

VII-3 ナノ量子物性グループ

准教授 谷口 伸彦

大学院生 1名 (数理物質科学研究科前期課程 1名)

卒研究生 1名

本研究グループでは、メゾ系・ナノ系で顕在化する量子性と電子相関・非平衡性に起因する電子相関量子非平衡現象を「非平衡系の場の量子論」の手法を活用して理論的研究を進めている。量子ドット系の量子輸送現象の解析は、ドット系の電子相関とバイアス電圧による非平衡性を同時に考慮する必要があり、理論的な取り扱いが困難な問題の一つである。我々はこの問題に対し、種々の解析的手法と近似法を開発し、解析を進めている。これまで注力してきた電子間相互作用に対する解析的非平衡摂動計算に加え、本年度から文科省科研費「物質のゲージ理論とナノ系非平衡量子輸送現象」を新たに開始した(外部資金 [1])。これは、これまで必ずしも明確でなかった非平衡電流保存則を明示的に満たすべく、双対的記述として位相的自由度 (= 物質ゲージ場) による理論の構築・展開を意図するものである。加えて今年度は、関連する興味深いナノ量子輸送現象として量子ドット系の非平衡熱電現象および、格子モードと結合した量子ドット系の解析も行った。本年度の成果は以下のとおりである。

【1】量子ドットの解析的非平衡摂動論

不純物アンダーソン模型はナノ構造系の平衡・非平衡量子輸送現象を記述する基本的モデルである。このモデルで電子相関に関する摂動計算を行うと、非平衡電流が必ずしも保存されないことが以前より指摘されている。我々は有限バイアス下での電流保存の問題を再検討したところ、これまで20年以上もっぱら数値積分に依り評価されてきた2次摂動自己エネルギー Σ^R が、二重対数関数とよばれる特殊関数により厳密に評価可能であることがわかった。この評価を利用した解析的非平衡摂動理論 (Analytical Perturbative Treatment) は、ナノ構造系の非平衡性と相互作用効果を取り込み、電流保存則・スペクトル総和則を満たす。得られた自己エネルギーに関する解析的表式は、さらなる高度な近似を行うときの性質の良い礎となり得るものである。

(1) 不純物 Anderson 模型の非平衡スペクトル (論文 [1], 講演 [1,2])

不純物 Anderson 模型は、量子ドットを介した量子輸送現象を理論的に考察する際に標準的に用いられている理論模型であるが、主に電子-正孔対称性を持つ二端子系に理論研究が集中している。現実的な系では、ゲート電圧を制御変数として使うことが一般的であり、ゲート電圧に加え、リード・ドット間結合や電位降下の非対称性等により、系にはもはや厳密な電子ホール対称性は存在しない。我々は非平衡自己エネルギーの解析的表式を利用し、非平衡電流の保存則を陽に条件として課すことで、非対称不純物 Anderson 模型の非平衡スペクトルを求めた。得られた非平衡スペクトルは、電流保存則とスペクトル総和則を厳密に満たしていることが確認できた。また、電子正孔非

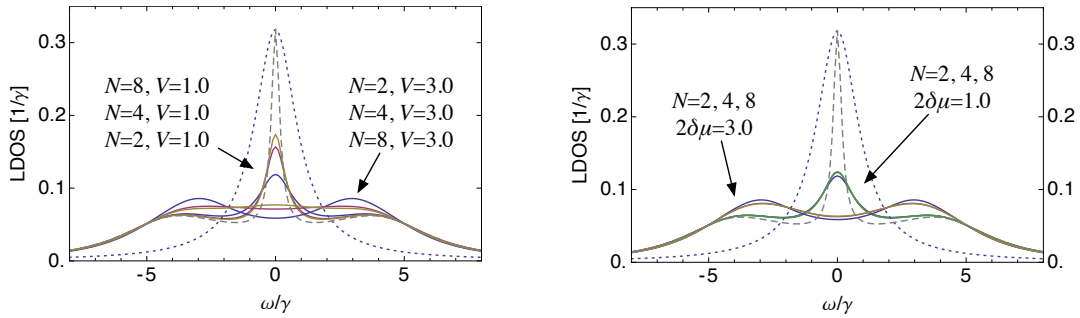


図1 N 端子系の非平衡スペクトル (左図) 端子の電圧を $-V/2, \dots, V/2$ とした N 端子系; (右図) 同じバイアス分散 $\delta\mu$ を持つ N 端子系

対称系でも $\Sigma^R(\omega)$ の解析的な表式により、有限バイアスが、近藤共鳴現象 (低バイアス領域) からクーロン閉塞現象 (高バイアス領域) への乗り移りをもたらすことを解析的に示すことができた。論議のある近藤共鳴の分裂に関しては、2次摂動の範囲では起こらず、特に電子ホール対称性が破れた系では、比較的小さなバイアス下から近藤共鳴を抑圧し、近藤共鳴の分裂ではなくクーロン閉塞共鳴へのミキシングが起こることがわかった。

(2) 非平衡定常状態の普遍的位相緩和 (論文 [1], 講演 [3])

量子輸送過程の位相コヒーレンスを攪乱する効果としては、有限温度効果と有限バイアス効果が代表的である。両者は物理的に多くの類似する性質や影響を持つ一方で、理論的に見ると、前者は平衡状態で可解模型、後者は非平衡定常状態で非可解模型、と大きく異なっている。解析的非平衡摂動論は、多端子絶対零度系に対する解析の結果であるが、その入力として端子の初期分布 $\bar{f}(\varepsilon) = \sum_a (\gamma_a/\gamma) \theta(\mu_a - \varepsilon)$ を入力情報として使っているため、多端子性を活用することで任意の端子初期分布の影響を調べることが可能である。特に適当な γ_a と μ_a を持つ仮想的な N 端子系を導入することで、有限温度による位相緩和効果と有限バイアス 2 端子系による位相緩和効果を $N = 2 \rightarrow \infty$ と連続的につなぎ、系統的に比較することができる。図1に解析的摂動論により得られた N 端子系の非平衡スペクトル結果を示す。非平衡スペクトルは端子数にはあまり依存せず、実質的にバイアス分散 $\delta\mu$ のみで特徴づけられることがわかった。 $N = 2$ では、 $\delta\mu = \sqrt{\alpha}eV/2$ (α は端子の非対称パラメータ)、 $N \rightarrow \infty$ では $\delta\mu = \pi k_B T / \sqrt{3}$ である。この結果は、非平衡定常電子相関係の位相緩和効果を考察する上で、可解な $N \rightarrow \infty$ 極限として平衡相関係が現れ得ることを示唆し、非平衡定常状態が持つ普遍的な挙動とも関連する興味深い結果である。

【2】非平衡量子輸送と物質ゲージ場 (外部資金 [1])

ナノ構造系の非平衡量子輸送を電子相関に関する摂動計算を行うと、必ずしも非平衡電流保存則が保証されず、電流保存則を条件として課すことで自己無撞着に解くことになる。電流保存則をこのような形で「課す」ことは理論的には不自然であり、非平衡電流保存則を自然に保証するような

理論的枠組みを構築することが強く望まれる。本研究は、このような問題を根本的に解消するため、ナノ系の非平衡量子輸送現象を物質ゲージ場の理論見地から再定式化し、解析することを目的とするものである。

量子輸送現象における物質ゲージ場の基本的な形は、電荷の位相自由度を用いて量子トンネルを記述した Ambegaokar-Eckern-Schön 理論である。そこで本年度は、非平衡量子輸送現象を扱うことが可能となるよう、完全計数統計の手法と組み合わせ、量子ドット系を流れる非平衡電流の生成関数を Keldysh 汎関数により構成した。汎関数積分は、位相場に関して 2 次展開 (Gauss 近似) を行うことで近似的に評価可能となるが、同時に閉時間経路において有限の巻き付き数を持つ経路配位を考慮することが重要である。これは後者が非摂動的寄与として電荷量子化効果 (Coulomb 閉塞効果) を担っているためである。得られた生成関数は、電子相関のない極限では完全計数統計の Levitov-Lesovick 公式を再現し、電子相関の効果は物質位相場の寄与として表される。現在、以上のようにして得られた完全計数統計の生成関数から、具体的に微分コンダクタンス、その揺らぎ・高次モーメントの挙動に関しての解析を進めている。

【3】ナノ構造系の熱電現象 (学位論文 [1])

ナノ構造系の量子輸送現象として熱電現象を考えることは、基礎物性の観点からだけでなく、応用上も重要である。特にナノ系では電子相関の影響が強く現れるだけでなく、微小領域に有限の温度差をつけると大きな非平衡性を持つことが不可避と考えられる。その結果、バルク系で成立する Wiedemann-Franz 則に制限されないような高効率の熱電素子をナノ系において実現できる可能性がある。本研究では量子輸送現象の中でも特に熱電効果に注目し、輸送過程での電子-格子相互作用と電子相関が熱電現象 (Seebeck 係数 S および熱電効率 ZT) に与える効果を解明することを目的として計算を行った。モデルとして、電子相関非平衡量子ドット系がフォノンと結合している Anderson-Holstein 模型を用いた。格子振動の効果を Mahan のユニタリ変換により取り込み、クーロン閉塞効果が支配的な温度領域を想定して電子相関を考慮して計算を行った。計算結果を図 2 に示す。線形領域では、熱電流 (Seebeck 電流) の符号変化は、状態密度の微分に比例し、電子正孔対称性を反映することが知られているが、その構造は有限の温度差をつけた場合に現れる熱電流に関しても予想以上に保持されていることがわかる (左図)。また熱電効率 ZT のゲート電圧依存性は、 γ/U に大きく依存し、特に Coulomb 閉塞共鳴ピーク付近で大きな熱電効率を得ようとすると大きな電子相関が必要であることがわかる。

研究業績

< 論文 >

1. N. Taniguchi, *Multi-terminal Anderson impurity model in nonequilibrium: Analytical perturbative treatment*, Phys. Rev. B **90** 115421 (2014).

< 学位論文 >

1. 卒業論文: 山本敬太「ナノ構造量子輸送に対する電子相関と電子-格子相互作用の効果」(筑波大学物理学類 2015 年 2 月).

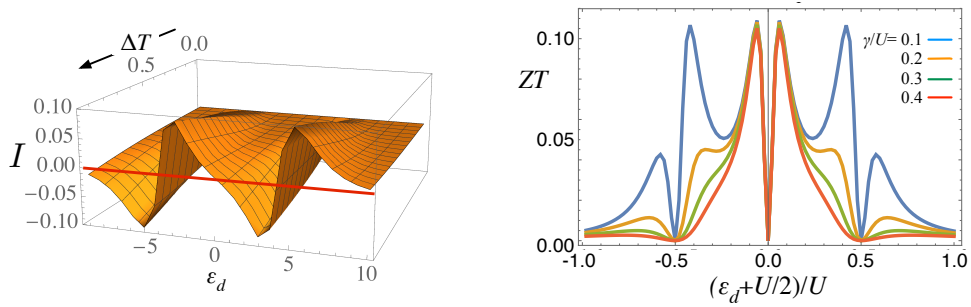


図2 (左図) 非平衡熱電流のゲート電圧依存性度。(右図) 熱電効率 ZT のゲート電圧と電子相関の依存性。

< 講演 >

1. 谷口伸彦 「非対称不純物アンダーソン模型の解析的非平衡摂動計算と電流保存」日本物理学会 2014 年秋季大会 (2014 年 9 月 8 日 中部大学).
2. N. Taniguchi, “Analytical Perturbative Treatment of Multiterminal Nonequilibrium Anderson Impurity Models” American Physical Society March Meeting (2015.03.03, San Antonio, USA).
3. 谷口伸彦 「アンダーソン模型の解析的非平衡摂動理論 II, 多端子性と温度効果」日本物理学会 第 70 回年次大会 (2015 年 3 月 22 日 早稲田大学).

< 外部資金 >

1. 文部科学省 科研費 基盤研究 (C) 「物質のゲージ理論とナノ系非平衡量子輸送現象」(研究代表: 谷口伸彦 2014 年度-2016 年度).