

## 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）

本研究グループでは、量子ナノ構造系で特に顕著に現れる、電子相関効果と非平衡性が織りなす「非平衡電子相関現象」を調べるため、場の量子論の手法に基づき、基礎物理の理解と様々な解析法・近似法の開発を行っている。ナノ量子系に現れる非平衡電子相関現象を理解することは、ナノ系量子デバイスの物性理解のために重要なだけでなく、強相関電子系全般に現れるさまざまな相関現象を理解する上でも不可欠である。本年度は、これまで進めてきたプロジェクトについて、その総括とともに、得られた成果の再検討等を中心に研究活動を行った。本年度の具体的な成果は以下のとおりである。

### 【1】局所相関系の汎関数積分評価とモット絶縁性（外部資金 [1], 論文 [1]）

経路積分は物性分野の様々な分野で使われている大変強力な方法である。特にコヒーレント状態を用いたコヒーレント状態経路積分法は、生成消滅演算子の  $N$  積でかけられるハミルトニアンと直接対応するため極めて有用である。このような大きな利点を持つ経路積分法であるが、経路積分自体の厳密評価は演算子順序や発散的無限積の問題のためそれほど容易ではなく、実質的にガウス型モデル＝自由粒子モデルに限られている。このようなこともあり、相互作用系の有効場理論とは、Hubbard-Stratonovich 変換により導入された「系を特徴づける本質的な自由度」についてガウス型モデルを構築することを意味する。しかし、例えば（磁気秩序を伴わない）強相関モット絶縁体系を記述するガウス型有効理論は未だ確立されていない。

本研究では経路積分法による局所相関系経路積分の厳密評価を考察した。具体的な局所相関ハミルトニアンとして、モット絶縁体の原子極限に相当する  $H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} + \frac{U}{2} \hat{N}(\hat{N} - 1)$  を考える [ここで  $\hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{n}_{\alpha} = \sum_{\alpha} \int_{\alpha} \psi_{\alpha}^{\dagger} \psi_{\alpha}$ ;  $\alpha$  は軌道/スピン自由度]。この局所相関系は、演算子法で可解であるが、経路積分法により評価すると誤った結果を導くことが知られていた。本研究では、経路積分の連続時間極限では相互作用項に特有の演算子順序の問題があり、それを解決する具体的処方箋を提案することで、局所相関系に対するコヒーレント状態経路積分法の正しい評価方法を確立した。

経路積分の評価を確立することで現れた物理描像は、局所相関系を動的位相揺らぎが付与された「動的複合粒子」としてみなすことができることを示す。これは、場の演算子  $\psi_{\alpha}(t)$  がゲージ変換により  $e^{i\theta(t)} \Psi_{\alpha}(t)$  と変換され、孤立局所相関系では  $\theta$  と  $\Psi_{\alpha}$  の寄与が分離することで厳密評価が可能となることによる。このような「動的複合粒子」描像は、一粒子スペクトル関数は複数ピーク構造と非対称的な電子/正孔励起を持ち、従来のフェルミ流体論、伝統的な準粒子描像の範疇外にあり、モット絶縁性が特徴づける「非フェルミ流体固定点」の簡単なモデル化になっていると期待できる。

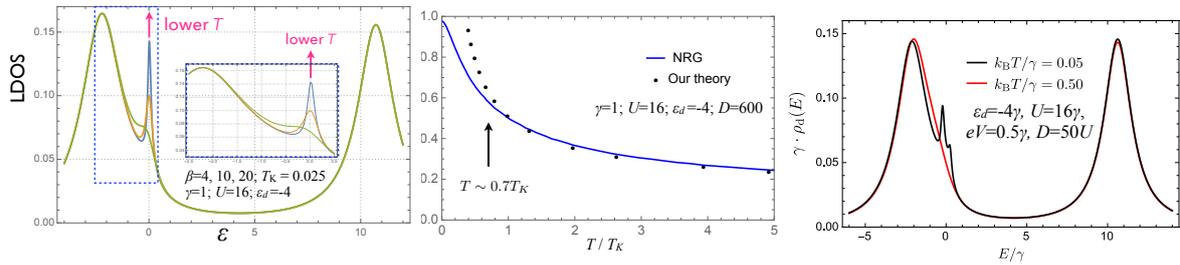


図1 (左) 動的複合粒子描像による平衡系局所状態密度スペクトルの温度変化。低温において  $\varepsilon \approx 0$  付近に近藤ピークが現れる。挿入図は  $\varepsilon \approx 0$  付近の拡大図。(中央) 線形コンダクタンスの温度依存性。Costi-Zlatic (2010) らによる数値くりこみ群による結果との比較。  $T \gtrsim 0.7T_K$  の温度領域では、解析結果が定量的にも良く一致する。(右) 有限バイアスにおける非平衡局所状態密度スペクトル。低温で現れる  $\varepsilon \approx 0$  付近の近藤ピークが有限バイアスにより分裂する。

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

ナノ構造系の量子輸送を電子間相互作用を摂動として非平衡摂動計算を行うと、非平衡電流保存則を満たさない結果が得られることが知られている。これは、電子相関効果を局所ゲージ不変性を破らずに考慮するためには非摂動的寄与が不可欠なためである。我々は孤立相関系で成功した複合粒子描像を局所相関系 (=量子ドット) と環境が結合する開放系/非平衡定常状態へと拡張することで、電子相関の非摂動効果を考慮した非平衡ナノ系量子輸送現象の研究を進めている。

(1) ゲージ不変性はガウス近似を越えた動的位相ゆらぎを取り込むことにより保証される。我々は、Keldysh 経路積分法に位相演算子の方法を援用することで、電子系への繰り込み効果を解析的に近似した。このようにして得られた電子の自己エネルギーは比較的単純な構造を持ちながら、クーロン閉塞現象・近藤効果という競合する異なる電子相関効果を統一的に理解することが可能である (図1左)。得られた近似結果の信頼性を定量的に評価するため、平衡ドット系の数値繰り込み群結果と比較検討を行うと、高温から近藤温度  $T_K$  程度の温度領域に対しては定量的にもかなり良い一致を示すことが確認できた (図1中央)。この解析的近似法は有限バイアスをかけた非平衡相関量子ドット系に対して適用可能である。その結果、近藤ピークが有限バイアスにより分裂することがわかる (図1右)。

(2) 動的位相ゆらぎにより電子相関を取り込む解析法が、柔軟な拡張性を持つことを確認するため、「サイド結合 T 字型二重量子ドット系」 (図2左) への適用を行った。近似により得られた各ドットのスペクトル関数および線形コンダクタンスは、低温領域において相互作用により2個の量子ドット間でスペクトル関数の乗り移りが起きる反近藤効果共鳴が現れていることが確認できた (図2右)。

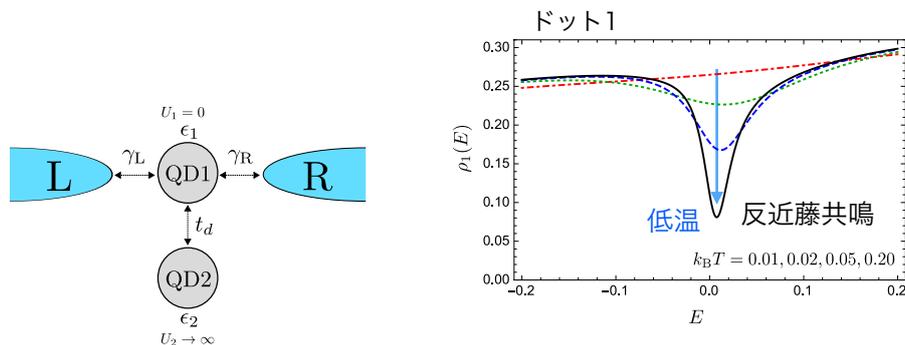


図2 (左) サイド結合 T 字型二重量子ドット系の模式図。(右) 量子ドット 1(QD1) の状態密度の温度変化。量子ドット 2(QD2) の近藤効果により、半行動共鳴が低温で現れる。

### 【3】 ナノ量子系の量子熱力学 (外部資金 [1], 論文 [2], 講演 [1,2])

定常状態 (steady state) は時間に依存しない状態であるが、平衡状態とは異なり、外部環境の駆動により様々な定常流が内部に存在する。そのため、系の内部エントロピーは時間とともに増大する不可逆状態である。このような不可逆状態に対し、一貫した熱力学・統計力学の枠組みを構築可能か否か、という問題は、理論物理が長く取り組む基礎的難題の1つである。

我々はナノ系「量子熱力学」の側面より、この定常状態熱力学の構築に取り組んでいる。ナノ系の量子輸送で使われる量子ドット系は、異なる温度と化学ポテンシャルを持つ複数の外部環境系 (=リード) に強く結合される非平衡定常状態にある (図3)。また、ナノ系はいわゆる「熱力学極限」とは対極にある微小系であるが、熱力学法則が成立することが知られている。ナノ量子系の特性は量子力学を基本法則として完全に決定されるため、量子力学に基づき非平衡熱力学を構築する「量子熱力学」の考え方に沿う形でナノ系定常状態の熱力学を構築可能である。本研究では、相互作用がないナノ量子系、および単一準位アンダーソン模型に対して、定常状態を特徴づける熱力学関数として還元密度演算子に付随する熱力学関数を考察した。得られた結果は以下の通りである。

**ナノ定常状態の熱力学関数** 任意の非線形領域で、定常状態の熱力学量のみならず量子輸送現象をも特徴づける熱力学関数として、時間不変な Massieu-Planck 関数 (の定常状態拡張)  $\Phi_{ss}$  が存

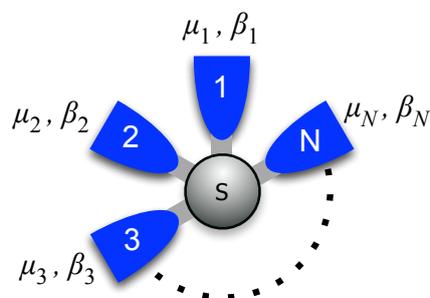


図3 異なる化学ポテンシャル・温度をもつ外部環境 (端子) と線形結合する量子ドット系の模式図。

在し、次のような熱力学関係式（の定常状態拡張）が成立する。

$$d\Phi_{\text{ss}} = \hat{N}d(\bar{\beta}\mu) - \bar{E}d\bar{\beta} + \frac{\hbar}{2\gamma} \sum_a (I_a dA_a^N + J_a dA_a^E)$$

ここで、 $A_a^N, A_a^E$  は外部環境によるアフィニティー（親和力）を表し、端子  $a$  からドットへ流入する非線形粒子流  $I_a$ 、非線形エネルギー流  $J_a$  はランダウアー公式で得られるものと一致する。この微分関係式に基づき、非線形領域に Maxwell 関係式や Onsager の相反定理を拡張することが可能である。

#### 低温領域における臨界熱揺らぎ

統計力学における大偏差原理によると、熱力学エネルギーは平均のみならずその揺らぎもキュムラント生成関数として特徴づけることが知られている。相互作用のない量子ドット系については、完全計数統計として電流・熱流のキュムラント生成関数  $F(\lambda)$  が Levitov-Lesovik 公式として知られているが、定常状態の熱力学関数とどのように関係付けられるのかは、現時点ではまだわかっていない。我々は、特に非平衡共形場理論やホログラフィック理論を用いて考察されてきた低温領域における臨界的熱流に注目し、 $F(\lambda)$  は定常状態熱力学関数  $\Phi_{\text{ss}}$  と次のような簡単な関係があるのを見出した。

$$F(\lambda) = \frac{\gamma}{\hbar} [\Phi_{\text{ss}}(\bar{\beta}, A^E + 2i\lambda) - \Phi_{\text{ss}}(\bar{\beta}, A^E)],$$

ここで熱流は異なる逆温度  $\beta_{1,2}$  をもつ端子間に流れ、 $\bar{\beta} = (\beta_1 + \beta_2)/2$ ,  $A^E = -\beta_1 + \beta_2$  である。この場合、揺らぎの定理は親和力  $A^E$  の反転対称性に対応することが明らかになった。

### 研究業績

#### <論文>

1. Nobuhiko Taniguchi, *Exact path integral evaluation of locally interacting systems: the subtlety of operator ordering*, Phys. Rev. A **96** 042105 (2017) [arXiv:1709.09303].
2. Nobuhiko Taniguchi, “Quantum thermodynamics of nanoscale steady states far from equilibrium” Phys. Rev. B **97** 155404 (2018) [arXiv:1710.07385].

#### <学位論文>

1. 修士論文：新井和明：「非平衡量子ドット系の非摂動効果：位相演算子法による解析」筑波大学数理物質科学研究科 2017 年度 修士（理学）。

#### <講演>

1. 谷口伸彦「ナノ系定常状態の非平衡量子熱力学」日本物理学会 2017 年 秋季大会（2017 年 9 月 24 日，岩手大学）。
2. N. Taniguchi, *Quantum thermodynamics of nanoscale steady states far from equilibrium*, March Meeting, American Physical Society (2018 年 3 月 8 日 LA Convention Center, USA).

#### <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-2017 年度).