

平成 30 年 6 月 19 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400382

研究課題名(和文)物質のゲージ理論とナノ系非平衡量子輸送現象

研究課題名(英文)Matter gauge description and nonequilibrium transport phenomena of quantum nanostructure systems

研究代表者

谷口 伸彦(TANIGUCHI, Nobuhiko)

筑波大学・数理物質系・准教授

研究者番号：70227221

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 1,700,000円

研究成果の概要(和文)：電荷電流の保存則は当然満たすべき基本的法則であるが、ナノ系量子輸送の電子相関効果を非平衡摂動論により計算を行うと電荷保存則を破る結果を得る。この問題を踏まえ、本研究課題は、非平衡系で電荷保存則を明示的に満たし、かつ強い電子相関効果を取り込むことのできる「動的複合粒子描像」に基づく手法を提案開発し、非平衡量子ドット系の電子相関効果を統一的に記述できることを明らかにした。また新たな知見として、局所相関系の経路積分の厳密評価法を考案するとともに、ナノ量子系の非平衡定常状態に対して、具体的に量子熱力学を構築し、輸送現象との関連を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The conservation of charge and current is the fundamental law of physics that must be fulfilled in physics, including nanoscale physics of quantum transport. Nonetheless, when one applies a general formulation of the nonequilibrium perturbation theory, the result sometimes breaks the law. The present project was undertaken to clarify how we can construct a theoretical analysis that can treat the strong correlation effect at nanoscale by ensuring the charge-current conservation. To do that, we proposed and developed approximation schemes based on the concept of "dynamical composite particle" and showed that it gives a unified picture of strong correlation. Moreover, as new directions associated with the project, we were able to develop the exact path integral evaluation of locally interacting systems, as well as quantum thermodynamics of nanoscale steady states far from equilibrium.

研究分野：物理学

キーワード：量子ドット 量子輸送 強相関電子系 非平衡現象 ナノ系

1. 研究開始当初の背景

単電子トランジスタに代表される半導体量子ドットやナノ構造をもつ量子素子は、スケーラビリティに優れ応用上も重要であると同時に、基本構成要素としてその基礎物性の十分な理解が求められている。ナノ系量子輸送現象に現れる非平衡性と電子相関効果が織りなす「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必要不可欠である。しかし、従来、平衡系物性を調べる際に強力な役割を果たしてきた第一原理計算や、平衡強相関係で大きな成功を収めた Bethe 仮説法・数値計算繰り込み群等の解析手法は、非平衡電子相関現象を解析する上で様々な困難や課題に直面していた。非平衡不純物準位 Anderson 模型は、現在、低温領域での単電子トランジスタの量子輸送を考える際に標準的に用いられる非平衡電子相関模型である。然しながら、この系の非平衡定常状態における電流保存則は必ずしも自明ではなく、例えば電子正孔対称性のない非対称 Anderson 模型で電子相関の非平衡摂動計算を実行すると、二次摂動自己エネルギーが電流保存則を破ることが知られている。現実の半導体素子では、ゲート電圧、ドット-左右リード結合の非対称性、リング構造や多端子の存在により、電子正孔対称性がほぼ常に破れた状態にある。電流保存則と付随するワード恒等式の問題は、摂動論に限らず非平衡輸送を扱うあらゆる近似法に共通する問題であり、ad-hoc ではない根本的理論的解決が求められていた。

2. 研究の目的

一般に、非平衡性と電子相関が混在するナノ構造系に適用可能で信頼性の高い理論的手法はそれほど多くはない。電子相関に関する非平衡摂動計算は、本来ならば信頼性を確保できる有力な近似法の一つであり、その他多くの「より洗練された近似法」の基礎となるはずである。にもかかわらず、非平衡ナノ系での摂動計算が系の持つ基本的な「電流保存則」を必ずしも保証しないという事実は、従来の理論的枠組みに根本的な変更を要請しているといえる。電

荷保存則の問題を根本的に解決するためには、保存則を要請するゲージ不変性が明示的な物質のゲージ理論による定式化が最善であるというのが申請者の考えであった。

物質のゲージ場とは物質の自由度を位相自由度により取り扱うことを意味する。位相演算子は数演算子と共役の関係にあるため、位相場によるアプローチは従来と相補的な新しい視点をナノ系の非平衡電子相関輸送現象にもたらす。ゲージ理論における解析手段を援用し、ナノ系の非平衡量子輸送現象を物質のゲージ理論・物質位相自由度の観点から再定式化することで、自然に正しい対称性と保存則を保証する理論的枠組みを構築し、ナノ系の非平衡相関量子輸送現象に新たな視点から系統的な解析を実行することを目的とした。

3. 研究の方法

(1) モデル

量子ドット系を介した量子輸送現象を考察するため、電子相関をもつ量子ドット系が、異なる温度と化学ポテンシャルを持つ複数の外部環境 (= 端子) と線形結合する「多端子非平衡 Anderson 模型」を導入した (図 1)。簡単のため、外部環境のバンド幅を無限大とするワイドバンド極限を想定する。この模型は、端子間にかかる有限バイアス電圧効果と多体相互作用効果 (電子相関によるクーロン閉塞現象 / 近藤効果) を取り込む、量子輸送現象の標準模型である。特に有限バイアス領域においては理論的取

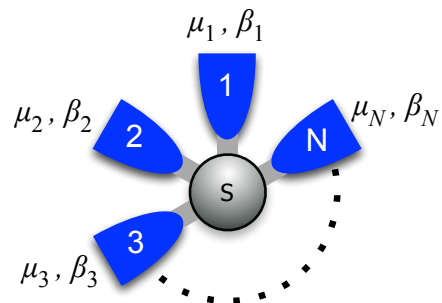


図 1 異なる化学ポテンシャル・温度をもつ外部環境 (端子) と線形結合する量子ドット系の模式図。

り扱いの難しい模型であり、種々の近似手法に頼らざるを得ない。

(2) 解析方法

非平衡量子現象を扱うことのできる手法として、Schwinger-Keldysh 形式による非平衡 Green 関数法を採用し、量子ドット系の非平衡局所状態密度スペクトル、およびドットを介して端末間に流れる非線形電流・コンダクタンスの評価を行った。本研究課題の解析に用いた手法は、以下に述べる①従来からの摂動法を改良した手法、および②本研究課題のもとで新しく考案・開発した解析手法、である。

①「解析的非平衡摂動計算」従来の電子相関に関する非平衡 2 次摂動寄与を解析的に評価し、電流保存則の問題を解決するためドット系の占有数と状態スペクトル関数の間に自己無撞着条件を課して近似解を構成した。この解析法は電子相関の摂動論に基づくため、弱相関領域からのアプローチである。

②「動的複合粒子描像に基づく非摂動解析近似」電流保存則とゲージ不変性が明示的な解析法として、強電子相関効果を「大きな動的位相揺らぎをもつ複合自由粒子」として近似する。動的位相ゆらぎをガウス近似を越えて考慮することでゲージ不変性を保証するため、Keldysh 形式の経路積分法と演算法による位相表示（位相の Susskind-Glogower 形式）を併用した。この解析法は孤立局所相関系で厳密な結果を与える（後述）ため、強相関領域からのアプローチと考えることができる。

4. 研究成果

(1) 解析的非平衡摂動理論と電流保存則

現実的な系では、ゲート電圧、リード・ドット間結合や電位降下の非対称性、多端子の存在等により、系には厳密な電子正孔対称性は必ずしも存在しない。このような非対称系で電子相関に関する非平衡摂動計算を行うと、電流保存則が満たされることが以前より指摘されていた。本課題を遂行するにあたり、改めて従来の摂動計算の再検討を行ったところ、これまで 20 年以上、数値積分により評価されてきた絶対零度の 2 次摂動自己エネルギー寄与

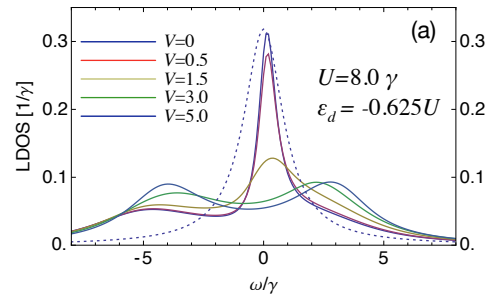


図 2 電子ホール非対称系での非平衡局所状態密度スペクトルの計算例。

が、特殊関数により解析的に評価可能であることがわかった。この解析的表式に基づき、有限バイアス下での自己無撞着解析法を提案した。得られた非平衡局所状態スペクトルは、電子正孔非対称系であっても電流保存則とスペクトル総和則を満たし、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）への乗り移りを統一的に記述することがわかった（図 2）。

(2) 非平衡位相緩和：多端子性と温度効果

ナノ量子輸送の位相コヒーレンスを攪乱する効果としては、有限温度と有限バイアスが代表的である。両者は物理的に類似した影響を示す一方で、前者は平衡系で可解な模型、後者は非平衡系のため解析が容易でない、と理論的状況は大きく異なる。解析的非平衡摂動理論は多端子絶対零度系に対する解析であるが、その多端子性を活用することで端子の任意の初期分布の影響を調べることができる。そこで、非平衡電子相関の有限バイアスによる位相緩和効果を平衡系の有限温度効果に系統的に近似する方法を提案した。

解析的非平衡摂動理論により得られる非平衡スペクトルは、外部端子数 N 自体にはほとんど依存せず、実質的にバイアス分散 $\delta\mu$ のみでよく特徴づけられることがわかった（図 3 上）。 $\delta\mu$ を一定に保持しながら端子数を $N = 2$ から $N \rightarrow \infty$ へとふやすことで、バイアス電位配置をフェルミ分布関数に移行させることができる（図 3 下）。これは、2 端子系のバイアス電圧 V による非平衡

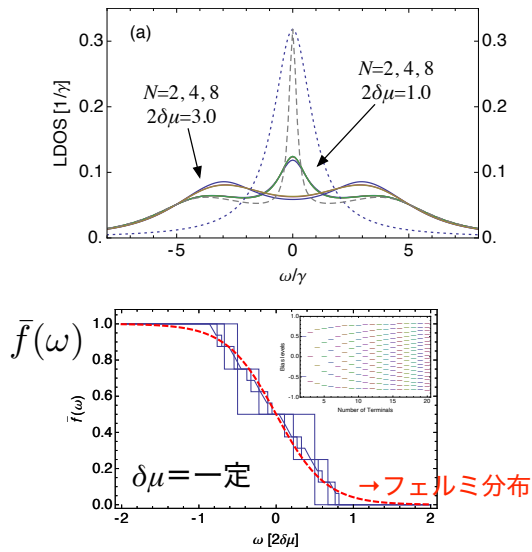


図3 (上図) 非平衡局所状態密度の端子数依存性。スペクトル形状がバイアス分散 $\delta\mu$ のみで特徴づけられることを示す。(下図) $\delta\mu$ を固定して末端数 N を増加させることにより、有限温度のフェルミ分布 (赤線) に漸近する。挿入図は各端子数におけるバイアス単位の位置を示す。

位相緩和効果を $N = \infty$ で漸近するフェルミ分布関数の有限温度 T の位相緩和効果で近似的に置き換え可能であることを示す。両者の関係は、 $3(\delta\mu)^2 = 3\alpha(eV)^2/4 = \pi^2 k_B^2 T^2$ (α は端子の非対称係数) となることがわかった。

(3) 局所相関系の汎関数積分厳密評価

電子相関の非摂動的効果の代表的例は、相互作用量子ドット系の孤立極限である。強い局所相関を持つ孤立多準位系を汎関数積分法で評価しようとする、電子自由度を完全に消去する物質ゲージ場の枠組みでは、強結合領域の問題となり、その寄与を定量的に評価することは困難であった。一方、局所相関孤立系では演算子法により分配関数・グリーン関数を厳密に計算可能であることが知られている。そのため新たに電子の自由度を消去することなく動的位相を電子に付加する「動的複合粒子描像」に基づく解析手法を開発し、孤立系において局所相関汎関数積分を厳密に評価できることを示した。この複合

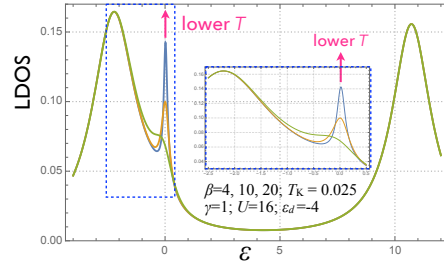


図4 動的複合粒子描像による局所状態密度スペクトルの温度変化。温度に鈍感な2つのクーロンピークがあり、低温において $\varepsilon \approx 0$ 付近に近藤ピークが現れる。挿入図は $\varepsilon \approx 0$ 付近の拡大図。

粒子描像は量子ホール系でのものとは異なり、位相 (=磁束) の時間依存により電磁誘導を介して局所電子相関効果を記述するものである。

(4) 動的複合粒子描像による解析

孤立相関系で得られ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、電子相関を考慮したナノ系量子輸送現象を考察した。

① 非平衡領域の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。動的位相の大きなゆらぎによる繰り込み効果を、位相演算子の手法を経路積分法に援用することで解析的な近似を行った。このようにして得られた電子の非平衡自己エネルギーにより、クーロン閉塞現象・近藤効果という電子相関効果とその非平衡系での挙動を統一的に理解できることがわかった (図4および5)。

② ①で得られた解析的近似の妥当性を定量的に評価するため、数値繰り込み群で厳密に取り扱い可能な線形コンダクタンスについて、温度依存性の結果を定量的に比較検討した。その結果、現在の解析手法は高温から近藤温度 T_K 程度の温度領域に対して定量的にもかなり良い一致を示すことが確認できた (図6)。

③ 動的複合粒子描像による解析法が柔軟な拡張性を持つことを示すため、二重量子ドット系 (「サイド結合 T 字型二重量子ドット系」) への適用を行い、

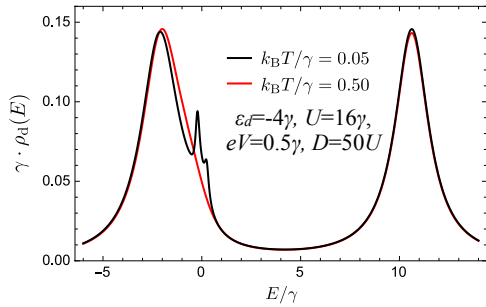


図5 有限バイアスにおける非平衡局所状態密度スペクトル。低温で現れる $\epsilon \approx 0$ 付近の近藤ピークが有限バイアスにより分裂しているのがわかる。

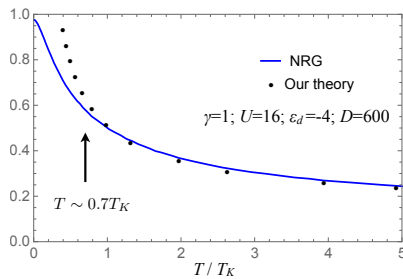


図6 線形コンダクタンスの温度依存性。Costi-Zlatic (2010) らによる数値くりこみ群による結果との比較。 $T \gtrsim 0.7T_K$ の温度領域では、我々の解析手法が良く一致することを示す。

各ドットのスペクトル関数およびコンダクタンスを評価した。相互作用により低温では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、いわゆる「反近藤効果によるコンダクタンス減少現象」を定性的に記述することを確認した。

(5) 当初予期していなかった新たな知見

ナノ系の非平衡量子輸送現象に対して、電荷保存則を自然に満たす有効場理論 (=マクロ的現象論) の構築とは、有限の流れを持つ非平衡状態を記述する熱力学の構築と言い換えることができる。このような観点から、定常状態の熱力学的性質を量子力学に基づいて構成する「量子熱力学」の研究は、ナノ系の量子輸送を今後考える上で重要な役割を果たすと考える。本研究課題の派生物として、ナノ系定常状態を記述する熱力学関数を具体的に構成し、熱力

学量のみならず Landauer 公式で表される非線形量子輸送現象をも特徴づけられることを示した。特にスピン縮退単一準位をもつ量子ドット系に対しては、このような非平衡定常熱力学の構造が相互作用の有無によらず存在することを示すことができた。

(6) 成果の国内外における位置づけとインパクト

① 本研究課題は、系の持つゲージ不変性・位相的自由度 (=物質ゲージ場) に着目し、ナノ系の非平衡量子輸送現象を新たな視点から系統的に解析を実行することの可能な手法を構築・展開した。その結果、電荷保存則を明示的に満たし、かつ強い電子相関効果を動的位相自由度として非摂動的に取り込むことのできる「動的複合粒子描像」を提案し、およびそれに基づく解析的近似法を展開することができた。これが本研究の重要な成果である。

② 汎関数積分法は物理の各分野で利用されている大変強力な柔軟性のある手法であるが、汎関数積分を厳密評価可能な系は実質的にガウス型模型 = 自由粒子系のみである。そのため、相互作用系の有効場理論とは通常「低エネルギー領域で本質的な自由度に関するガウス型模型」を意味する。得られた結果は新しいタイプの固定点理論があることを示唆し、相関量子系の概念や理論手法にパラダイムシフトを起こし得る、興味深い結果と考える。

(7) 今後の展望

① 本研究課題で展開した「動的複合粒子描像による解析的近似」は、図6に示すように現時点では極低温領域で、信頼性が低下する。これは、現在位相揺らぎの評価に用いている近似による技術的な問題と考えており、今後、さらに改善される余地があると考えている。

② 新たな知見として得られた、ナノ量子系の量子熱力学は、通常の平衡系熱力学の範疇を大きく越え、量子輸送現象である電流・熱流をも記述する非平衡定常状態熱力学の具体例である。量子輸送現象に対するこのような熱力学的アプローチは、量子情報理論とも絡めて近年活発に研究をはじめられたが、いまだ発展途上であり、今後の発展が期待される。

謝辞 本研究課題の共同研究者である新井和明氏に深く感謝する。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 3 件)

- ① N. Taniguchi, *Quantum thermodynamics of nanoscale steady states far from equilibrium*, Phys. Rev. B **97** 155404 (2018), 査読有 [arXiv:1710.07385].
DOI:10.1103/PhysRevB.97.155404
- ② N. Taniguchi, *Exact path integral evaluation of locally interacting systems: the subtlety of operator ordering*, Phys. Rev. A **96** 042105 (2017), 査読有 [arXiv:1709.09303].
DOI:10.1103/PhysRevA.96.042105
- ③ N. Taniguchi, *Multiterminal Anderson impurity model in nonequilibrium: Analytical perturbative treatment*, Phys. Rev. B **90**, 115421 (2014), 査読有 [arXiv:1409.1294].
DOI:10.1103/PhysRevB.90.115421

[学会発表] (計 10 件)

- ① 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).
- ② 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.
- ③ 新井和明, 谷口伸彦, 「非平衡量子ドット系における位相揺らぎの解析評価: クーロン閉塞と近藤効果」日本物理学会 第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17 日, 大阪大学.
- ④ N. Taniguchi, *Analytical results for locally interacting systems: How strong fluctuations of emergent gauge fields affect charge-blocking physics*, March Meeting, American Physical Society, 2017 年 3 月 13 日, Ernest N. Morial Convention Center (USA).

- ⑤ 谷口伸彦, 「局所相互作用計の汎関数積分厳密評価とモット絶縁性の自由量子描像」日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 15 日, 金沢大学.
- ⑥ 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.
- ⑦ 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.
- ⑧ 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.
- ⑨ N. Taniguchi, *Analytical Perturbative Treatment of Multiterminal Nonequilibrium Anderson Impurity Models*, March Meeting, American Physical Society, 2015 年 3 月 3 日, Henry B. Gonzalez Convention Center (USA).
- ⑩ 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.

[その他 (学位論文)] (計 1 件)

- ① 新井和明: 修士 (理学) 「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).

6. 研究組織

- (1) 研究代表者
谷口 伸彦 (TANIGUCHI, Nobuhiko)
筑波大学・数理物質系・准教授
研究者番号 70227221
- (2) 研究協力者
新井 和明 (ARAI, Kazuaki)
筑波大学・数理物質科学研究科・大学院生