ジョセフソン接合の量子化エネルギー準位 その2(完)(pdf)

2020.6.19 鈴木 実

4 ジョセフソン接合の仮想粒子運動の量子化

前節で示したように, 十分に不足減衰であるジョセフソン接合においてはジョセフソン電流はほとんど減衰 せず交流電流が流れ続ける.これは仮想粒子で考えるとポテンシャルの谷でエネルギーの散逸なしに自由に振 動運動を続けることに相当する.もし, 仮想粒子の質量が十分小さく, 外力が働かず熱ゆらぎのない微小な空 間で自由に運動するならば, つまりエネルギーも十分小さければ, この仮想粒子のエネルギーは量子化される. これは, ジョセフソン接合では, C が十分小さく, 接合に流れる電流が十分小さく, かつ動作温度が十分低温 であればジョセフソン接合に流れる電流の振幅は量子化されることを意味する.それではジョセフソン接合の どのような運動が量子化されるのか, これをまず詳しく見てみよう.

4.1 ジョセフソン接合の振動運動と最大エネルギー

4.1.1 外部電流がある場合

ジョセフソン接合の位相の振動はジョセフソン接合に外部から電流 α を流すことにより励起される.図2 の傾斜した洗濯板ポテンシャルで考えると, $\alpha > 0$ のときに θ の正の方向に低くなるので, $\tau = 0$ のときに, $\theta = 0$ の点から初速度 $d\theta/d\tau = 0$ で運動を始める場合に相当する.運動を開始した位相は,位置エネルギーを 運動エネルギーに変えてポテンシャルの極小点に到達し,その後も減衰がほとんどないため極小点における運 動エネルギーに相当する位相の点まで運動して止まり,それ以降は逆方向に運動して振動運動をする.

以上のことを図 1 の回路を用いて具体的に $\alpha = 0.4$ の場合を考えよう.初期状態として $d\theta/d\tau = 0$ である から V = 0 である. $\tau = 0$ で C に $\alpha = 0.4$ の電流が流れ始める. $I_{\rm C}$ の電流が流れることにより C に電荷が蓄積され,それとともに電圧 V が発生し電荷の増加とともに V も増加する. この V により,式 (??) の関係から 位相 θ が 0 から増加し始め, $\theta > 0$ となる. θ が 0 より大きくなるのでジョセフソン電流 $I_{\rm J} = I_{\rm c} \sin \theta$ が流れ始める. この初期状態からの $I_{\rm J}$, $I_{\rm C}$, V,および位相 θ の時間的な推移は図 10 (上)の 0 $\leq \tau < 1$ の範囲に図示 されている.

I がジョセフソン接合に分流されるにつれて $I_{\rm C}$ は減少し, $I_{\rm C} = 0$ となった時に C に蓄積される電荷の増加 が止まり電圧は最大となる.そのときでも V > 0 であるから θ は $\theta < \pi/2$ の範囲で増加し続ける.したがって, $I_{\rm J}$ も増加し続ける.その結果, $I_{\rm C}$ は反対方向に流れ始める. $I_{\rm J}$ が I を超えて流れ続ける間, $I_{\rm C}$ は負の方向に流 れて電荷の蓄積が減少し, 0 になったときに V = 0, つまり $d\theta/dt = 0$ となり θ は最大になる.その時点でも $I_{\rm C}$ は負の方向に流れて蓄積電荷は負になり, したがって V < 0となるので, θ は減少し始める. $0 \le \theta < \pi/2$ であるから,今度は $I_{\rm J}$ が減り始め, $I_{\rm C}$ も 0 に向かって絶対値が減少することになる.以上のようにして,再 び初期状態に戻る.図 10 (上) に示すように α が小さい場合は振動波形は正弦波に近い.

以上の電流のふるまいは LC 共振回路の振動と同じである.前節で述べたようにジョセフソン接合はインダ クタンス L と等価であるから,インダクタンスと考えて図 10 の時間的推移を解釈することもできる.ステッ プ電流に対して最初は C に流れてそこに蓄積された電荷により V が発生する.この電圧により L に電流が流 れ始める.V が高くなると L に流れる電流も増えるため C に流れる電流は少しずつ減少し,0 になる.それ以 降は C は電荷を放電し始め,電荷が 0 になり $I_{\rm J}$ の増加率は 0 になる.以下,C には符号が負の電荷が蓄積さ れて V が負になり $I_{\rm J}$ は減少する.これはジョセフソン接合を L とする LC 共振回路の自励発振と同じ現象で



図 1: 減衰がほとんどない場合のジョセフソン電流 I_J コンデンサ電流 I_C ,電圧 $(d\theta/d\tau)$,位相の時間推移の計算結果.初期条件 $\theta = 0$, $d\theta/d\tau = 0$ (上) Q = 1000, a = 0.4の場合(下) Q = 1000, a = 0.7の場合.

ある.実際のインダクタンスと異なる点はジョセフソン接合の L は図 9 のように I_c で発散する可変インダク タンスである.そのために,この L には I_c 以上の電流は流れない

 $\alpha < 1$ であれば I_J や I_c は振動するが,しかし,I が大きくなると波形は正弦波から著しく変化してくる.それを図 10(下)に示す.外部から電流 I が流れてきて最初にCに流れ,次いでジョセフソン接合に流れるのは同じであるが, I_J が上限 I_c 以上には流れないので I_C の反対方向電流も抑えられC の電荷が0になるのが遅くなり,その間 V > 0であるので位相は $\pi/2$ 以上になる.その結果,電流波形は大きく正弦波から変形されるのである.

では, 位相が回転しないで振動するための α の範囲を考えてみよう.このことを考えるには図2の傾斜した洗濯板モデルがわかりやすい.簡単のために,減衰はないことにする.すなわち,1/Q=0である.そのとき,運動方程式は式(??)から

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}\tau^2} + \sin\theta - \alpha = 0 \tag{18}$$

したがって,ポテンシャルは

$$U(\theta) = -\cos\theta - \alpha\theta \tag{19}$$

である.仮想粒子は $\tau = 0$ で $\theta = 0$ の点に速度 d $\theta / d\tau = 0$ で存在する.U(0) = -1である.そこから斜面を 落下する運動を始め,徐々に速度を得て極小点を通過してから同じ位置エネルギー $U(\theta_1) = -1$ となる点 θ_1 ま で到達し、そこから引き返す、つまり、 θ_1 が折り返し点になる、これから、 $U(\theta_1) = -1$ が折り返し点 θ_1 を決定する式になり、 α の関数になる、すなわち、解くべき方程式は、

$$-\cos\theta - \alpha\theta = -1\tag{20}$$

である.明らかに $\theta = 0$ は解である. α が十分大きいときには解が 0 しかない. θ の運動が回転になるか振動になるかその境界は $\theta = 0$ 以外の解が重根になるときである. $\alpha = 2/\pi$ のときにもすぐわかり $\pi/2 \ge \pi$ が解である.したがって,振動運動をする最大の α は $2/\pi$ よりも大きいことがわかる.それ以上 α が大きいと仮想粒子は極大点を乗り越えて落下運動を続ける.実際には数値計算でこの値を求める必要がある.ニュートン法を用いて得られた結果は,小数点 6 桁までで

$$\alpha = 0.724611 \tag{21}$$

である.詳細は付録に示す.



図 2: 外部電流がない場合のジョセフソン電流 $I_{\rm J}$, コンデンサ電流 $I_{\rm C}$, および抵抗電流 $I_{\rm R}$ の計算結果 . a = 0.4の場合で,上から Q = 10,50,1000.

4.1.2 外部電流がない場合

量子化されるジョセフソン接合の仮想粒子の運動は,図2または図3の傾斜した洗濯板ポテンシャルの谷に おける摩擦のない振動運動である.傾斜したポテンシャルを連続落下する運動は境界条件がなくなり量子化さ れないので今の場合は対象に含めない.

外部からの電流が0である場合を考えよう. つまり, $\alpha = 0$ とする.このとき,初期値として $\theta = 0$, $d\theta/d\tau = 0$ とすると,その点が安定解になり $\theta = 0$ 以外の有意な解が得られない.そこで,初期値を $\theta = \theta_0$, $d\theta/d\tau = 0$ としよう. $I_0 = I_c \sin \theta_0$ とすると,このような初期値を具体的に設定するには,外部回路からジョセフソン接合に電流を0から非常にゆっくりと I_0 まで流して瞬時に電流を0にすれば良い.ジョセフソン接合には外部から電流が流れないので,ジョセフソン接合に流れる電流は自励発振の電流である.例えば $\theta_0 = 0.4\pi$ の場合には図11のように振る舞う.

このようにして設定可能な θ の初期条件は $-\pi/2 \le \theta \le \pi/2$ の範囲になる.もし *I* を *I*_c よりも大きくする と,ジョセフソン接合は電圧状態になってしまい θ は回転を始めるからである.それでは, $-\pi < \theta < -\pi/2$ や $\pi/2 < \theta < \pi$ の状態は取り得ないかというと,上のような回転の状態の他に, $2/\pi < \theta < 2.331122$ の範囲で振動運動をするが,これは外部から直流電流を供給されている場合に存在する状態で,外部から電流を供給しな いばあいには実現しない.その場合 θ の初期値は $-\pi/2 \le \theta \le \pi/2$ の範囲で可能であり, θ はその範囲で動く.

4.1.3 ジョセフソン接合の最大エネルギー

ジョセフソン接合に供給されるエネルギー Eを計算してみよう.式 (1) と式 (2) から積 VI を求め,これを以下で明らかになる理由により,1/4 周期ごとに積分する. θ の周期をTとし, $0 \le \tau \le T/4$ において θ は $-\theta_{max}$ から θ_{max} の範囲で振動している場合に, $\tau = 0$ で $\theta = -\theta_{max}$,時間 $\tau = T/4$ で $\theta = 0$ である.したがって,

$$E = \int_{0}^{T/4} VI \, \mathrm{d}t = \frac{\hbar I_{\mathrm{c}}}{2e} \int_{0}^{T/4} \sin\theta \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} \, \mathrm{d}t = \frac{\hbar I_{\mathrm{c}}}{2e} \int_{-\theta_{\mathrm{max}}}^{0} \sin\theta \, \mathrm{d}\theta = \frac{\hbar I_{\mathrm{c}}}{2e} (-1 + \cos\theta_{\mathrm{max}})$$
$$= -E_{\mathrm{J}} (1 - \cos\theta_{\mathrm{max}}). \tag{22}$$

ただし,

$$E_{\rm J} = \frac{\hbar I_{\rm c}}{2e} \tag{23}$$

である.次に, $T/2 \leq \tau \leq T/2$ においてジョセフソン接合で消費されるエネルギーを考えると,

$$E = \int_{T/4}^{T/2} VI \,\mathrm{d}t = \frac{\hbar I_{\rm c}}{2e} \int_{T/4}^{T/2} \sin\theta \,\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} \,\mathrm{d}t = \frac{\hbar I_{\rm c}}{2e} \int_{0}^{\theta_{\rm max}} \sin\theta \,\mathrm{d}\theta = E_{\rm J}(1 - \cos\theta_{\rm max}). \tag{24}$$

となり,今度は大きさが同じで符号が変わる.実は,このエネルギーはジョセフソン接合で消費されるのではなく,蓄積されるか放出されるというだけのものである.つまり, $0 \le \tau \le T/2$ では,ジョセフソン接合から外部回路に $E_J(1 - \cos \theta_{max})$ のエネルギーが供給され, $T/2 \le \tau \le T$ では,外部回路からジョセフソン接合に $E_J(1 - \cos \theta_{max})$ のエネルギーが供給されることを意味している.残りの半周期もこれが繰り返されることになる.このように,外部からの直流電流の供給がない場合,自励振動しているジョセフソン接合は 1/4 周期ごとにエネルギーの蓄積と放出を繰り返す.

これを単振子の運動で表せば , $0 \le \tau \le T/2$ では位置エネルギーが運動エネルギーに変換され , $T/2 \le \tau \le T$ では , 今度はその運動エネルギーが位置エネルギーに変換されることを意味する .

一方,LC 共振回路を考えれば,ジョセフソン接合はインダクタンス L であるから, $0 \le \tau \le T/2$ ではイン ダクタンス L に蓄積された電力が放出されて C に蓄積され, $T/2 \le \tau \le T$ では C に蓄積された電力が L に蓄 積される過程に対応する. 上で述べたように,自励振動するジョセフソン接合では, θ_{max} が取り得る最大値は $\pi/2$ である.したがって,式 (22) あるいは式 (24) から,このようなジョセフソン接合に蓄えられるエネルギーの最大値は E_J であり,式 (23) に示される.

量子化エネルギー準位を解析する前に,エネルギーの単位としてジョセフソン接合の最大エネルギー *E*」を 用いることにする.*E*」は以下に示すようにジョセフソン電流が*I*。を超えない範囲で振動している場合のジョ セフソン接合の持つエネルギーの最大値である.

4.2 ジョセフソン接合の位相振動の量子化

これまで述べたように,ジョセフソン接合では外部から電流を流すことにより,あるいは十分ゆっくりと電流を増加してから突然電流を遮断することにより,ジョセフソン接合に位相の振動状態,つまりジョセフソン 電流の振動状態が実現し,ジョセフソン接合はその振動電流の大きさによりエネルギーを持つ.ジョセフソン 接合の減衰が非常に小さく容量 C および I_c が十分小さい時,ジョセフソン接合における位相の振動は量子化 される.減衰が非常に小さいことは、1 K 以下の極低温にすることで準粒子のトンネル電流がなくなるので達 成できる.また,C や I_c はジョセフソン接合を 1 μ m 程度に小さくすれば十分実現できる.

ジョセフソン接合の位相の振動運動を量子化する.量子化は座標と正準共役運動量の交換関係から導入される.つまり,座標とそれに正準共役な運動量の交換子を \hbar にすることで量子化が行われる.今の場合には回転であるので,位相(回転角)とその正準共役な角運動量の間の交換関係に量子化規則を導入することによって量子化される.すなわち,位相およびその正準共役な運動量,すなわち角運動量は不確定になる.位相は θ であり,その正準共役な運動量は $p = M_{\rm I} d\theta/dt$ である.量子化規則を書き表すと,

$$\left[\theta, \left(\frac{\hbar}{2e}\right)^2 C \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right] = \hbar \tag{25}$$

となる.これから角運動量 $M_{\rm I} \, {
m d} heta / {
m d} t$ は

$$M_{\rm I}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \tag{26}$$

という演算子になる.

それではこの系のハミルトニアン *H* を求めよう.式 (??) において, 左辺第 2 項の 1/R を 0 とし, $d\theta/dt$ を 掛けて *t* で積分することにより,

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2e}\right)^2 C \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right)^2 - \frac{\hbar I_{\mathrm{c}}}{2e} (\cos\theta - \alpha) = 0 \tag{27}$$

 $M_{\rm I}=(\hbar/2e)^2 C$ および $E_{\rm J}=\hbar I_{\rm c}/2e$ を用いるとこの式は

$$\frac{1}{2M_{\rm I}} \left(M_{\rm I} \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} \right)^2 - E_{\rm J}(\cos\theta + \alpha) = E \tag{28}$$

となる. E は積分定数であり初期条件などで決定されるが,ここではハミルトニアンの固有値でもある.式 (26)を用いて式 (28)の左辺をハミルトニアン H に変換すると,この式は

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_{\rm I}} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2} - E_{\rm J}(\cos\theta + \alpha) \tag{29}$$

となる.これを波動関数 $\psi(\theta)$ に作用させその固有値を E とすると, $M_{\rm I}$ に元の式を代入して

$$-\frac{(2e)^2}{2C}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\theta^2} - E_\mathrm{J}(\cos\theta + \alpha)\psi = E\psi \tag{30}$$



図 3: 傾いた洗濯板ポテンシャルの束縛ポテンシャル. $\alpha = 0.91, 0.92, 0.94, 0.96, 0.97$ の場合.

というシュレーディンガーの方程式が得られる.ここで,容量Cに2eの電荷があるときのエネルギー E_{C} は

$$E_{\rm C} = \frac{2e^2}{C} \tag{31}$$

と表されるので1,これを用いると、シュレーディンガーの方程式は

$$-E_{\rm C}\frac{{\rm d}^2\psi}{{\rm d}\theta^2} - E_{\rm J}(\cos\theta + \alpha)\psi = E\psi$$
(32)

となるのである.この式を用いて数値計算によりジョセフソン接合の量子化エネルギー準位を計算する.

4.3 シュレーディンガー方程式の数値解

ここで,シュレーディンガー方程式を数値的に解く方法として,式(32)の微分方程式を行列の固有値問題に 変換する方法を用いる.そのために,まず,一定区間の座標 θ を離散化して θ_i とし,波動関数 $\psi(\theta_i)$ を i 番目 の成分とするベクトルを考える.このとき,波動関数の引数の θ 範囲を決めなければならない.この範囲の左 端を θ_L ,右端を θ_R とすると, $\theta_L \leq \theta \leq \theta_R$ が数値計算の範囲である. θ_i はこの範囲を等間隔に分割されるよ うにする.この範囲の外では波動関数の振幅は 0 とみなされるから,この位相範囲の両端には高さが無限大の ポテンシャルが存在することと等価である.したがって,波動関数が局在的になるような束縛ポテンシャルの 場合は波動関数が十分小さくなる点,すなわち束縛ポテンシャルが十分大きくなる点を境界とすればよい.今 の場合はポテンシャルの形は α に依存するので実際にポテンシャルを見て波動関数の範囲を適切に決定する必 要がある.

図 12 は, α が 1 に近い場合の傾いた洗濯板ポテンシャルの形である. α を図 12 のような値にとったのは, そうすると右側のポテンシャル障壁が比較的低くなるため,粒子なら有限のトンネル確率が発生し,ジョセフ ソン接合であれば巨視的量子トンネル効果が発現する確率があるという場合を考えたからである.しかし,例

$$E_{\rm C} = \frac{1}{C} \int_0^{2e} q \, \mathrm{d}q = \frac{2e^2}{2C}$$

となる.

 $^{^1}$ 容量 Cに電荷 q が蓄積されている場合 , Cの電圧は V = q/Cである.これに微小電荷 dq を加えると, 蓄積されたエネルギーの増加分は V dq = q dq/Cである.したがって, 容量 Cに電荷 2e が蓄積されている場合はこれを 0 から 2eまで積分すればよい.すなわち,

えば図 12 の $\alpha = 0.97$ のように, α が 1 に近すぎて障壁高さが低くなりすぎた場合には熱的に離脱する確率が 高くなることの問題もあるが,それ以前に,正しい固有値や固有波動関数が計算できない場合がある.例えば, 波動関数ベクトルの右端 θ_R を右側のポテンシャルの頂点の近く $\theta = 0.5$ にとった場合,そこでポテンシャル は無限大に発散してしまうために,その場合に得られた数値解は求める解ではない.一方,波動関数ベクトル の右端 θ_R をポテンシャルの頂点のさらに右側の $\theta = 1$ 付近にとれば, $0.5 < \theta < 1$ の部分にポテンシャルの谷 ができるのでこの部分に波動関数の振幅を持つ束縛解が存在する.しかし,本来この部分には束縛解はないの であるから,この解は $\theta = 1$ に波動関数ベクトルの右端をとったことによる架空解,いわゆる artifact である. このような場合には負の固有値を持つ場合がある.いずれの場合にも問題があるが,前者の場合は固有値その ものが変わるのに対し,後者の例では,架空解が紛れ込むだけで他の解は実際の場合に十分近い.したがって, 後者の例のような波動関数の境界のとり方,すなわち波動関数ベクトルの定義をする必要がある.

波動関数ベクトルの次元は波動関数の区間を細分化する数に比例して多くなり,数値計算の結果,エネル ギー固有値はその次元の数だけ得られる.しかし,重要な数値解は固有値の小さい方からの有限個だけである. 固有値が多くなるのは,波動関数ベクトルの両端で無限大のポテンシャル壁ができたために無限大の数の固有 値が生じるからであって,意味があるのは固有値の小さい方から有限個で,エネルギー固有値が束縛ポテンシャ ルよりも大きな数値解はほとんどは無意味である.

波動関数ベクトルを定義する θ の範囲が決定されれば、その範囲を数値微分が十分意味を持つ程度に小さい 差分hを定義して等間隔にn+1個に分割すれば波動関数が決まる.そうすると、波動関数ベクトルはの成分 は $\psi(\theta_i)$ $(i = 0, \cdots, n)$ となる. θ_0 が左端 θ_L , θ_n が右端 θ_R となる.

次は、この波動関数ベクトルを基に、ハミルトニアン演算子を行列化することである.これは簡単で、式 (32)の場合には、左辺第1項は $-E_C[\psi(i+1)+2\psi(i)-\psi(i-1)]/h^2$ と表すことができるから、

$$-E_{\rm C}\frac{\psi(\theta_{i+1}) - 2\psi(\theta_i) + \psi(\theta_{i-1})}{h^2} - E_{\rm J}(\cos\theta_i + \alpha)\psi(\theta_i) = E\psi(\theta_i)$$
(33)

となる、端点では,仮定から $\psi(\theta_{-1}) = \psi(\theta_{n+1}) = 0$ と処理することになる.この式からn次元の正方行列が決定されるので,あとは数値計算で固有値と固有ベクトルを求めればよい.式(33)から,これをベクトルに作用する行列と見た場合,この行列は明らかに対称行列である.したがって,ヤコビの方法を用いて行列の固有値を求めることができる.ヤコビの方法を用いれば対角化する相似変換行列も同時に計算されるので,固有値に付随する固有ベクトルは,この行列を相似変換するユニタリー行列の列で与えられる.すなわちこれで波動関数ベクトルが求められることになる.ヤコビの方法を用いた式(33)のエネルギー固有値およびその波動関数ベクトルの数値計算プログラムは付録に示す.

4.3.1 *α* = 0.91 の場合の量子化エネルギー準位と波動関数

図 12 の傾斜した洗濯板ポテンシャルの中で $\alpha = 0.91$ の場合をについて計算した結果を図 13 に示す.図 13 は $\alpha = 0.91$, $I_c = 60 \mu$ A, C = 65 fF の場合に波動関数ベクトルを $-0.5 \le \theta \le 1.0$ の範囲にとった場合の波動関数の数値計算結果である.固有エネルギーの低いほうから 10 個まではポテンシャルの谷に収まり,波動関数も束縛解になっている.しかし,これより大きい解は数値的には束縛解になっているが,波動関数ベクトルに境界を置いたために出てきた架空の解で意味がない.図 12 からは除いてある.

図 14 には,同じ数値計算結果のエネルギー固有値を波動関数ベクトルの成分ごとにプロットした.横軸は 等間隔という以外に今の場合意味がない.エネルギーが高くなるほど,少しずつエネルギー準位の間隔が小さ くなることがわかる.



図 4: 図 12 の傾いた洗濯板ポテンシャルの束縛ポテンシャルのうち, $\alpha = 0.91$ を用いたシュレーディンガー方 程式の数値解.固有エネルギーの低いほうから 10 個の解について,量子化エネルギー準位を横線で,その波 動関数を同じ色の曲線で量子化エネルギーを基準に示した.



図 5: 図 12 の傾いた洗濯板ポテンシャルの束縛ポテンシャルのうち, $\alpha = 0.96$ を用いた場合のシュレーディン ガー方程式のエネルギー固有値数値解.正の値を持つものを小さい順にプロットした.横軸は等間隔にプロッ トしたという意味しかない.つまり,相似変換直交行列の列ベクトルの位置を示しているだけである.



図 6: 図 12 の傾いた洗濯板ポテンシャルの束縛ポテンシャルのうち, $\alpha = 0.96$ を用いたシュレーディンガー方 程式の数値解.固有エネルギーの低いほうから3個の解について,量子化エネルギー準位を横線で,その波動 関数を同じ色の曲線で量子化エネルギーを基準に示した.

4.3.2 $\alpha = 0.96$ の場合の量子化エネルギー準位と波動関数

図 12 の傾斜した洗濯板ポテンシャルの中で $\alpha = 0.96$ の場合の数値計算結果を図 15 に示す.図 12 からわかるように,ポテンシャルの谷は $\alpha = 0.91$ よりも浅くなっているので,束縛解はかろうじて 3 個存在することがわかる.最もエネルギーの大きい 3 番目のエネルギー準位では,わかりにくいがポテンシャルの山の右側にも有限の振幅が存在する ($\theta = 1.0$ 付近で 0 になるのは $\theta_L = 1$ であることの artifact である.) このことはポテンシャルの谷にある仮想粒子が有限の確率でポテンシャルの山をトンネルすることを意味している.ちなみに,普通のトンネル接合のトンネル確率は 10^{-4} から 10^{-3} であるから,その場合には図 15 のグラフではわからない程度に小さい.数値計算結果から概算すれば,一番低いエネルギー準位の場合でも 10^{-6} 程度のトンネル確率を有する.

図 16 は,図 15 の場合の量子化されたエネルギー準位をプロットした図である.エネルギーの低いほうから 4 番目の準位以降は意味がないが,数値計算結果としてこのように現れる.

4.3.3 放物型ポテンシャルの場合の数値解

傾斜した洗濯板ポテンシャルの谷の底は $\cos \theta$ の関数の形から放物線の形をしている.放物型のポテンシャルは調和振動子の場合で,エルミート多項式と指数関数の積からなる解析解が知られている.そこで,図 13の $\alpha = 0.91$ の場合の傾斜した洗濯板ポテンシャルの場合の解と放物型ポテンシャルの場合の数値解を比較してみよう.

傾斜した洗濯板ポテンシャル $U(\theta)$ を

$$U(\theta) = -E_{\rm J}(\cos\theta + \alpha\theta),\tag{34}$$



図 7: 図 12 の傾いた洗濯板ポテンシャルの束縛ポテンシャルのうち, $\alpha = 0.96$ を用いた場合のシュレーディン ガー方程式のエネルギー固有値数値解.正の値を持つものを小さい順にプロットした.4番目以降のプロット は物理的に意味がない.



図 8: 放物型ポテンシャルの場合の数値解.基底準位から 10 個のエネルギー準位と対応する固有波動関数の数 値解.水平直線はエネルギー準位,同じ色の曲線は対応する準位を基準とする固有波動関数.



図 9: 放物型ポテンシャルの場合のエネルギー準位. 横軸は相似変換行列の対応する列の位置を表すのみで意味がない.



図 10: 傾いた洗濯板ポテンシャルの束縛ポテンシャル . $\alpha = 0.91, 0.92, 0.94, 0.96, 0.97$ の場合 .

谷の底を $\theta_0 = \sin^{-1} \alpha$, θ_0 から微かに離れた点を $\theta = \theta_0 + x$ とすると, $x \ll 1$ であるので,

$$U(\theta) - U(\theta_0) = -E_J[\cos(\theta_0 + x) + \alpha(\theta_0 + x)] + E_J(\cos\theta_0 + \alpha\theta_0)$$

$$= -E_J[\cos\theta_0\cos x - \sin\theta_0\sin x + \alpha(\theta_0 + x) - \cos\theta_0 - \alpha\theta_0]$$

$$\simeq -E_J[\cos\theta_0(1 - \frac{1}{2}x^2) - x\sin\theta_0 + \alpha(\theta_0 + x) - \cos\theta_0 - \alpha\theta_0]$$

$$= \frac{1}{2}E_J\cos\theta_0 \ x^2 = \frac{1}{2}E_J\cos(\sin^{-1}\alpha) \ x^2$$
(35)

とすることができる.これを用いてエネルギー準位と固有波動関数を数値計算した結果が図17である.また, 図18はエネルギー固有値のプロットである.数値計算結果は解析解と比較すると,少なくとも基底準位から3 番目のエネルギー準位まで,有効数字3桁まで一致する².

このような放物型ポテンシャルのおけるエネルギー準位および固有波動関数を傾斜した洗濯板ポテンシャルの場合と重ね合わせて比較したグラフが図 19 である.傾斜した洗濯板ポテンシャルの場合のほうが,エネルギー準位が高くなるほど放物型ポテンシャルの場合と比較して小さくなって差が大きくなる.なお,基底準位の波動関数が2つのポテンシャルの場合で振幅の最大値が違うのは,傾斜した洗濯板ポテンシャルの場合に $\theta_L = 0.6$,放物型ポテンシャルの場合には $\theta_L = 0.7$ と異なる値で計算したためで,分割数が200と同じだったためにhが両者で異なってしまったためである.波動関数ベクトルのノルムは両方とも1である.

付録

A.単振子の運動方程式の解

重力場にある長さ l, 質量 m, 重力加速度 g, 振り子が鉛直となす角度を θ とし, t = 0 において $\theta = 0$, $d\theta/dt = v$ を初期値とする.振り子の回転の運動方程式は

$$ml^2 \frac{\mathrm{d}^2 \theta}{\mathrm{d}t^2} = -lmg\sin\theta,\tag{A1}$$

すなわち,

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{g}{l}\sin\theta,\tag{A2}$$

となる.両辺に $d\theta/dt$ を掛けてtで0からtまで積分してt = 0の初期値を入れると,

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right)^2 - \frac{1}{2}v^2 = \frac{g}{l}(\cos\theta - 1)$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right)^2 = \frac{4g}{l} \left(\frac{lv^2}{4g} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right)$$
(A3)

²調和振動子のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}\psi_n^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega\psi_n$$

である.一方,傾斜した洗濯板ポテンシャルの底と同じ曲率を持つ放物型ポテンシャルをもつ仮想粒子のシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2M_{\rm I}}\frac{\mathrm{d}\psi_n^2}{\mathrm{d}\theta^2} + \frac{1}{2}E_{\rm J}\cos(\sin^{-1}\alpha)\ \theta^2\psi_n = E_n\psi_n$$

である.2つの式の比較から,

$$\omega^2 = \frac{2e}{\hbar C} I_{\rm c} \cos(\sin^{-1} \alpha)$$

よりエネルギー準位 E_n が求められる . それと図 17 の計算結果と比較すると , 解析解の方は , 10¹² Hz を単位として , 0.08581 , 0.2574 , 0.4291 , 0.6007 , 0.7723 である . 一方 , 数値計算の結果は , 0.08578 , 0.2573 , 0.4286 , 0.5997 , 0.7707 である .

 $lv^2/4g=k^2$ とおく . k<1の場合 ,

$$\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right)^2 = \frac{4g}{l} \left(k^2 - \sin^2\frac{\theta}{2}\right) \tag{A4}$$

 $\sin heta/2 = k \sin arphi/2$ とおき,

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{k\cos\frac{\varphi}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}$$

などに注意すると,

$$\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}\right)^2 = \frac{\cos^2\frac{\theta}{2}}{k^2\cos^2\frac{\varphi}{2}}\frac{4g}{l}k^2(1-\sin^2\frac{\varphi}{2}) = \frac{4g}{l}\cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{4g}{l}(1-k^2\sin^2\frac{\varphi}{2})$$
(A5)

これから

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}(\varphi/2)} = \frac{\sqrt{\frac{l}{g}}}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}} \tag{A6}$$

これを $\varphi/2$ で積分すれば,

$$\sqrt{\frac{g}{l}}t = \int_0^{\varphi/2} \frac{\mathrm{d}(\frac{\varphi}{2})}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}}$$
(A7)

ここでヤコビの楕円関数 $\operatorname{sn}(u,k) = \sin \varphi$ の定義式は

$$u = \int_0^{\varphi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} \tag{A4}$$

であるから,

$$\sin\frac{\varphi}{2} = \,\sin\left(t\sqrt{\frac{g}{l}},k\right),\tag{A8}$$

したがって,

$$\sin\frac{\theta}{2} = k \operatorname{sn}\left(t\sqrt{\frac{g}{l}},k\right),\tag{A9}$$

が得られる(岩波の数学公式 III の p.45 の式は誤っている.正しくは l と g が逆.)

k > 1のときには式 (A4) で

$$\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right)^2 = \frac{4g}{l}k^2\left(1 - \frac{1}{k^2}\sin^2\frac{\theta}{2}\right) = v^2\left(1 - \frac{1}{k^2}\sin^2\frac{\theta}{2}\right) \tag{A10}$$

とすることができるので,これと式(A5)を比較することにより,

$$\sin\frac{\theta}{2} = \,\operatorname{sn}\,(t\frac{v}{2},\frac{1}{k})\tag{A11}$$

とすることができる.

周期 T について,往復運動と回転運動で考え方が少し違うので注意が必要である.

まずk < 1の場合,単振子が往復運動しているから, θ は0から θ_{\max} までの時間T/4は, sn $(t\sqrt{g/l},k)$ が0から1までの変数の範囲つまり, sn (u,k)の周期4K(k)の1/4のK(k)に相当する.すなわち $(T/4)\sqrt{g/l} = K(k)$ であるから,

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{g}}K(k) \tag{A12}$$

である.

次に, k>1の場合, $0<\theta<\pi$ で1/2周期で, これは式 (A11) から sn (u,k)の0から1までの1/4周期, つまりK(1/k)に対応する. つまり, (T/2)(v/2)=K(1/k)であるから,

$$T = \frac{4}{v}K(\frac{1}{k}) \tag{A13}$$

となる.これは式 (A11) から左辺は周期 4π ,右辺は周期 4K であるのに,回転の周期は 2π であるから上の結果が得られる.

文献に示すように,ヤコビの楕円関数は k < 0.5 では正弦波に非常に近い. Q が十分大きいときは v も十分 大きいと考えて良いので,式 (A2) で g/l = 1 の場合を考え, $k^2 = v^2/4$ は十分大きく,1/k は 0.5 よりも明ら かに小さい.そうすると sin θ は正弦波に近くなり,本文で述べた内容と一致することがわかる.

B.数値計算とプログラム

B1.RCSJ モデルにおける電流の計算

式(13)は次の連立1次方程式として表すことができる.

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\tau} = y$$
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{1}{Q}y - \sin\theta + \alpha$$

これを連立ルンゲ・クッタ法で $x \ge y$ の初期値を与えて数値的に解くことができる.プログラムは gcc -o ijvic-2 ijvic-2.c とコンパイルしてから, Q, I_c , α の値をコマンドラインから

ijvic-2 Q alpha tmax

と入力すれば , au , $I/I_{
m c}$, V , $I_{
m C}$, heta が $0 \leq au \leq tmax$ の範囲で

ijvic2_Qxx_axx.txt

というファイル名に出力される.xxには入力した数値が入る.

C プログラムソース

```
/* ijvic-2.c 2020.5.28 by M. Suzuki */
/* based on rcsj-3.c get parameter values from the command line */
/* ijvic-2 Q_value a_value tmax_value */
/* output filename ijvic2_Q'Q_value'_a'a_value'.txt */
/* output data \tau sin(\theta) d\theta/dt d2\theta/dt2 L\d I_J/dt \theta */
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <string.h>
static double alpha, Q;
double f1(double t, double x, double y)
{
    return y;
}
double f2(double t, double x, double y)
ſ
    return alpha-y/Q-sin(x);
7
int main(int argc, char *argv[])
ł
    FILE *fp;
    char filenameout[200], dummy[200];
double t, x, y, z, z1, h, dy, tmax;
double cj, cj1, dcj;
double k1[2], k2[2], k3[2], k4[2];
    if(argc<4)
    {
```

```
printf("Inappropriate number of arguments.\n");
     printf("Usage: ijvic Q alpha tmax\n");
     exit(0);
ľ
Q=atof(argv[1]);
printf("%lf \n", Q);
alpha=atof(argv[2]);
printf("%lf \n", alpha);
tmax=atof(argv[3]);
printf("%lf \n", tmax);
strcpy(filenameout, "ijvic2_Q");
strcat(filenameout, argv[1]);
strcat(filenameout, "_a");
strcat(filenameout, argv[2]);
strcat(filenameout, ".txt");
fp=fopen(filenameout, "w");
          // step of time t
// initial value of phase theta
h=0.01;
x=0;
           // initial value of d phi/d t
y=0;
dcj=0;
cj1=0;
for(t=0;t<tmax;t+=h)</pre>
Ł
     k1[0]=f1(t,x,y)*h;
     k1[1]=f2(t,x,y)*h;
     k2[0]=f1(t+h/2, x+k1[0]/2, y+k1[1]/2)*h;
k2[1]=f2(t+h/2, x+k1[0]/2, y+k1[1]/2)*h;
k3[0]=f1(t+h/2, x+k2[0]/2, y+k2[1]/2)*h;
k3[1]=f2(t+h/2, x+k2[0]/2, y+k2[1]/2)*h;
     k4[0]=f1(t+h, x+k3[0], y+k3[1])*h;
     k4[1]=f2(t+h, x+k3[0], y+k3[1])*h;
     x+=(k1[0]+2.0*k2[0]+2.0*k3[0]+k4[0])/6.0;
y+=(k1[1]+2.0*k2[1]+2.0*k3[1]+k4[1])/6.0;
     cj=sin(x);
     if(t==0) dcj=0;
     else dcj=(cj-cj1)/h;
     cj1=cj;
     fprintf(fp,"%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\t%lf\n", t, cj, y, alpha-y/Q-cj, dcj*cos(x), x);
}
fclose(fp);
```

B2. RCSJ モデルにおける電流の計算

式(20)の方程式から

}

$$f(x) = -\cos x - \alpha x + 1$$

とすると,求める解は f(x) = 0 となる点で重根を持つ必要がある.つまり解は極小点で,f'(x) = 0より $\sin x = \alpha$ となる.これを代入した

$$f(x) = -\cos x - x\sin x + 1$$

のx軸との交点を $x > \pi/2$ でニュートン方により求めればよい.

C プログラムソース

/* alpha-th.c 2020.6.4 by M. Suzuki */ /* U=-cos th - th\alpha=-1, sin th=alpha の解を Newton 法で求める */

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <string.h>
static double alpha, Q;
double f(double x)
£
    double y;
    y=-\cos(x)-x*\sin(x)+1;
    return y;
}
double f1(double x)
    double y;
    y=-x*\cos(x);
    return y;
}
int main(int argc, char *argv[])
ſ
    char buffer[100];
    double d, x, x1, pi=M_PI;
    x1=pi;
d=1e5;
    while(d>1e-5)
    Ł
         x=x1-f(x1)/f1(x1);
         d=fabs(x-x1);
         x1=x;
    }
    printf("%lf\t(%le)\n", x, d);
    printf("alpha=%lf\n", sin(x));
```

}

B3. 傾斜した洗濯板ポテンシャルの量子化準位と波動関数の計算

gcc -o ELQ ELQ.c とコンパイルした後, *I*_c [μA], *C* [fF], α の値をコマンドラインから ELQ IcCalpha と入力する.その他のパラメータの変更は#define 文の数値を書き直してからコンパイルすればよい. TOL は収束の条件を決めるパラメータ, N は分割数+1, MAX は繰り返し回数の上限, xL は波動関数の左端, xR は右端, DISPLAYMAX は display に表示するデータの最初からの個数, EIGEN_OUT_NUMBER はファイルに出力する固有ベクトル,すなわち固有波動関数の数である.

計算時間は,私の使っている MacBook Pro Core i7 2.6GHz で数秒である.

C プログラムソース

```
/* ELQ.c */
/* Eigenvalues for a tilted washboard potential */
/* by the Jacobi method */
/* S_Jacobi() by K. Minemura http://www-in.aut.ac.jp/~minemura/pub/Csimu/C/Jacobi.html */
/* 2012.2.23, 2020.6.13 by M. Suzuki */
#include <stdio.h>
#include <math.h>
```

```
#include <stdlib.h>
#include <string.h>
#define
             TOL
                     1.0e-10
                   201
#define
             Ν
            MAX
                    500000
#define
#define
            хL
                    -0.6
                   1.0
#define
             хH
#define DISPLAYMAX
#define EIGEN_OUT_NUMBER 10
void SetMatrix(int n, double a[n][n], double Ic, double C, double alpha)
{
    int i, j;
double hbar=1.05457266e-34;
                                           // [Js]
// [C]
    double e=1.60217733e-19;
    double EJ, EC, x, h;
double potential();
    char buffer[100];
                            // [J]
// [Hz]
    EJ=(hbar/2/e)*Ic;
    EJ/=2*M_PI*hbar;
                            // [J]
// [Hz]
    EC=2*e*e/C;
    EC/=2*M_PI*hbar;
    h=(xH-xL)/(n-1);
    for(i=0;i<n;i++)</pre>
    ł
         for(j=0;j<n;j++)</pre>
         {
              a[i][j]=0;
         }
    }
    for(i=1;i<n-1;i++)</pre>
    ſ
         x=xL+h*i;
a[i][i]=2.0*EC/(h*h)+potential(x, EJ, alpha);
         a[i][i+1]=-EC/(h*h);
a[i][i-1]=-EC/(h*h);
    }
    a[0][0]=2.0*EC/(h*h)+potential(xL, EJ, alpha);
    a[0][1]=-EC/(h*h)
    a[n-1][n-1]=2.0*EC/(h*h)+potential(xH, EJ, alpha);
    a[n-1][n-2] = -EC/(h*h);
}
double potential(double x, double EJ, double alpha)
ł
    double y, z, U, UO;
    z=asin(alpha);
    UO=-EJ*(alpha*z+cos(z));
    y=x+z;
    U=-EJ*(alpha*y+cos(y))-U0;
    return U;
}
int S_Jacobi(int n, double a[n][n], double x[n][n])
    char buffer[100];
    int i, j, k, m, count, status;
double amax, amax0, theta, co, si, co2, si2, cosi, pi=M_PI;
double aii, aij, ajj, aik, ajk;
    /* set initial values */
    for(i=0; i<n; i++){
    for(j=0; j<n; j++){</pre>
              if( i == j ) x[i][j] = 1.0; else x[i][j] = 0.0;
         }
    }
    /* repeat Jacobi similarity transformation */
```

```
count=0;
status=9;
while(count <= MAX)</pre>
Ł
    /* seek for the maximum off-diagonal element */
    amax=0.0;
    for(k=0; k<n-1; k++)</pre>
    {
         for(m=k+1; m<n; m++)</pre>
         ſ
             amax0=fabs(a[k][m]);
             if(amax0 > amax)
             {
                  i=k;
                  j=m;
                  amax=amax0;
             }
         }
    }
    /* judge the convergence */
    if(amax <= TOL)
    {
         status=0;
         break;
    }
    else
    {
         aii=a[i][i];
aij=a[i][j];
         ajj=a[j][j];
         /* calculate the angle of rotation */
         if(fabs(aii-ajj) < TOL)</pre>
         {
             theta=0.25*pi*aij/fabs(aij);
         }
         else
         {
             theta=0.5*atan(2.0*aij/(aii-ajj));
         }
         co=cos(theta);
         si=sin(theta);
         co2=co*co;
         si2=si*si;
         cosi=co*si;
         /* similarity transformation matrix */
         a[i][i]=co2*aii+2.0*cosi*aij+si2*ajj;
         a[j][j]=si2*aii-2.0*cosi*aij+co2*ajj;
         a[i][j]=0.0;
         a[j][i]=0.0;
         for(k=0; k<n; k++)</pre>
         {
             if(k!=i && k!=j)
             {
                  aik=a[k][i];
                  ajk=a[k][j];
                  a[k][i]=co*aik+si*ajk;
                  a[i][k]=a[k][i];
a[k][j]=-si*aik+co*ajk;
                  a[j][k]=a[k][j];
             }
         }
         /* eigen vectors */
         for(k=0; k<n; k++)</pre>
         ſ
             aik=x[k][i];
             ajk=x[k][j];
             x[k][i]=co*aik+si*ajk;
             x[k][j]=-si*aik+co*ajk;
         }
         count++;
```

```
}
         if(count % 100 ==0)
              printf("\r S_Jacobi > iteration=%d",count);
              fflush(stdout);
           }
    }
    printf("\n");
    return status;
}
void S_OutMat(int m, int n, double a[m][n])
     int i,j, k;
    if(n>DISPLAYMAX) k=DISPLAYMAX;
     else k=n;
    for(i=0;i<k;i++)</pre>
     ſ
         for(j=0; j<k; j++)</pre>
          {
              printf(" %10.6le", a[i][j]);
         }
         printf("\n");
   }
}
int main(int argc, char *argv[])
Ł
    FILE *fp;
    char filenameout[200];
     char buffer[100];
     int
             i, j, status, k, kk, mn;
     double hbar=1.05457266e-34;
                                                 // [Js]
                                             // 〔Ć]
    double e=1.60217733e-19; // [C
double a[N][N], x[N][N], d[N], dx, p;
    double Ic, C, alpha, EJ;
    if(argc<4)
     {
          printf("usage ELQ 'Ic[uA]' 'C[fF]' 'alpha'\n");
         exit(0);
     }
    if(N>DISPLAYMAX) kk=DISPLAYMAX;
    else kk=N;
     dx=(xH-xL)/N;
     Ic=atof(argv[1]);
     Ic*=1e-6;
    printf("Ic %le\n",Ic);
     C=atof(argv[2]);
    C*=1e-15;
printf("C %le\n",C);
    alpha=atof(argv[3]);
    printf("alpha %lf\n",alpha);
    EJ=(0.5*hbar/e)*Ic;
                             // [J]
// [Hz]
    EJ/=2*M_PI*hbar;
    strcpy(filenameout, "ELQ_Ic");
    strcat(filenameout, argv[1]);
    strcat(filenameout, "C");
strcat(filenameout, argv[2]);
    strcat(filenameout, argv[2]),
strcat(filenameout, argv[3]);
strcat(filenameout, "d");
sprintf(buffer, "%d", N);
    strcat(filenameout, buffer);
strcat(filenameout, ".txt");
printf("Output filename %s\n", filenameout);
    SetMatrix(N, a, Ic, C, alpha);
```

```
/*
          if(N>DISPLAYMAX) k=DISPLAYMAX;
        else k=N;
    for(i=0;i<N;i++)</pre>
    ſ
        printf("%d ",i);
        for(j=i-1;j<i+2;j++)
        {
             printf("%le ",a[i][j]);
        }
             printf("\n");
    }*/
    printf("matix to be diagonalized\n");
    S_OutMat(N, N, a);
    printf("carry out the Jacobi method for engenvalue problems\n");
    status=S_Jacobi(N, a, x);
    /* sort in order of increasing eigenvalue */
    for(i=0;i<N;i++)</pre>
    {
        d[i]=a[i][i];
                           /* diagonal components */
    }
    /* exchanges eigenvalues, together with eigenvectors, i.e. columns of x, \ */
    mn=0;
             /* number of negative eigenvalues */
    for(i=0;i<N-mn;i++)</pre>
    ſ
        if(d[i]<0 && i!=N-mn-1)
        {
             p=d[k=i];
             while(d[N-mn-1]<0) mn++;</pre>
             d[k]=d[N-mn-1];
             d[N-mn-1]=p;
             for(j=0;j<N;j++)</pre>
             {
                 p=x[j][k];
                 x[j][k]=x[j][N-mn-1];
                 x[j][N-mn-1]=p;
             }
            mn++;
        }
    }
    for(i=0;i<N-mn;i++)</pre>
                             /* positive eigenvalues */
    {
        p=d[k=i];
        for(j=i+1;j<N-mn;j++)</pre>
        {
             if(d[j]<=p) p=d[k=j];
                                       /* seeking the smallest component */
        if(k!=i)
{
             d[k]=d[i];
             d[i]=p;
             for(j=0;j<N;j++)</pre>
             {
                 p=x[j][i];
                 x[j][i]=x[j][k];
                 x[j][k]=p;
             }
        }
    }
    for(i=N-mn;i<N;i++)</pre>
                             /* negative eigenvalues */
    {
        p=d[k=i];
        for(j=i+1;j<N;j++)</pre>
        {
             if(d[j]<=p) p=d[k=j];
                                       /* seeking the smallest component */
        }
```

```
if(k!=i)
{
         d[k]=d[i];
         d[i]=p;
         for(j=0;j<N;j++)</pre>
          {
              p=x[j][i];
              x[j][i]=x[j][k];
              x[j][k]=p;
         }
     }
}
fp=fopen(filenameout, "w");
for(i=0;i<N;i++)</pre>
{
     fprintf(fp, "%lf\t%le", xL+i*dx, d[i]);
for(j=0;j<EIGEN_OUT_NUMBER;j++) fprintf(fp, "\t%lf", x[i][j]);</pre>
     fprintf(fp, "\n");
}
fclose(fp);
if(status==0)
{
     printf("eigenvalues \n");
     for(i=0; i<kk; i++) printf("%10.6le ", d[i]);</pre>
     printf("\n");
     printf("eigenvectors\n");
     S_OutMat(N, N, x);
}
```

B4. 傾斜した洗濯板ポテンシャルの量子化準位と波動関数の計算

}

放物型ポテンシャルにおけるエネルギー準位とその固有波動関数を計算するには,次の potential()で ELQ.cの同じ関数名の部分を置き換えればよい.

```
double potential(double x, double EJ, double alpha)
{
    return 0.5*EJ*cos(asin(alpha))*x*x;
}
```