

古典・量子混合数値解析による薄膜中の電流密度  
Classical and Quantum Analysis of Current Density in Thin Film

○大貫進一郎<sup>1</sup>, 竹内嵩<sup>2</sup>, 佐甲徳栄<sup>3</sup>, 芦澤好人<sup>4</sup>, 中川活二<sup>4</sup>

\*Shinichiro Ohnuki<sup>1</sup>, Takashi Takeuchi<sup>2</sup>, Sako Tokuei<sup>3</sup>, Yoshito Ashizawa<sup>4</sup>, Katsuji Nakagawa<sup>4</sup>

Abstract: New optical devices using both light and quantum effects have attracted attention and play an important role in nanotechnology. To design such devices, both properties of electromagnetic fields and wave functions must be studied. In this paper, we propose a novel coupled scheme of Maxwell and Schrödinger equations by using the length gauge and analyze current density in thin film.

1. まえがき

日本大学 N. 研究プロジェクト量子・理論計算班では、超短時間の光と物質の相互作用を高精度に解析することを目的として、古典・量子混合数値解析法を開発している<sup>[1]</sup>。本手法では、光の支配方程式に Maxwell 方程式、物質の支配方程式に Schrödinger 方程式を用いて混合数値解析を実現する。この新規解法を適用し、N. 研究プロジェクト情報班の超高速・超高密度磁気記録<sup>[2,3]</sup>などへの応用を目指している。

本報告では、古典・量子混合数値解析により薄膜中の電流密度を計算し、解析結果の信頼性や計算時間について検討する。

2. 解析法

光を波動として扱う Maxwell 方程式は次式で与えられる。

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J} \quad (2)$$

ここで、 $\mu_0$  と  $\varepsilon_0$  は真空中の透磁率と誘電率、 $\mathbf{J}$  は電流密度、 $\mathbf{E}$  は電界、 $\mathbf{H}$  は磁界を示す。式(1)および式(2)に有限差分を適用して、電界および磁界の時間応答を求める<sup>[4]</sup>。

電磁場中の電子に対する Schrödinger 方程式は次式により示される。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_A \psi = \left\{ \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 + q\phi + V \right\} \psi \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{A}$  はベクトルポテンシャル、 $\phi$  はスカラーポテンシャルである。一方、長さゲージを用いた電磁場中の電子に対する Schrödinger 方程式は次式で与えられる。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_L \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + V \right) \psi \quad (4)$$

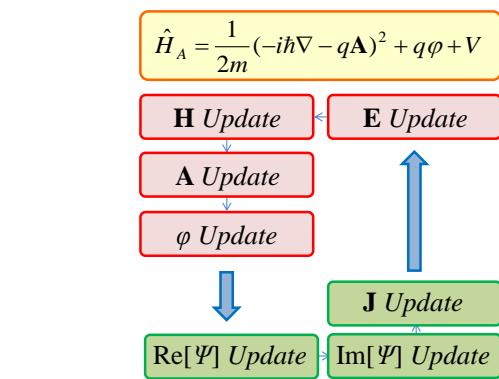


Figure 1. Coupled algorithm using  $\hat{H}_A$ .

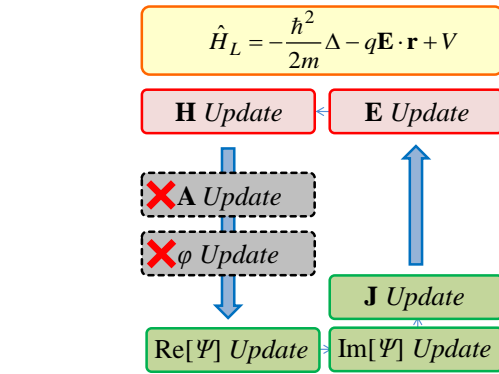


Figure 2. Coupled algorithm using  $\hat{H}_L$ .

式(3)あるいは式(4)の Schrödinger 方程式に有限差分を適用して、波動関数  $\psi$  の時間応答を求める<sup>[5]</sup>。

Figure 1 および Figure 2 に、Maxwell 方程式と Schrödinger 方程式の混合数値解析用アルゴリズムを示す<sup>[1]</sup>。Figure 2 の  $\hat{H}_L$  を用いたアルゴリズムでは、ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  とスカラーポテンシャル  $\phi$  の計算が不要となり、Maxwell 方程式から求めた電磁界  $\mathbf{E}$  と  $\mathbf{H}$  を波動関数  $\psi$  の計算に直接適用できる。

電子の平均的な影響を検討するため、電流密度  $\mathbf{J}$  は

1 : 日大理工・教員 電気 2 : 日大理工・院 電気 3 : 日大理工・教員 一般物理 4 : 日大理工・教員 電子

次式により評価した.

$$\mathbf{J} = qN \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{\mathbf{v}} \psi dV \quad (5)$$

### 3. 解析結果

Figure 3 に示す  $y$ - $z$  平面に対し一様な薄膜に,  $E_y$  成分および  $H_z$  成分を持つ平面波が入射した場合の解析を行う. 薄膜内の電子は  $y$  軸方向のみに自由度を持ち, 次式の調和振動子のポテンシャルに拘束されていると仮定する.

$$V(y) = \frac{m\omega_L^2 y^2}{2} \quad (6)$$

Figure 4 は, 薄膜中における電流密度の時間変化を示す. ここで, 入射波は電流源  $\mathbf{J}_e^{(i)}$  および磁流源  $\mathbf{J}_m^{(i)}$  により励振される.

$$\mathbf{J}_e^{(i)} = \frac{J_0}{\Delta x \sqrt{\mu_0 / \epsilon_0}} \cos\{\omega_L(t_0 - t)\} \exp\left\{\left(\frac{t_0 - t}{\sigma}\right)^2\right\} \hat{\mathbf{a}}_y \quad (7)$$

$$\mathbf{J}_m^{(i)} = \frac{J_0}{\Delta x (\mu_0 / \epsilon_0)} \cos\{\omega_L(t_0 - t)\} \exp\left\{\left(\frac{t_0 - t}{\sigma}\right)^2\right\} \hat{\mathbf{a}}_z \quad (8)$$

$\hat{H}_A$  および  $\hat{H}_L$  を用いた混合数値解析の結果は, 図上で完全に一致している事が確認できる.

Figure 5 は, 混合数値解析の計算時間を示す.  $\hat{H}_L$  を用いたアルゴリズムでは, 計算時間が  $\hat{H}_A$  を用いた場合の半分程度となる. これは, 波動関数  $\psi$  を求める際にベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  とスカラーポテンシャル  $\phi$  が不要となり, 演算回数を低減できるためである.

### 4. まとめ

本文では, Maxwell 方程式と Schrödinger 方程式を時間領域において同時解析する古典・量子混合数値解析法を開発した. 長さゲージを利用することで, より簡潔なアルゴリズムを実現し, 計算コストの低減を可能とした.

### 5. 謝辞

本研究の一部は, 日本大学学術研究戦略プロジェクト, 科研費基盤研究(C)No.22560349, 及びカシオ科学振興財団研究助成の援助を受けて行われた.

### 6. 参考文献

- [1] T. Takeuchi, S. Ohnuki, T. Sako, Y. Ashizawa, K. Nakagawa, M. Tanaka, and W. C. Chew : Proc. 2012 IEEE Int. Symp. Antennas and Propagat., IF22.8, 2012.
- [2] C. D. Stanciu, F. Hansteen, A. V. Kimel, A. Kirilyuk, A.

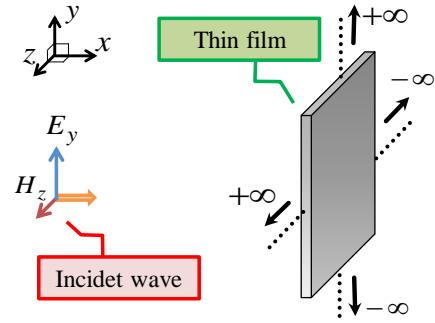


Figure 3. Coordinate systems of the thin film.

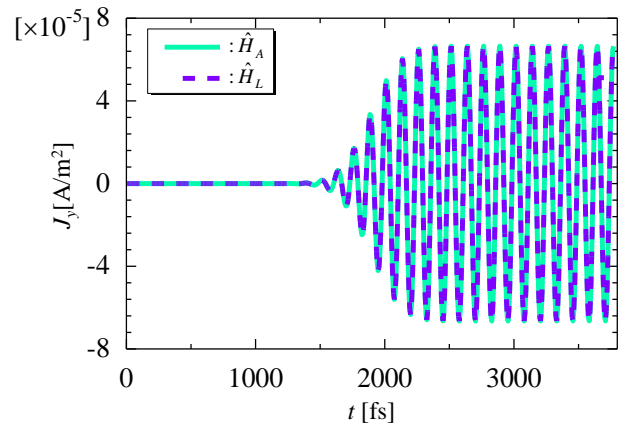


Figure 4. Time response of the current density.

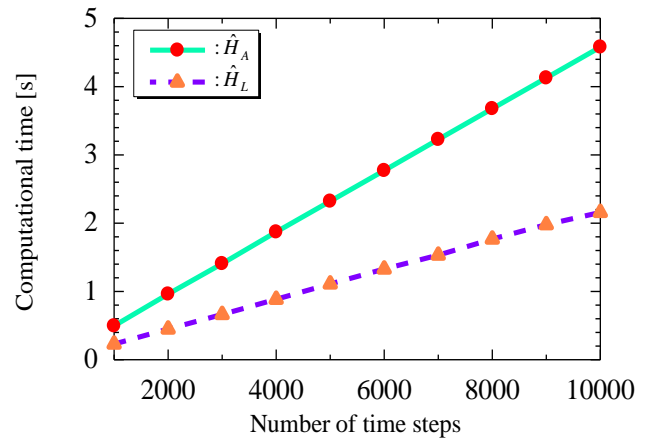


Figure 5. Computational time of the proposed methods.

- Tsukamoto, A. Itoh, and Th. Rasing, Physical Review Letters, vol.99, no.4, 047601, 2007.
- [3] K. Nakagawa, Y. Ashizawa, S. Ohnuki, A. Itoh, and A. Tsukamoto, Journal of Applied Physics, vol.109, no.7, 07B735, 2011.
- [4] A. Taflove, and S. C. Hagness : Computational Electrodynamics The Finite-Difference Time-Domain, Method Third Edition, Boston: Artech House, 2005.
- [5] A. Soriano, E. A. Navarro, J. A. Porti, and V. Such : Journal of Applied Physics, Vol.95, No.12, pp.8011-8018, 2004.