衰波に対しては任意である。細線内の波動関数はモード 式 (3.3) に関して、

$$\Psi_{i}^{(0,0)}(x,y) = \sum_{\nu} \left\{ C_{i\nu+}^{(0,0)} \, \psi_{i\nu+}^{(0,0)}(x,y) + C_{i\nu-}^{(0,0)} \, \psi_{i\nu-}^{(0,0)}(x,y) \right\},\tag{3.6}$$

と展開できる。C は展開係数、 $i=1,\dots,4$ である。入射波の C と散乱波のそれとの関係は S 行列によって与えられる:

$$\begin{pmatrix}
\mathbf{C}_{1-}^{(0,0)} \\
\mathbf{C}_{2-}^{(0,0)} \\
\mathbf{C}_{3+}^{(0,0)} \\
\mathbf{C}_{4+}^{(0,0)}
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\
S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\
S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\
S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44}
\end{pmatrix} \begin{pmatrix}
\mathbf{C}_{1+}^{(0,0)} \\
\mathbf{C}_{2+}^{(0,0)} \\
\mathbf{C}_{3-}^{(0,0)} \\
\mathbf{C}_{4-}^{(0,0)}
\end{pmatrix},$$
(3.7)

ここで ${\bf C}$ は展開係数 C を成分とするモード数の次元のベクトルである。減衰波も含めて定義された ${\bf S}$ 行列は、進行波に対する部分はユニタリーであるが全体としてはユニタリー行列ではないことに注意する。

交差点 (m,n) につながる細線 $1 \sim 4$ のモード ν を

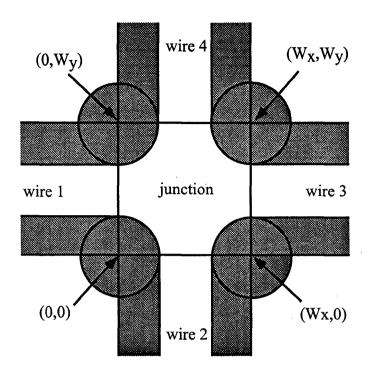
$$\psi_{i\nu}^{(m,n)}(x,y) = \psi_{i\nu}^{(0,0)}(x-ma,y-nb) \exp\left[i\frac{nb}{l^2}(x-ma)\right]$$
(3.8)

と定義すると、S 行列を交差点の位置 (m,n) によらなくできるため、以下ではこの定義を用いる。

b. エネルギーバンド

以下では、単位胞を貫く磁束が磁束量子の有理数倍であるような場合、即ち $Bab/\Phi_0=p/q$ の場合に話を限るが、現実の系のシミュレーションにはこれで十分である。ここで、 p と q は 互いに素な整数である。このとき、磁場中のブロッホ定理は q 倍に拡張した単位胞に対して成り立つ。よって、ブロッホ定理を x 方向に Ma、y 方向に Nb に拡張した磁気単位胞に対して 要請する。ここで、M と N は整数で、MN=q である。磁気単位胞に対する S 行列 S_e は単位胞の S 行列を接続することによって得られ、 S_e は次の関係を満足する。

$$\begin{pmatrix}
\mathbf{C}_{1}^{-} \\
\mathbf{C}_{2}^{-} \\
\mathbf{C}_{3}^{+} \\
\mathbf{C}_{4}^{+}
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
S_{\text{e}11} & S_{\text{e}12} & S_{\text{e}13} & S_{\text{e}14} \\
S_{\text{e}21} & S_{\text{e}22} & S_{\text{e}23} & S_{\text{e}24} \\
S_{\text{e}31} & S_{\text{e}32} & S_{\text{e}33} & S_{\text{e}34} \\
S_{\text{e}41} & S_{\text{e}42} & S_{\text{e}43} & S_{\text{e}44}
\end{pmatrix} \begin{pmatrix}
\mathbf{C}_{1}^{+} \\
\mathbf{C}_{2}^{+} \\
\mathbf{C}_{3}^{-} \\
\mathbf{C}_{4}^{-}
\end{pmatrix},$$
(3.9)



第17図 S 行列の計算に用いる量子交差点の摸式図

ここで、

$$\mathbf{C}_{1}^{\pm} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{1\pm}^{(m,n+N-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{1\pm}^{(m,n)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_{3}^{\pm} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{3\pm}^{(m,n+N-1)} \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{3\pm}^{(m,n)} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{C}_{2}^{\pm} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{2\pm}^{(m,n)} \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{2\pm}^{(m+M-1,n)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_{4}^{\pm} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{4\pm}^{(m,n)} \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{4\pm}^{(m+M-1,n)} \end{pmatrix}.$$

式 (3.2) のゲージでは、ブロッホ定理は

$$\Psi_{k_x,k_y}(x,y) = \exp(-ik_x M a) \Psi_{k_x,k_y}(x + M a, y)$$
(3.10)

$$= \exp\left[-\mathrm{i}\left(k_y + \frac{x}{l^2}\right)Nb\right]\Psi_{k_x,k_y}(x,y+Nb). \tag{3.11}$$

となり、細線内の波動関数を用いると以下の関係式で与えられる:

$$\Psi_1^{(m,n+j)}(x,y) = \exp(-ik_x a)\Psi_3^{(m+M-1,n+j)}(x+Ma,y), \tag{3.12}$$

ここで、 $ma-L_x \le x \le ma, nb \le y \le nb+W_u, i=0,1,\cdots,M-1$ 、である。

$$\Psi_2^{(m+i,n)}(x,y) = \exp\left[-i\left(k_y + \frac{x}{l^2}\right)Nb\right]\Psi_4^{(m+i,n+N-1)}(x,y+Nb), \tag{3.13}$$

ここで、 $na \le x \le na + W_x, nb - L_y \le y \le nb, j = 0, 1, \dots, N-1$ である。 さらに関係式

$$\psi_1^{(m,n+j)}(x,y) = \exp\left[-i\frac{(n+j)ab}{l^2}\right]\psi_3^{(m,n+j)}(x+Ma,y),\tag{3.14}$$

$$\psi_2^{(m+i,n)}(x,y) = \exp\left[-i\frac{Nb}{l^2}\{x - (m+i)a\}\right]\psi_4^{(m+i,n+N-1)}(x,y+Nb), \quad (3.15)$$

を用いると、展開係数 C に対するブロッホ定理が得られる。

$$C_{1\nu\pm}^{(m,n+j)} = \exp\left[-ik_x Ma + i\frac{ab}{l^2}(n+j)\right] C_{3\nu\pm}^{(m+M-1,n+j)}, \tag{3.16}$$

$$C_{2\nu\pm}^{(m+i,n)} = \exp\left[-ik_y Nb - i\frac{ab}{l^2}(m+i)N\right] C_{4\nu\pm}^{(m+i,n+N-1)}.$$
 (3.17)

これらを、入射波と散乱波の関係に書き換えると、以下のようになる。

$$\begin{pmatrix}
\mathbf{C}_{1}^{-} \\
\mathbf{C}_{2}^{-} \\
\mathbf{C}_{1}^{+} \\
\mathbf{C}_{4}^{+}
\end{pmatrix} = P_{\mathbf{e}}^{(m,n)}(k_{x}, k_{y}) \begin{pmatrix}
\mathbf{C}_{1}^{+} \\
\mathbf{C}_{2}^{+} \\
\mathbf{C}_{3}^{-} \\
\mathbf{C}_{4}^{-}
\end{pmatrix},$$
(3.18)

ここで、

$$P_{e}^{(m,n)}(k_{x},k_{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e^{-ik_{x}Ma}P_{x}^{-1} & 0\\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_{y}Nb}P_{y}^{-1}\\ e^{ik_{x}Ma}P_{x} & 0 & 0 & 0\\ 0 & e^{ik_{y}Nb}P_{y} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(3.19)

であり、

$$P_{x} = e^{-\mathrm{i}nab/l^{2}} \begin{pmatrix} e^{-\mathrm{i}(N-1)ab/l^{2}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-\mathrm{i}(N-2)ab/l^{2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

$$P_{y} = e^{\mathrm{i}mNab/l^{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{\mathrm{i}Nab/l^{2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{\mathrm{i}N(M-1)ab/l^{2}} \end{pmatrix}.$$
(3.20)

である。エネルギーバンドは式 (3.9) と (3.18) が解を持つ条件として、

$$\det[P_e^{(m,n)}(k_x, k_y)S_e(E) - 1] = 0, (3.21)$$

で与えられる。ここで、関係式 $P_{
m e}=P_{
m e}^{-1}$ を用いた。また、 $S_{
m e}(E)=(S_{
m e})_{ii'}$ は式 (3.9) で定義される磁気単位胞に対する S 行列である。

さて、式 (3.21) を数値計算により便利な形に変形しておこう。式 (3.17) から、 \mathbf{C}_2 と \mathbf{C}_4 はブロッホ定理

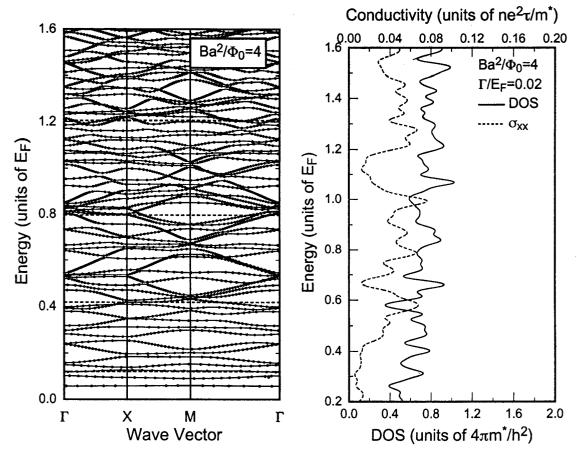
$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_{2}^{-} \\ \mathbf{C}_{4}^{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\mathrm{i}k_{y}Nb}P_{y}^{-1} \\ e^{\mathrm{i}k_{y}Nb}P_{y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{2}^{+} \\ \mathbf{C}_{4}^{-} \end{pmatrix}. \tag{3.22}$$

を満足する。式 (3.22) を式 (3.9) に代入して、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^- \\ \mathbf{C}_3^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^+ \\ \mathbf{C}_3^- \end{pmatrix}$$
(3.23)

を得る。ここで、行列 M は、

$$\begin{pmatrix}
M_{11} & M_{12} \\
M_{21} & M_{22}
\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}
S_{e11} & S_{e13} \\
S_{e31} & S_{e33}
\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}
S_{e12} & S_{e14} \\
S_{e32} & S_{e34}
\end{pmatrix} \times \begin{pmatrix}
-S_{e22} & e^{-ik_{y}Nb}P_{y}^{-1} - S_{e24} \\
e^{ik_{y}Nb}P_{y} - S_{e42} & -S_{e44}
\end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix}
S_{e21} & S_{e23} \\
S_{e41} & S_{e43}
\end{pmatrix}.$$
(3.24)



第 18 図 (右) 磁場 $Ba^2/\Phi_0=4$ でのエネルギーバンドの計算結果水平な点線は細線での各サブバンドの底を表している。

第 19 図 (左) 磁場 $Ba^2/\Phi_0=4$ での状態密度(実線)と電気伝導度(点線)のエネルギー依存性。状態密度は二次元電子の値 $4\pi m^*/h^2$ で、電気伝導度は $ne^2\tau/m^*$ で規格化した。ここで、n はアンチドットポテンシャルがない時の電子密度である。結果は幅 $\Gamma/E_{\rm F}=0.02$ のガウス分布で平均した。

である。さらに変形すると、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_3^+ \\ \mathbf{C}_3^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -M_{12} \\ 1 & -M_{22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} M_{11} & -1 \\ M_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^+ \\ \mathbf{C}_1^- \end{pmatrix}. \tag{3.25}$$

となる。式 (3.16) から、以下の固有値方程式を得る:

$$e^{ik_x a} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^+ \\ \mathbf{C}_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_x^{-1} & 0 \\ 0 & P_x^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -M_{12} \\ 1 & -M_{22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} M_{11} & -1 \\ M_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^+ \\ \mathbf{C}_1^- \end{pmatrix}. \tag{3.26}$$

よって、与えられた E,k_y に対して 式 (3.26) の固有値から k_x が得られる。同様にして、与えられた E,k_x に対して k_y を計算することができる。

通常の方法であるハミルトニアン行列の対角化では、磁気単位胞がもとの単位胞と同じときでさえ1000×1000 程度の大きさの行列を扱わなければならない。このために、磁気単位胞が拡大される一般の磁場に対しては計算が大変困難となる。一方、このS行列の方法では多くの減衰波を無視することができるので扱う行列サイズも小さく大変有効である。

3.2. 数值計算結果

前節で導入した交差点の S 行列は、格子模型において再帰的なグリーン関数の計算方法 (リカージョン法) [31] を用いて数値的に計算した。S 行列の方法の正当性を確かめるために直接ハミルトニアンを対角化して得たエネルギー分散との比較も行なった。以下では、式 (2.1)、(2.2) のモデルポテンシャルを用いる。このポテンシャルは第 16 図において、 $L_x=L_y=0$ 及び $W_x=W_y=a$ としたものに対応する。計算では $a/\lambda_F=4.31$, $U_0/E_F=8.4$, d/a=0.6, 及び $\beta=2$ とした [32]。

第 18 図 は磁場 $Ba^2/\Phi_0=4$ でのエネルギーバンドの計算結果である。点は全進行波と最も減衰の遅い減衰波一つをとり入れた S 行列の方法による結果で、実線は対角化による結果であり、両者はよく一致している。このことは、全進行波と減衰の遅い数個の減衰波で定義した S 行列で十分正確なエネルギーバンドが得られることを意味している。ただし、エネルギーバンドは大変複雑でありバンド構造だけから直接電子状態を議論することは難しい。

第19回は状態密度と電気伝導度のエネルギー依存性の結果である。電気伝導度の構造は 状態密度と部分的に対応しているものもあるが、全体として対応が明かでなく、状態密度の構 造のみで単純に電気伝導度を議論できないことが分かる。

3.3. 半古典的解析

a. トレース公式

前述のようにアンチドット格子は古典的にはカオス系であり、そのような系の電子状態を 半古典的に解析する方法としてトレース公式 [33,34] がしばしば用いられる。これによると、状態密度の量子補正は半古典的に古典周期軌道からの寄与の和で与えられる:

$$D(E) = D_0(E) + \sum_{\text{po}} D_{\text{osc}}^{\text{po}}(E),$$
 (3.27)

ここで、 $D_0(E)$ は平均の状態密度、 $D_{\text{osc}}^{\text{po}}(E)$ は状態密度の振動成分である。特定の周期軌道の寄与は、安定軌道に対してはデルタ関数型、

$$D_{\rm osc}^{\rm po}(E) = \frac{T}{\hbar} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(S_{\rm c}/\hbar - (m+1/2)v - 2n\pi) - \frac{1}{2\pi} \right], \tag{3.28}$$

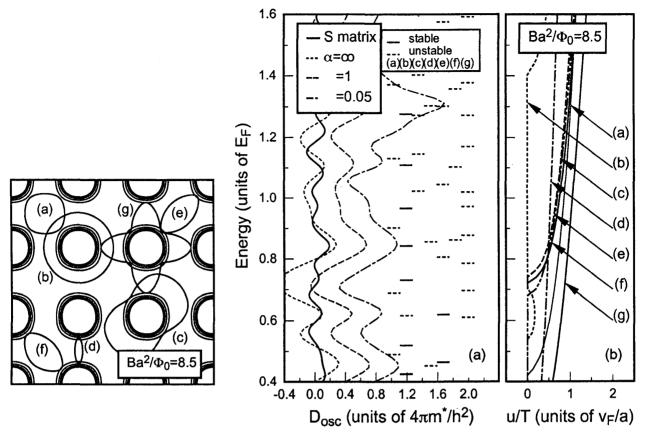
不安定軌道に対してはローレンツ型、

$$D_{\text{osc}}^{\text{po}}(E) = \frac{T}{\hbar} \sum_{m=0}^{\infty} (\pm 1)^m \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \frac{(2m+1)u/2}{[S_c/\hbar - 2\pi(\mu/4+n)]^2 + [(2m+1)u/2]^2} - \frac{1}{2\pi} \right], \quad (3.29)$$

となる。ここで、 S_c は作用、T は周期、v は安定性角度、u はリヤプノフ指数、 μ はマスロフ指数であり、 μ は整数である。また、安定軌道は u=0 、不安定軌道は $u\neq 0$ である。符合 生は周期軌道の近傍が双曲型か逆双曲型かできまる。整数 m は軌道に垂直な方向の量子数と解釈される [35]。安定軌道と不安定軌道の量子化条件は、整数 n と正の整数 m を用いて、

$$S_{c} = \begin{cases} 2\pi\hbar \left\{ n + \frac{1}{2\pi} \left(m + \frac{1}{2} \right) v \right\} & \text{安定軌道} \\ 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right) & \text{不安定軌道}, \end{cases}$$
(3.30)

となる。



第 20 図 (左) 整合条件 $2R_{\rm c}\sim a$ の磁場 $Ba^2/\Phi_0=8.5$ での周期軌道の例第 21 図 (右) 磁場 $Ba^2/\Phi_0=8.5$ での (a) 状態密度の振動部分。二次元電子の状態密度 $4\pi m^*/h^2$ で規格化してある。点線は $\alpha=\infty$ 、破線は $\alpha=1$ 、一点鎖線は $\alpha=0.05$ に対応し、各々は 0.3 づつずらしてある。(b) 単位時間当たりのリヤプノフ指数。単位は $v_{\rm F}/a$ 、ここで $v_{\rm F}$ はフェルミ速度。

量子数 (m,n) の準位 E_0 の周りで作用を展開し、関係式 $\partial S_{\rm c}/\partial E=T$ を用いると、量子数 (m,n) の寄与は

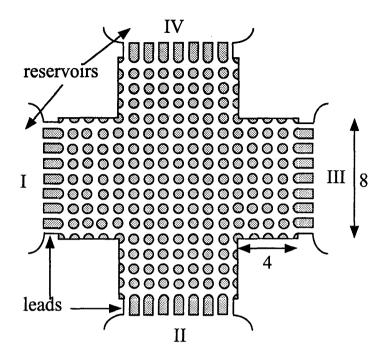
$$(\pm 1)^{m} \frac{1}{\pi} \frac{(2m+1)(u\hbar/2T)}{[\Delta E + S_{c}(E_{0})/T - 2\pi(\mu/4 + n)(\hbar/T)]^{2} + [(2m+1)(u\hbar/2T)]^{2}},$$
(3.31)

となる。ここで、 $\Delta E = E - E_0$ である。よって、単位時間あたりのリヤプノフ指数 u/T は量子化準位の幅に比例していることが分かる。

b. 数值計算結果

一般に周期の長い軌道はリヤプノフ指数 u が大きいため、状態密度の振動部分への寄与は小さいと考えられる。よって、ここでは**第 20** 図に示される短い軌道 (a)–(g) を考慮する [9]。**第 20** 図は磁場 $Ba^2/\Phi_0=8.5$ のときの周期軌道であるが、このとき $2R_c\sim a$ である。式 (3.28)、(3.29) 中の量子数 m $(=0,1,2,\cdots)$ をカットオフするために、因子 $e^{-\alpha m}$ を導入する [13]。

第 21(a) 図 は磁場 $Ba^2/\Phi_0=8.5$ において状態密度の振動部分を比較したものである。この磁場ではフェルミエネルギーで、整合条件 $2R_c=a$ がほぼ満足されている。短い横線は量子化準位を示しており、実線は安定軌道を、点線は不安定軌道を意味する。第 21(b) 図 は u/T を示しており、式 (3.31) から、状態密度の振動部分の幅を与える。状態密度は幅 $\Gamma/E_F=0.046$ のガウス分布関数で平均化したが、これは $u/T\geq 1.25$ の軌道の寄与を無視したことに対応する。



第22図図アンチドット格子の四端子モデルの摸式図端子の幅は8周期、長さは16周期である。

このとき、軌道 (a), (b), (c), (e) はあるエネルギー領域で u/T=0 となり安定になる。これら安定軌道の量子化準位は顕著なピークを作り、それらは量子論の結果とよく対応している。特にフェルミエネルギー付近は、アンチドットの周りを回る軌道 (b) が主に寄与しており、この結果はこれまでになされた報告と一致している [3,10,11]。なお、高次のモードを採り入れても結果はあまり変わらないが、量子論の結果とほぼ対応していたエネルギー $E/E_F=0.97$ と 1.1 のピークはずれている。

4. 輸送現象

この章では、アンチドット正方格子における磁気輸送現象を研究する。輸送現象において 重要であるアンチドットポテンシャルの不規則さにも注目する。

4.1. モデルと方法

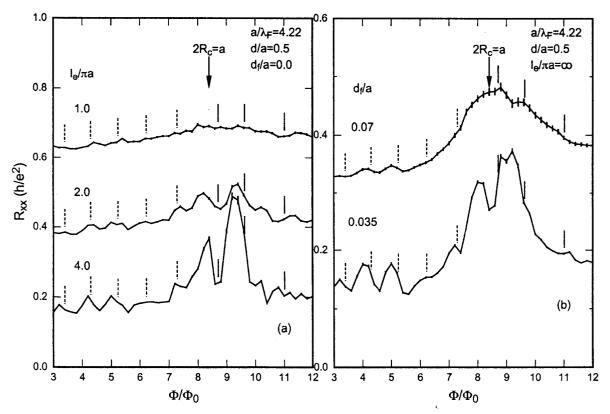
最初に、3 章と同様にアンチドット格子を量子交差点の二次元配列でモデル化する。全系は交差点での散乱を記述する S 行列によって特徴付けられる [12,36]。第 22 図に示すアンチドット格子の四端子モデルの輸送係数を、ビュッティカー-ランダウアー公式 [37,38] によって計算した [39]。この章では、次のようなアンチドット格子のモデルポテンシャル $V(\mathbf{r})$ を用いた。

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i} V_{i}(\mathbf{r}),$$

$$V_{i}(\mathbf{r}) = E_{F} \left(\frac{d_{i}/2 + \Delta - |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i}|}{\Delta} \right)^{2} \theta(d_{i}/2 + \Delta - |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i}|).$$
(4.1)

ここで、 d_i , \mathbf{R}_i はそれぞれアンチドット i の直径と中心の位置であり、 $\theta(t)$ はステップ関数で t>0 に対しては $\theta(t)=1$ 、t<0 に対しては $\theta(t)=0$ で定義される。パラメター Δ はポテンシャル勾配のパラメターであり、以下では $\Delta/a=0.24$ にとる。

一方、不規則ポテンシャルとして、短距離の不純物ポテンシャルとアンチドットの直径の 不規則さの両方を考慮する [14,15]。前者はアンチドットポテンシャルがない時の平均自由行程



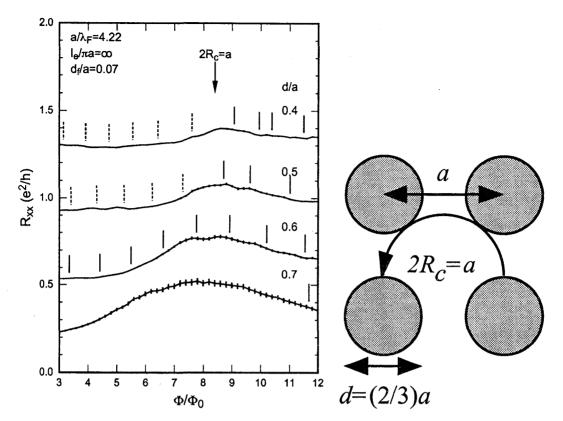
第 23 図 (a) 短距離不純物散乱の場合 $(d_{\rm f}/a=0.0)$ と (b) 不規則なアンチドットによる散乱の場合 $(l_{\rm e}/\pi a=\infty)$ の縦抵抗の磁場依存性抵抗はそれぞれ (a) の $l_{\rm e}/\pi a=2$ と 1 に対して、0.2 と 0.4、 (b) の $d_{\rm f}/a=0.07$ に対して 0.2 だけ原点をずらしている。横軸は単位胞を貫く磁束 Φ を磁束量子 Φ_0 で規格化した値である。

 l_e で、後者はアンチドットの直径の標準偏差 $d_f = \sqrt{\langle (d-\langle d \rangle)^2 \rangle}$ で特徴づけられる。ここで、 $\langle \cdots \rangle$ は異なるアンチドットに関する平均を意味する。なお、試料平均はレジスタンス、コンダクタンス、遷移確率に関してとったが、結果は試料平均のとり方によらなかったので、以下では遷移確率に関する平均の結果のみを示す。

4.2. 数值計算結果

第 23(a) 図は $d_f/a=0$ のときに l_e を変えて、縦抵抗の磁場依存性を計算した結果である。矢印は整合ピークが現れる整合条件 $2R_c=a$ が満たされる磁場を示している。 $l_e/\pi a=2,4$ の結果では、整合ピークとその周りに AB 効果型の振動が現れている。この振動は一つのアンチドットの周りを回る軌道の量子化によるものと示唆されている [3]。実線と破線の縦線はそれぞれ、一つのアンチドットの周りを回る安定軌道と不安定軌道(第 20 図の軌道 (b))の量子化準位がフェルミエネルギーをよぎる位置を示しているが、AB 効果型振動はこの量子化準位とよく対応していることが分かる。実際の系の l_e は $l_e/\pi a>10$ であり、計算結果の中で最も長い場合 $l_e/\pi a=4$ よりもさらに長いが、数値計算結果で得た AB 効果型振動の振幅は実験結果に比べて大きい。

第 23(b) 図は短距離不純物がない場合に、 $d_{\rm f}$ を変えて縦抵抗の磁場依存性を計算したものである。整合ピークは第 23(a) 図に比べて高く鋭く、実験結果 [2] により対応している。また、 $d_{\rm f}/a\lesssim 0.07$ に対する AB 効果型振動の振幅は実験結果とよく対応しており、不純物散乱の場合に比べてより現実的であるといえる。また、 $d_{\rm f}/a\sim 0.07$ という値も AAS 振動の数値計算結果と同程度であり矛盾しない [14,15]。



第 24 図 不規則なアンチドットによる散乱の場合 $(l_{\rm e}/\pi a=\infty, d_{\rm f}/a=0.07, a/\lambda_{\rm F}=4.22$)の縦抵抗の磁場依存性。

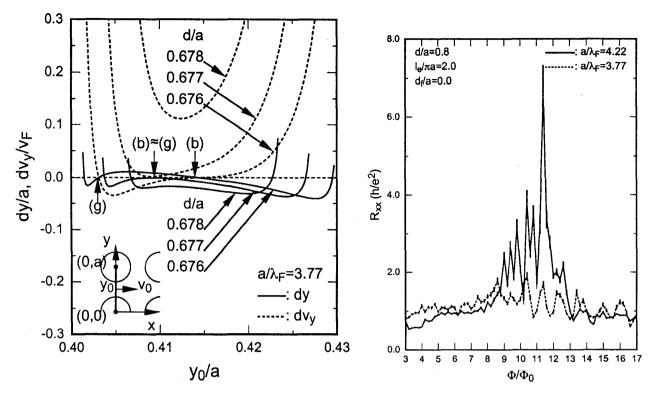
第25図 正方格子における基本整合ピークを生じる拡散軌道の摸式図。

第 24 図はアンチドットの不規則さがある場合 $(d_f/a=0.07)$ に様々な d/a に対して、縦抵抗の磁場依存性を計算した結果である。 $0.4 \le d/a \le 0.6$ のとき、抵抗は整合条件 $2R_c=a$ 付近の磁場、即ち $\Phi/\Phi_0=8.4$ で幅の広いピークを示すが、d/a=0.7 ではほとんど消えている。前述のように整合ピークは拡散軌道によって生じるが、第 25 図で示したように、矩形ポテンシャルの場合には $2R_c=a$ での拡散軌道はおよそ $d/a \ge 2/3 \approx 0.67$ で消失する。このために、整合ピークが d/a=0.7 では消失すると考えられる。

これらの整合ピークに付随して AB 効果型振動が現われている。振動は d/a=0.4 では弱く、d/a=0.5 と 0.6 では強く、d/a=0.7 ではほとんど消えている。また、振動の山と谷は正確に周期軌道の量子化準位と一致している訳ではない。

短距離不純物散乱のみの場合に $0.1 < d/a \le 0.6$ の範囲で SCBA によって AB 効果型振動が調べられた結果では [40]、 $d/a \sim 0.4$ を境に定性的な変化が生じる。d/a < 0.4 では、振動はシュブニコフドハース振動的であり、抵抗のピークは状態密度のピークに対応するが、d/a > 0.4 ではこの対応関係は曖昧になり、時として抵抗の振動は状態密度と逆位相になる。ここで示した AB 効果型振動と周期軌道の量子化準位との関係はこの振舞いとよく一致している。また、 $0.4 \le d/a \le 0.6$ における振動の振幅の依存性もよく対応していることから、AB 効果型振動が局在効果に由来している可能性はないといえる。

d/a=0.7 で AB 効果型振動が消失する理由として二つ考えられる。一つは整合ピークの原因となる拡散軌道の消失である。前述のように、正方格子では $d/a>2/3\approx0.67$ で拡散軌道は消失する。この場合 AB 効果型振動は拡散軌道の周期軌道による摂動(2 章の機構 (ii) と (iii))によって生じていることを示唆している。もう一つは周期軌道そのものの消失である。このことを見るために第 26 図は、磁場 $2R_c=a$ で位置と速度の y 成分 (y と v_y) の初期値からのずれ (dy と dv_y) を初期値の y 座標 y_0 の関数で表したものである。位相空間における初期値 (x_0,y_0,v_{x_0},v_{y_0}) は $(x_0,y_0,v_{x_0},v_{y_0})=(0,y_0,v_{x_0},0)$ とした。ここで、 $d/2\leq y_0\leq a-d/2$ であ



第 26 図 (左) 磁場 $2R_c = a$ において、位置と速度の y 成分の初期値からのずれ (dy と dv_y) を初期値の y 座標 y_0 の関数として示したもの。初期値 $(x_0, y_0, v_{x0}, v_{y0})$ は挿入図に示すように $(x_0, y_0, v_{x0}, v_{y0}) = (0, y_0, v_{x0}, 0)$ とした。dy と dv_y は電子が再び (0, d/2) と (0, a-d/2) を結ぶ線上を通過した時に定義する。

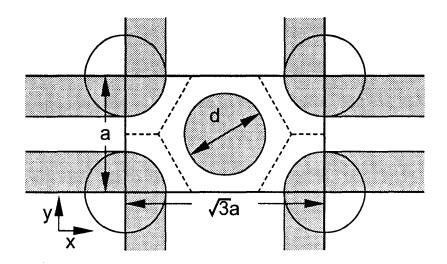
第 27 図 (右) 短距離不純物散乱の場合 $(l_e/\pi a=2, d_f/a=0)$ の大きなアスペクト比 d/a=0.8 に対する縦抵抗の磁場依存性。実線は $a/\lambda_F=4.22$ 、点線は $a/\lambda_F=3.77$ 。

る。 $\mathrm{d}y$ と $\mathrm{d}v_y$ は電子が再び (0,d/2) と (0,a-d/2) を結ぶ線上を通過した時に定義する。よって、 $\mathrm{d}y$ と $\mathrm{d}v_y$ が同時にゼロになる y_0 が周期軌道を与える。d/a=0.676 では (b) と (g) の二つの矢印で示される二つの周期軌道が存在し、それらは**第 20 図**の軌道 (b) と (g) に対応している。周期軌道 (b) (g) は d/a=0.677 で合体、消失し、d/a=0.678 では、もはやこの初期値の範囲に周期軌道は存在しないことがわかる。

d/a をさらに大きくし d/a=0.8 としたときの結果が、第 27 図である。この場合振動は整合条件 $2R_c$ =a の強磁場側で顕著であり、フェルミ波数 a/λ_F によらずおよそ Φ/Φ_0 =整数 でピークになる。d/a を大きくするとアンチドット格子は強束縛模型に近づくが、強束縛模型ではバタフライスペクトルによって、バンド幅もしくは群速度が正確に磁束量子の周期で振動する。d/a=0.8 で得られた量子振動はこのバタフライスペクトルによるもの(2 章の機構 (iv))と考えられる。

5. アンダーソン局在

2章で述べたようにアンチドット三角格子では絶縁体-量子ホール液体転移が観測される。 実験結果によれば抵抗の温度依存性はモット型の可変領域ホッピング伝導に従っている。さら に、弱磁場で抵抗はアンチドット格子における AAS 振動と同周期で振動する。これは局在長 の振動に由来すると考えられている。この章ではアンチドット三角格子におけるアンダーソン 局在を、サウレス数の方法を用いて数値的に研究した。



第28 図 アンチドット三角格子に対する量子交差点。交差点の面積は、三角格子の単位胞の二倍である。

5.1. モデルと方法

アンチドット三角格子のモデルポテンシャルとして、式 (2.1) の $F(\mathbf{r})$ として以下 [14,15] を用いる。

$$F(\mathbf{r}) = \left| \cos \left(\frac{\pi \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{r}}{a^2} \right) \cos \left(\frac{\pi \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{r}}{a^2} \right) \cos \left(\frac{\pi (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{r}}{a^2} \right) \right|^{4\beta/3}, \tag{5.1}$$

ここで a は格子定数、 $\mathbf{a_1} = (\sqrt{3}a/2, a/2)$ 、 $\mathbf{a_2} = (0, a)$ である。ポテンシャル勾配のパラメター β は $\beta = 1$ にとる。アンチドットの直径 a は隣会うドットを結ぶ線上で定義する。また不規則 さに関しては短距離不純物とアンチドットの直径の不規則さの両方を考慮する。

さて、アンダーソン局在を数値的に研究するためにサウレス数の方法 [41,42] がよく用いられるが、この方法は磁場中においても有効である [43]。スケーリング理論により、サウレス数 g(L) はサイズ L のシステムをつないだ時の波動関数の結合の強さ V(L) とエネルギー差W(L) の比、つまり g(L)=V(L)/W(L) で定義される無次元のコンダクタンスである。本論文では V(L) をエネルギーバンドの曲率 $\overline{\partial^2 E/\partial k^2}$ によって、W(L) を平均のエネルギー間隔 $D(E)^{-1}$ で評価する:

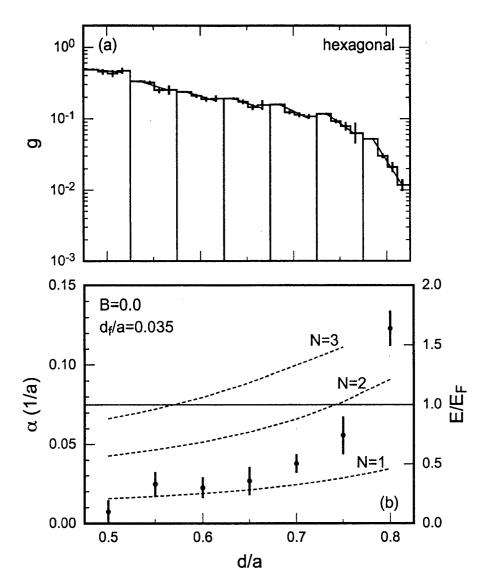
$$g(L) = \frac{\overline{\partial^2 E}}{\partial k^2} D(E). \tag{5.2}$$

三角格子を第 28 図の交差点の二次元配列でモデル化し、エネルギーバンドは 2 章で述べた S 行列の方法 [12,36] で計算した。この方法では、与えられた $k_y(k_x)$ に対して等エネルギー線上の $k_x(k_y)$ が求まる。一つの試料に対してエネルギー分散の曲率をいくつかの k 点の平均で見積もった。

計算は $2n\times n$ のシステムに対して実行する。ここで、n=2, 4, 6, 8 である。局在長の逆数 α はサウレス数のシステムサイズ依存性を $g(L)=g(0)\exp(-\alpha L)$ でフィッティングして計算した。ここで、システムサイズは L=2na で定義する。実験での電子密度 $n=1.8\times 10^{11}~{\rm cm}^{-2}$ [7] と同程度になるように、 $a/\lambda_{\rm F}=3.77$ とする。これは、a=2000 Å のときの $n=2.2\times 10^{11}~{\rm cm}^{-2}$ に対応する。

5.2. 数值計算結果

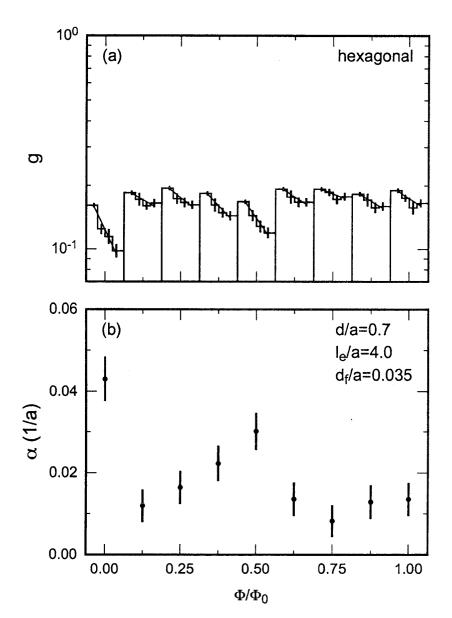
第 29 図はゼロ磁場 $l_{\rm e}/\pi a=4$, $d_{\rm f}/a=0.035$ における (a) g と (b) α の d/a 依存性の計算結果である。局在長は d/a=0.6 では約 $\alpha^{-1}\sim 50a$ であるが、d/a=0.8 のときには約 $\alpha^{-1}\sim 10a$ まで短くなり、局在がアスペクト比に大きく依存することがわかる。



第 29 図 ゼロ磁場における (a) サウレス数 g と (b) 局在長の逆数 α のアスペクト比 d/a 依存性。(a) 図において、 $0.475 \le d/a \le 0.525$ のヒストグラムは d/a=0.5 のサウレス数のシステムサイズ依存性を示す。システムサイズは左から L=4a,8a,12a,16a である。同様に、 $0.525 \le d/a \le 0.575,0.575 \le d/a \le 0.625,0.625 \le d/a \le 0.675,0.675 \le d/a \le 0.825$ のヒストグラムはそれぞれ d/a=0.55,0.6,0.65,0.7,0.75,0.8 のサウレス数のシステムサイズ依存性を示す。(b) 図における水平な実線はフェルミエネルギーを表し、点線は隣会うアンチドット間のチャネルにおける各サブバンドの底を表す。

第 30 図は d/a=0.7, $l_{\rm e}/a=4$, $d_{\rm f}/a=0.035$ の場合の磁場依存性の計算結果である。各システムサイズに対するサウレス数が AAS 振動と同周期 $\Phi/\Phi_0=1/2$ で振動することが分かる。また局在長の逆数も同じ周期で振動するが、これは実験で得られた結果と一致している [7]。局在長はおよそ a の数十倍のオーダーである。

ところで、局在は系の対称性に大変敏感である。アンチドット格子を格子模型と見なせば、系は磁束が $\Phi=n\Phi_0/2$ (n は整数) のときには直交集合に、それ以外ではユニタリー集合に属しているので、局在長の $\Phi_0/2$ 周期の振動が期待される。しかしながら、最大エントロピー仮説に基づいた格子模型の局在長の数値計算によれば、 Φ_0 振動が支配的である結果が得られて



第 30 図 d/a=0.7, $l_{\rm e}/a=4$, $d_{\rm f}/a=0.035$ のときの (a) サウレス数と (b) 局在長の逆数の磁場依存性

いる [44]。これは、格子模型では Φ_0 周期のバタフライスペクトル構造がより強く現われるためと考えられる。一方、アンチドット格子において弱磁場で局在長 $\Phi_0/2$ 周期の振動が現われるのは、複雑に重なりあったバンド構造のために Φ_0 周期のバタフライスペクトルの寄与が消された結果だと考えられる。

なお、実験結果では、ゼロ時場での局在長は $\alpha^{-1} \sim a$ と見積もられているが、数値計算結果では d/a=0.8 でも $\alpha^{-1} \sim 10a$ であり定量的には一致していない。原因としてはモデルポテンシャルと現実のポテシャルとの違いなどが考えられる。実際、局在の強さはアンチドット間のチャネルに大きく依存するために、現実のポテンシャルではチャネルがより狭ければ局在は強くなる可能性がある。

6. まとめ

磁場中のアンチドット格子の電子状態、輸送現象、アンダーソン局在を、S 行列を用いた 新しい手法により数値的に研究した。

- 2章では整合ピーク、アハロノフ・ボーム (AB) 効果型振動、アルトシュラー・アロノフ・スピバーク (AAS) 振動、アンダーソン局在といったアンチドット格子における輸送現象を概観した。多くの研究の結果、これらのいくつかについては理解されている。例えば、整合ピークは磁気フォーカシングによる電子の拡散の増大によって説明される。さらに、AAS 振動の研究により輸送現象におけるアンチドットポテンシャルの不規則さの重要性が指摘された。しかしながら、依然として未解決の問題が多く残されている。
- 3章ではアンチドット正方格子における電子状態の計算を行なった。S 行列を用いた新しい数値計算方法によって、計算を大幅に簡単化することができた。量子力学の計算結果を半古典論に基づき解析した結果、整合条件 $2R_c=a$ が満たされる磁場の付近では、アンチドットの周りを回る周期軌道が主に状態密度の構造を決めており、これまでの結果と一致する結果を得た。これは、この軌道の安定性が高いことに起因している。
- 4章では、アンチドット正方格子における磁気輸送現象について調べた。整合ピークと AB 効果型振動はアスペクト比によってその振舞いが変化した。 $0.4 \lesssim d/a \lesssim 0.6$ で現われる AB 効果型振動の詳細な機構は明かではないが、拡散軌道と周期軌道との相互作用、もしくは周期軌道自身による状態密度の構造によって生じていると考えられる。 $d/a \sim 0.7$ で AB 効果型振動が消失するのは拡散軌道と周期軌道の消失によるものと考えられる。さらに $d/a \gtrsim 0.8$ で現われる AB 効果型振動はバタフライスペクトルによるものと考えられる。
- 5章ではアンチドット三角格子におけるアンダーソン局在をサウレス数の方法を用いて調べた。局在長の計算結果は実験で見積もられた値の十倍程度も大きく、定量的な違いがあるが、ゼロ磁場付近ではサウレス数と局在長が AAS 振動と同周期で振動するという実験を再現する結果が得られた。

謝辞

この研究は安藤恒也教授との共同研究によるものです。安藤恒也教授には多くの御指導、御助言を頂きました。石坂智氏、中西毅氏には多くの有益な議論をして頂きました。上田正仁助教授、斉藤理一郎助教授、Nguyen Ai Viet 教授、Nguyen Hong Shon 氏、井下猛氏、田村浩之氏、安食博志氏、木野日織氏、浅野建一氏、世利拓司氏、松村啓氏の皆様にはセミナー等を通じて議論をして頂きました。また、丸山志津枝女史には研究生活を通して御助力頂きました。この場を借りて、感謝の意を表します。

参考文献

- [1] T. Ando, A.B.Fowler, and F.Stern, Rev. Mod. Phys. 54 (1982) 437.
- [2] D.Weiss, M.L.Roukes, A.Menschig, P.Grambow, K.von Klitzing, and G. Weimann, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 2790.
- [3] D.Weiss, K.Richter, A.Menschig, R.Bergmann, H.Schweizer, K. von Klitzing, and G. Weimann, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 4118.
- [4] F.Nihey and K.Nakamura, Physica B 184 (1993) 398.
- [5] K. Nakamura, S. Ishizaka, and F. Nihey, Physica B 197 (1994) 144.
- [6] F.Nihey, S.W.Hwang, and K.Nakamura, Phys. Rev. B 51 (1995) 4649.
- [7] F.Nihey, M.A.Kastner, and K.Nakamura, Phys. Rev. B 55 (1997) 4085.
- [8] T. Ando, S.Uryu, S.Ishizaka, and T.Nakanishi, CHAOS, SOLITON, & FRACTALS 8 (1997) 1057.
- [9] K. Richter, Europhys. Lett. 29 (1995) 7.
- [10] G. Hackenbroich and F. von Oppen, Europhys. Lett. 29 (1995) 151.
- [11] S. Ishizaka, F. Nihey, K. Nakamura, J. Sone, and T. Ando, Phys. Rev. B 51 (1995) 9881.
- [12] S. Uryu and T. Ando, Phys. Rev. B 53 (1996) 13613.
- [13] S. Uryu and T. Ando, Physica B 227 (1996) 138.
- [14] T. Nakanishi and T. Ando, Phys. Rev. B 54 (1996) 6021.
- [15] T. Nakanishi and T. Ando, Physica B 227 (1996) 127.
- [16] A. Kumar, S.E. Laux, and F. Stern, Phys. Rev. B 42 (1990) 5166.
- [17] T. Suzuki and T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. 62 (1993) 2986.
- [18] R. Fleischmann, T. Geisel, and R. Ketzmerick, Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 1367.
- [19] E.M.Baskin, G.M.Gusev, Z.D.Kvon, A.G. Pogosov, and M.V. Entin, Pis'ma Zh.Eksp. Teor. Fiz 55 (1992) 649 [JETP Lett. 55 (1992) 678].
- [20] T.Nagao, J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 4097.
- [21] K.Tsukagoshi, M.Haraguchi, S.Takaoka, and K.Murase, J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 811.
- [22] R.Schuster, K, Ensslin, J.P.Kotthaus, M.Holland, and C.Stanley, Phys. Rev. B 47 (1993) 6843.
- [23] R.Schuster, G. Ernst, K, Ennslin, M. Entin, M. Holland, G. Böhm, and W. Klein, Phys. Rev. B 49 (1994) 8510.
- [24] K.Tsukagoshi, T.Nagao, M.Haraguchi, S.Takaoka, K.Murase, and K.Gamo, J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 1914.
- [25] K.Tsukagoshi, S.Wakayama, K.Oto, S.Takaoka, and K.Murase, Phys. Rev. B 52 (1995) 8344.
- [26] W. Lu, Phys. Rev. B 54 (1996) 8049.
- [27] M. Wilkinson, J. Phys. A 20 (1987) 2415.
- [28] D.R. Hofstadter, Phys. Rev. B 14 (1976) 2239.
- [29] R. B. S. Oakshott and A. MacKinnon, J. Phys: Condens. Matter 6 (1994) 1519.
- [30] B.L. Al'tshuler, A.G. Aronov, and B.Z. Spivak, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 33 (1981) 101 [JETP Lett. 33 (1981) 94].
- [31] T. Ando, Phys. Rev. B 44 (1991) 8017.

- [32] パラメター $a/\lambda_{\rm F}=4.31$ 及び d/a=0.6 に対して、 $\beta=2$ は大き過ぎ、実際には $\beta=1$ 程度 であるが、電子状態は β には敏感ではないと考えられる。
- [33] M. C. Gutzwiller, Chaos in Classical and Quantum Mechanics (Springer, New York, 1990).
- [34] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. 8 (1967) 1979; 10 (1969) 1004; 11 (1970) 1791; 12 (1971) 343.
- [35] W. H. Miller, J. Chem. Phys. **63** (1975) 996.
- [36] S. Uryu and T. Ando, Jpn. J. Appl. Phys. 34 (1995) 4295.
- [37] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1 (1957) 223.
- [38] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 1761.
- [39] S. Uryu and T. Ando, Proceedings of 23rd International Conference on Physics of Semiconductors (World Scientific, Singapore, 1996), p. 1505.
- [40] S. Ishizaka and T. Ando, Phys. Rev. B (to be published).
- [41] J. T. Edwards and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. 5 (1972) 807.
- [42] D.C. Licciardello and D.J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. 8 (1975) 4157.
- [43] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 1740; **53** (1984) 3101; **53** (1984) 3126.
- [44] J.L.Pichard, M.Sanquer, K.Slevin, and P.Debray, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 1812.