

VII-2 ナノ量子物性グループ

准教授 谷口 伸彦

大学院生 3名(修士課程3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・非平衡性が織りなす電子相関量子非平衡現象を調べるために、様々な場の量子論の解析手法と近似法の開発を行い、解析を行っている。非平衡量子ドット系で電子相関効果を一貫した近似で扱おうとすると電子相関の非摂動的効果を考慮することが必要不可欠となる。そのため、非平衡定常状態において、如何に摂動論を越えた電子相関を系統的に取り込むかが解決すべき課題である。ナノ系に現れる局所的電子相関効果の深い理解は、ナノ系量子デバイスの物性理解として重要なだけでなく、強相関電子系全般に現れるさまざまな強相関現象 モット絶縁体転移や擬ギャップ相・異常金属相の挙動 を理解する上での礎となる。このような観点より、本年度は文科省科研費「物質のゲージ理論とナノ系非平衡量子輸送現象」(外部資金 [1]) の課題研究を中心として研究を行った。また関連研究として、開放的量子ドット状態と端子状態の量子もつれに現れる電子相関効果の解析を行った。本年度の具体的な成果は以下のとおりである。

【1】非平衡量子輸送と物質ゲージ場 (外部資金 [1], 論文 [1], 講演 [1,2])

ナノ構造系の量子輸送の標準的モデルである、不純物準位 Anderson モデルで電子相関に関する非平衡摂動計算を行うと、非平衡定常状態では必ずしも電流保存則が保証されない。一般に、相互作用効果を局所ゲージ不変性 (ワード恒等式) を満たすように取り込むことは非自明であり、摂動補正を越える非摂動的効果を考慮することが必要となるためである。本研究では、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することで、非平衡電流保存則を自然に保証する理論的枠組みを構築し、電子相関の非摂動効果を含めて系統的に評価する方法を開発した。電子相関の最も単純な非摂動効果の例は、Coulomb 閉塞現象であり、対応する物質ゲージ場モデルは、位相自由度のみを用いる Ambegaokar-Eckern-Schön 理論である。しかし AES 理論は、位相揺らぎに関する 2 次展開近似をし、大きな揺らぎを持つ有限の巻き付き数効果等を考慮していないため、その適用領域は古典領域 (高温かつ電子数: 大) に制限される。そのため、単一準位 Anderson モデルのような量子性の強い系の解析には不適であり、近藤効果を取り込むこともできない。本研究では、大きな位相揺らぎの寄与を定量的に評価すると同時に近藤相関も考慮することができるように、電子の自由度に位相場を付加する「複合粒子描像」に基づく解析手法を開発した。これにより、位相揺らぎをゲージ不変性を満たすように高次まで取り込むと同時に、低温での近藤効果を記述することが可能となり、ナノ系の電子相関効果に関して高温領域から低温領域に渡って系統的なアプローチが可能となった。単一準位アンダーソンモデル模型に対して解析を行うと、温度を下げるに従い自己エネルギーに大きなエネルギー依存性が現れる。特にその虚部 (緩和関数) は、急激に低

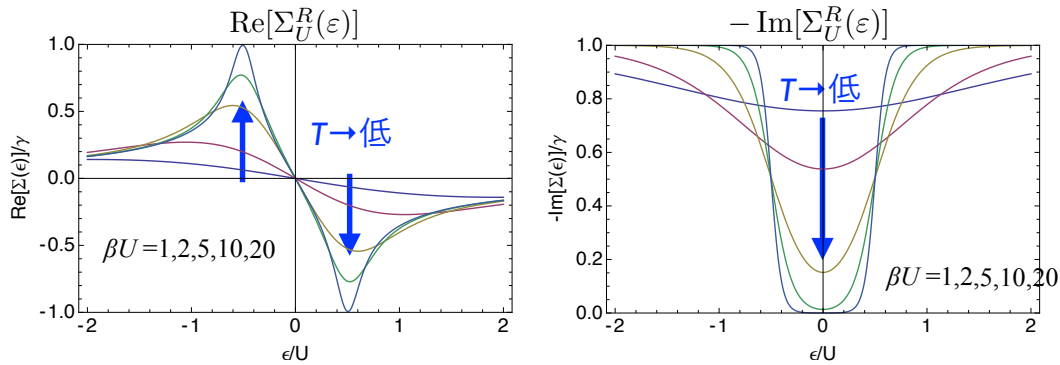


図 1 電子相関自己エネルギーのエネルギー依存性と温度依存性：実部（左）および虚部（右）

音で減少し、擬ギャップ挙動を示すことがわかる [図 1(右) 参照]。

【 2 】局所相関系の汎関数積分評価と自由粒子の新パラダイム (外部資金 [1], 論文 [2], 講演 [2])

汎関数積分法は物性分野の様々な分野で使われている大変強力な柔軟性のある手法であり、摂動計算や繰り込みに加え、さまざまな非摂動的効果や散逸効果を考察する上でも有効である。多くの利点を持つが、汎関数積分自体を直接評価することは、演算子順序や無限積の正規化など問題があり、それほど容易ではない。また、汎関数積分を厳密に評価できる系は（特殊な対称性を持つものを除き）実質的に Gauss 型 (=自由粒子系) の場合に限られているのが現状である。一般に、汎関数積分法は、原子相関・局所的相関のような強い非摂動効果を持つ相関系を扱うことは不得手である。このような事情のため、相互作用系の有効場理論とは「低エネルギー領域で本質的な役割を果たす自由度に関する Gauss 型モデル」を通常は意味する。しかし、このような Gauss 型有効場理論で記述され得ない相関系があることは明らかである。例えば Gauss 型理論では、低エネルギー励起は（繰り込まれた）Fermi 分布か Bose 分布に限られるが、これは、強相関物質の Mott 絶縁体相の励起の様子とは必ずしも相容れない。

本研究では、従来、汎関数積分法では評価が困難であった局所相関系に対して、汎関数積分を評価する具体的な手法を開発するとともに、厳密評価の際に自然に現れる物理描像に基づき、Mott 絶縁性の有効場理論の研究を行った。局所相関ハミルトニアンとして

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} + \frac{U}{2} \hat{N}(\hat{N} - 1); \quad \hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} \quad (1)$$

となる多準位局所相関系（電子系・ボーズ系； α は軌道/スピン自由度）をとる。この系に対して Keldysh 経路積分法による熱力学関数、スペクトル関数、および Green 関数の厳密評価を行った。更にこのアプローチを環境と結合した非平衡定常状態系へと拡張することで、系統的な近似計算を行った。

汎関数の厳密評価を通して得られた電子相関系の描像は、系がある種のランダムポテンシャル中

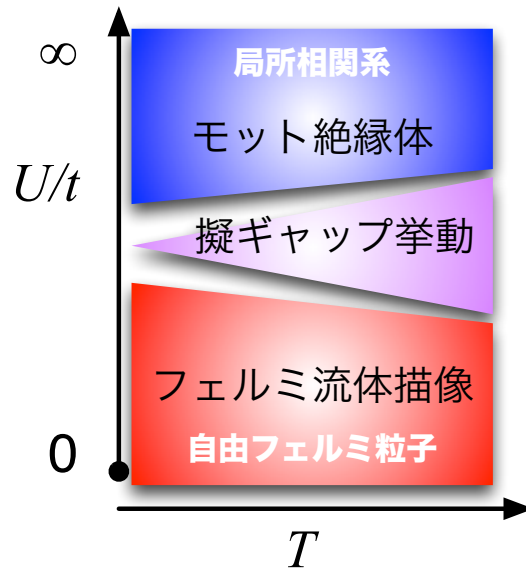


図 2 電子相関系における Fermi 流体描像と局所相関系の概念図。局所相関系は、強相関極限は自由粒子描像の対局にあたる。

の自由粒子として考えることが可能であることを示唆する。これらの局所相関系の一粒子スペクトル関数は、複数ピーク構造を持つのが特徴であり、伝統的な準粒子描像の範疇外にある。バルクの強相関電子系の局所近似として考えると、この「拡張された自由粒子系」が記述する系は、準粒子が存在せず非対称的な電子/正孔励起を持つ、つまり、従来本質的な多体相関効果として考えられてきた Mott 絶縁性の特徴をすべて再現している。そのため「Fermi 流体理論を超える自由粒子の新パラダイム」であると考えている (図 2 参照)。

【 3 】非平衡量子ドット系における電子相関と量子もつれ (学 位論文 [1])

リード端子が結合した量子ドット系の電子状態は、一般にドット状態とリード状態が混ざり合った状態 (= もつれた状態) になっている。バイアス電圧は状態もつれを増加させる一方で、量子ドットの電子相関は電子をブロックすることで状態もつれを小さくすると考えられる。状態のもつれ具合を直接測る指標としてエンタングルメントエントロピーが近年注目され利用されている。本研究では、ドット状態のエンタングルメントエントロピーを計算することで、量子ドット状態の電子相関と非平衡性のもつれ状態に与える影響を定量的に調べる事を目的とした。量子ドット系の準位数が少数の場合には、エンタングルメントエントロピーを占有数揺らぎにより厳密に書き表すことが可能である。特に最も単純な単一準位量子ドットのエンタングルメントエントロピー S_d に関しては以下のことがわかった。(1) S_d はドットの電子数とその分散に表される、測定可能な物理量である。(2) S_d は相互作用の有無や平衡・非平衡性にかかわらず、ドットの電子数が $\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$ を満たすときに、最大値を取る (この関係は電子相関がないときに成立)。(3) S_d は、全体的にはコンダクタンスと類似の挙動を示すが、コンダクタンスとは異なり、ピーク位

置での S_d の値は、常にほぼ最大値 $\log 4$ が実現される。これは、コンダクタンスのピーク値が低い時であっても、最大限にもつれた状態が実現されていることを意味する。

研究業績

< 論文 >

1. N. Taniguchi, “Exact path integral evaluation of locally interacting systems, and expanding the free-particle paradigm” (in preparation).
2. N. Taniguchi, “Local gauge symmetry and multi-peak structure of the spectra function of open locally interacting systems” (in preparation).

< 学位論文 >

1. 卒業論文：久保賢太郎「非平衡量子ドット系における電子相関と量子もつれ」(筑波大学物理学類 2016 年 2 月)

< 講演 >

1. 谷口伸彦・新井和明「非平衡量子ドットの計数場依存有効作用：電荷の量子化と揺らぎ効果」日本物理学会 2015 年秋季大会 (2015 年 9 月 17 日 大阪市立大学)
2. 谷口伸彦「非平衡量子ドット系の電子相関と動的複合フェルミオン描像」日本物理学会 第 71 回年次大会 (2016 年 3 月 19 日 東北学院大学)

< 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).