

# 半導体物理学 その10

勝本信吾

東京大学 理学系研究科・物性研究所

2016年6月20日

## 第4章 量子細線と量子輸送の基礎

量子閉じ込めによる2次元系の次元を更に1次元下げて、1次元系としたものが量子細線 (quantum wire) である。輸送現象が起こる最低の次元であり、伝導度量子化という著しい現象が生じるため、量子輸送概念を組み立てる上でも重要である。

### 4.1 量子細線の形成

まず、実験でどのように量子細線を形成するか、方法の例を見ておく。

#### 4.1.1 スプリットゲート法, その他物理的形成法

スプリットゲート法は、2.6.1, 2節で見たショットキー障壁を形成する表面金属を微細加工してショットキー空乏層で2次元電子系を様々な微細形状に変化させる方法である。

スプリットゲートで主に使用されるのは、図4.1(a)のように、負の $V$ を加えてゲート領域の $Q$ を増加すなわち $N_{\text{dep}}$ を減少させ、ゲート下から電子を排除し、さらにその排除領域(空乏層)をゲート電圧で制御するものである。

図4.1(b)のように、間隔 $w$ で半無限の金属を表面に置いたときに生じるポテンシャルを考える。ゲートに電圧を加えて線密度 $\sigma$ の電荷がゲート金属に発生したとし、これは一様と近似する。スプリットゲートによる面垂直方向の電場 $\mathcal{E}_z(d)$ は、

$$\mathcal{E}_z(d) = \frac{-\sigma}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \left[ \pi + \arctan\left(\frac{x-w/2}{d}\right) - \arctan\left(\frac{x+w/2}{d}\right) \right] \quad (4.1)$$

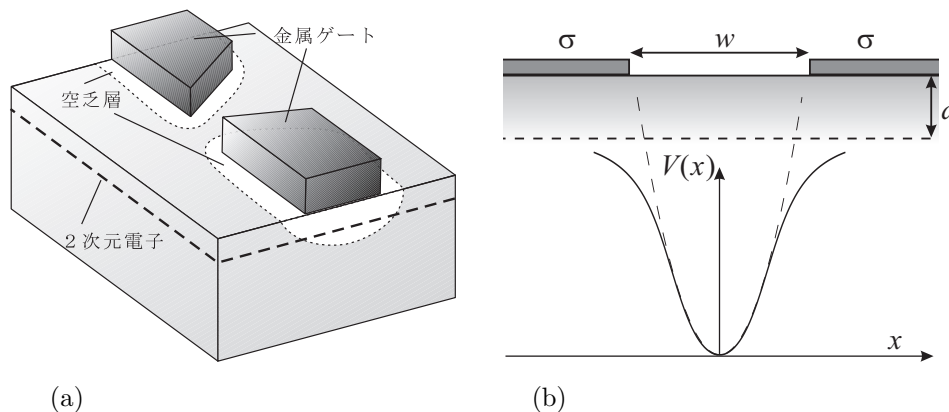
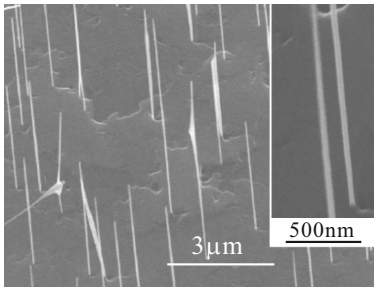
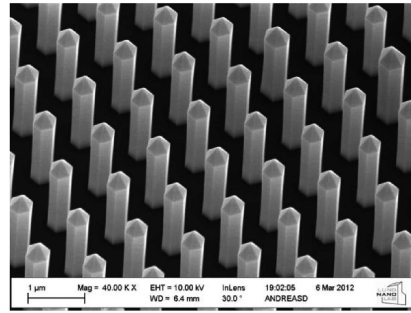


図 4.1 (a) スプリットゲートを用いた微細系の作製法の概念図. (b) 簡単なモデルによるスプリットゲートの作るポテンシャル.



(a)



(b)

図 4.2 (a) InAs(111)B 基板上に金微粒子を触媒として、気相-液相-固相法で MBE 成長した [111] 方向 InAs ナノワイヤー. (b) GaN-InGaN コア-シェル型ナノワイヤー

と計算される. (4.1) は  $d$  に依存しているが, 粗い近似として幅  $\eta$  の 2DEG ポテンシャル中での変化は小さいとし, 電子がスプリットゲートにより受けるポテンシャル変調は  $V_{sg} = e\eta\mathcal{E}_z(d)$  であると考え.  $V_{sg}(x)$  をプロットすると図 4.1(b) の下の図のようになり, 波線で示したように, ポテンシャル底部では放物線ポテンシャルが良い近似になっていることがわかる<sup>\*1</sup>. すなわち, 図 4.1(b) のゲート金属を乗せた場合は,  $z$  方向に加えて電子の  $x$  方向運動エネルギーも量子化して, 量子細線が実現することになる. 状態密度の鋭い立ち上がり位置が 1 次元バンドの底で, 図 4.1(b) のポテンシャルの離散化エネルギー準位位置にあたる.

この他の物理的な形成法としては, 2 次元系を溶解液を用いたウエットエッチやイオンによる切削を用いたドライエッチによって細く切り出してしまう方法もある. また, MBE 成長した薄膜を真空中で劈開して端面に再成長することで T 字型の細線を形成する方法もある.

#### 4.1.2 自己形成ナノワイヤー

半導体基板に電子線部分照射その他様々な手法により金属などで「種」を付け, この基板上で結晶成長すると, 種の所だけ結晶成長が進んでナノワイヤーが成長する場合がある. ヘテロ接合や変調ドーピングを組み合わせるとワイヤー中に構造を作り出すこともできる. 図 4.2(a) は InAs(111)B 基板に金微粒子を触媒として, 気相-液相-固相法で MBE 成長した [111] 方向 InAs ナノワイヤーの例である. 図 4.2(b) は, GaN を InGaN が包む形で成長させたコア-シェル型のナノワイヤーである.

この他, 1 次元系と言えるかどうかは微妙であるが, グラフェンを細く巻いた形状のカーボンナノチューブ (Carbon nanotube) も, 自己形成させて広く研究されている対象の 1 つである.

## 4.2 量子輸送の基礎

1 次元系は, 量子輸送を考えるのに最適な次元であるので, ここから量子輸送現象を導入して行こう.

### 4.2.1 古典輸送と量子輸送

「古典輸送」の項では, 場合の数の勘定以外は電子を粒子として扱ったが, 一方, ヘテロ接合とこれを使った量子閉じ込めでは全くの波動として扱った. このように異なる扱いを同じ半導体中で行った理由は, 問題になる距離とエネルギーのスケールにある. これまで古典的に扱ってきた  $pn$  接合と量子論的に扱った 2 重障壁ダイオードは, かなり際どいケースである.  $pn$  接合で, 空乏層はドーピング濃度を上昇させると薄くなる.  $p$  層  $n$  層ともに高濃度にドーピングすると空乏層は全体としても大変薄くなり, フェルミ準位は  $p$  層では価電子帯に,  $n$  層では伝導帯に入り込むため, 空乏層を挟んでフェルミ準位の上下に状態密度が存在するようになる. この時, 空乏層を通して量子波動の表れであるトンネル現象が生じるのが江崎ダイオードである. 一方, 2 重障壁ダイオードは, 障壁と井戸に使用する物質

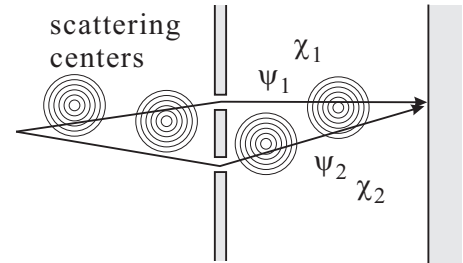
<sup>\*1</sup> 結局, 対称なポテンシャルで底部が尖っていない場合は, 底部形状のべき展開は 2 次の項が主となるため多くのポテンシャル底部では放物線近似が成立する.

により、室温では共鳴ピークが見られないことがある。どのような場合に量子的な扱いが必要になるのか、古典輸送の項の冒頭でもその点に触れたが、ここで少しまとめて議論しておこう。

どのような場合に量子コヒーレンスが輸送現象に現れるのか？実空間内でこれを表すための「長さ」が量子コヒーレンス長 (quantum coherence length) である\*2。一口に言って、固体中を電子が伝播する際、量子力学的波動としての位相記憶を保持して伝播する距離を量子コヒーレンス長と呼び $l_\phi$ と書くことが多い。

実験の上でコヒーレンスの消失を問題にする場合、電子の量子力学的干渉性そのものを失わせる本質的なものと、個別の電子は干渉を起こしているものの、多数の電子の統計を取ると干渉に統計揺らぎが入って実験結果からは干渉が消えてしまう、という場合がある。前者は一口に言って他自由度との量子絡み合い (あるいは量子もつれ, quantum entanglement) によるものである。

右図の2重スリットの実験で考えてみよう。スクリーン上に生じる干渉パターンは



$$|\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos \theta$$

で右辺第3項が量子干渉項である。今、スタート地点からスクリーンまでの間に沢山の散乱が生じ、ある量子力学的自由度 $\chi$ との間に相互作用をしたとする。その結果、

$$\psi_1 \rightarrow \psi_1 \otimes \chi_1, \quad \psi_2 \rightarrow \psi_2 \otimes \chi_2$$

となったとすると、干渉項は

$$2|\psi_1||\psi_2| \cos \theta \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle$$

である。この時もし $\chi_1 \perp \chi_2$ であれば、内積の項は消え、従って干渉項が消滅する。この時、自由度 $\psi$ と $\chi$ は最大エンタングルド状態 (maximally entangled state) にある (付録F)。

言い換えると、この場合の量子コヒーレンス長は、電子自由度が他自由度 (環境 (environment) という言い方をすることもある) との間に最大エンタングルド状態を作るまでに伝播する距離である。ここで、ちょっと疑問を持たれる可能性があるのが、 $\chi_1$ と $\chi_2$ が直交したのがたまたま、更に時間発展すると直交が外れて干渉項が復活してしまうのではないか、という点である。もちろん、量子系の設定次第ではそのような場合があり得る\*3。今は、特に制御されていない量子系のため、時間発展とともにエンタングルメントは他の自由度におよび、「もつれ」が元に戻ることはない、と考える。

このような一粒子の干渉性そのものが失われる場合に対し、一粒子の干渉性は残っているものの、粒子と粒子で波長が若干異なる、すなわち電子波の単色性 (monochromaticity) に対して伝播距離が伸びるにつれて位相差がずれて結局多数の電子を相手とする実験結果からは干渉性が失われてしまうという場合がある。その長さを見積もってみよう。電子はフェルミ粒子であり、絶対零度では、伝播可能な電子のエネルギーは $E_F$ で完全に単色のはずである。伝導する電子のエネルギーの幅はすなわち $\Delta E = k_B T$ である。時間 $\tau$ だけ伝播して生じる位相のずれは、 $2\pi \Delta f \tau = 2\pi \Delta E \tau / h = 2\pi k_B T \tau / h$ である。これが $2\pi$ になる時間が臨界伝播時間として $\tau_c$ とすると、

$$\tau_c = \frac{h}{k_B T}$$

である。拡散的伝播では拡散長 $l = \sqrt{D\tau}$ より、これによって決まる一種のコヒーレンス長 $l_{th}$ は

$$l_{th} = \sqrt{\frac{hD}{k_B T}} \tag{4.2}$$

\*2 「コヒーレンス長」という言葉は、様々な局面で違った意味に使用される。凝縮系物理の例では超伝導現象を扱う場合に、それも複数のコヒーレンス長が現れる。

\*3 実際、このような「コヒーレンスの復活」実験をすることができる。これを持って環境を考えるデコヒーレンス論が誤りだ、とする人もいるが、無論、誤解である。環境論では元来「本質的なデコヒーレンス」は(熱力学極限以外では)存在しない。現実の系において熱力学極限でなくても統計力学の結論が十分適用できると同様、多自由度とのエンタングルメントが進めば、文字通りその「もつれ」が元に戻るにほどこけて戻るとは事実上なく、干渉性は失われたと考えてよい。

である。これは**熱的拡散長** (thermal diffusion length) と呼ばれる。散乱がほとんどない、弾道的な伝導の場合は、ほとんどフェルミ速度  $v_F$  で試料を抜けていくと考えてよいので、

$$l_{th} = \frac{hv_F}{k_B T} \quad (4.3)$$

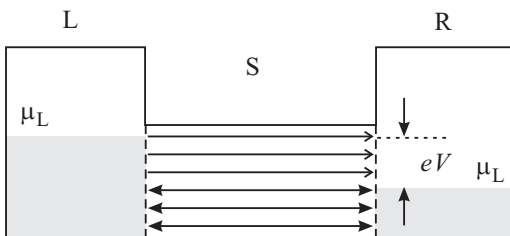
となる。以上の**熱長** (thermal length) は、デコヒーレンスと直接の関わりがないにも関わらず、実験上、見かけのコヒーレンス制限長になるので注意が必要である。

$l_\phi$  はわかったとして、では  $l_\phi$  が何とどのような関係にある場合に量子コヒーレンスが問題になるのか？まず、当然ながら、試料サイズが  $l_\phi$  よりも短くなった場合である。更に電子のドブロイ波長 (今の場合フェルミ波長) と試料サイズが同程度になった場合、量子閉じ込め効果が生じるが、そこまで行かなくても  $l_\phi$  より小さくなることで量子コヒーレンスは何らかの形で伝導に関与する。また、電気伝導には試料サイズ以外にも特徴的な長さ (characteristic length) が生じることがしばしばある。代表例が、外部磁場がかかった時の**磁気長** (magnetic length) である。磁束密度を  $B$  として、 $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$  と書かれ、最小サイクロトロン半径とも呼ばれる。 $l_B$  が  $l_\phi$  より短くなると特に電気伝導の磁場応答に量子コヒーレンスの影響が様々に現れる。

以下、コヒーレント輸送現象を中心に講義を進める。本講義では、量子系の輸送現象を「量子回路」の伝導現象として見る見方を紹介していこう。本節ではその最も基礎的な部分について見て行こう。

## 4.2.2 Landauer の公式

20 世紀初頭から半ばにかけて、ベル研などを中心に展開された線形応答理論の到達点が量子輸送の**久保公式** (Kubo formula) であり、物性物理学の必須の道具である。一方、現実の量子輸送を解析する際には、久保公式の一形式として導くこともできる [1]**Landauer の公式** が良く使用される。久保公式の導入は統計物理学などの他の講義に譲り、Landauer の公式の最も簡単な導出から量子輸送に入っていこう。



### 量子化伝導度

「伝導」が概念的に生じるための最低の次元が 1 次元である。まずは、フェルミ粒子系を 1 次元にした時にその電気伝導度がどうなるか考える。左図のようなモデルで考える。散乱のない 1 次元伝導体が 2 つの粒子溜め (particle reservoir) につながれている。粒子溜めは粒子の出し入れに対して全体の粒子数が非常に大きく、熱平衡にあつて化学ポテンシャルが良く定義できる。図で、左右の化学ポテンシャルをそれぞれ  $\mu_L$ ,  $\mu_R$  とする。伝導体の中

中で波数  $k$  で指定される状態が運ぶ電流を  $j(k)$  とすると、波動関数の規格化の長さを  $L$  として、電荷密度は  $e/L$  であるから、

$$j(k) = \frac{e}{L} v_g = \frac{e}{\hbar L} \frac{dE(k)}{dk} \quad (4.4)$$

である。全電流  $J$  は

$$J = \int_{k_L}^{k_R} j(k) \frac{L}{2\pi} dk = \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE = \frac{e}{h} (\mu_L - \mu_R) = \frac{e^2}{h} V \quad (4.5)$$

であるから、

$$G = \frac{J}{V} = \frac{e^2}{h} \equiv G_q \equiv R_q^{-1}. \quad (4.6)$$

これは、散乱のない 1 次元フェルミ粒子系の伝導度の伝導度であり、**量子化伝導度** (quantum conductance) あるいは、伝導度量子と呼ばれる。以上はスピン自由度を考慮しない場合であり、スピン自由度を単に量子自由度の縮重と考えて良い場合はこれを 2 倍して  $2e^2/h$  を量子化伝導度と呼ぶ場合も多い。 $R_q$  は量子化抵抗である。

以上は、不確定性原理を言い換えたものである。少しわかりやすい形に直すと、1 次元フェルミ系に  $\Delta k$  の幅の波数を使って  $\Delta x$  の幅の波束を作ったとすると、1 次元フェルミ系に詰め込める波束に乗せられる電荷の密度は  $e/\Delta x$

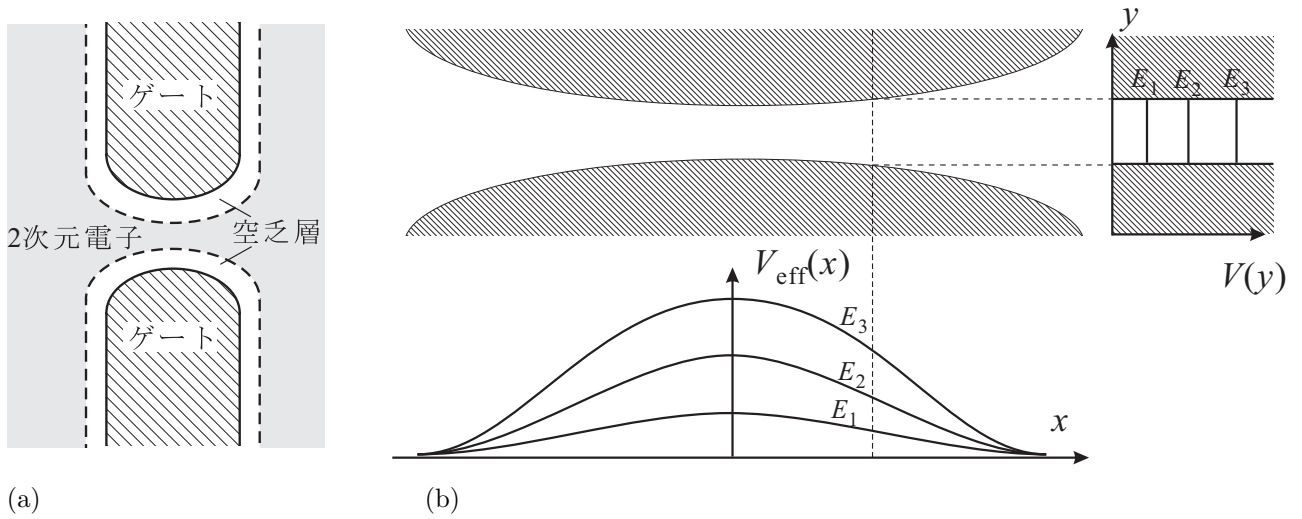


図 4.3 (a) 量子ポイントコンタクト (Quantum Point Contact, QPC, 後述) の模式図. (b) QPC の簡単なモデル. 上: 実空間で斜線部分からは電子が排除され, 空白部分に 1 次元的に閉じ込められているとする. 右の図は, 点線で示した断面での閉じ込めポテンシャル. 離散化固有エネルギー  $E_{1,2,3}$  は, 下図の 3 つの有効ポテンシャルに対応. 下: 式 (4.9) の有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}(x)$  を模式的に書いたもの.

で, その波束の速度は  $\Delta E/\hbar\Delta k$  であるから,

$$J = \frac{e}{\Delta x} \frac{\Delta E}{\hbar\Delta k} = \frac{e^2}{h} V \quad (4.7)$$

と, 同じ結果が得られる. ただし,  $\Delta x\Delta k = 2\pi$ ,  $\Delta E = eV$  とした.

### 量子ポイントコンタクトと伝導チャネル

上に述べたような「1 次元的なフェルミ系」は量子細線 (quantum wire, QW) あるいは量子ポイントコンタクト (quantum point contact, QPC) で実現される. これらを実際に作る方法の 1 つが, 2 次元電子系 (two-dimensional electron gas, 2DEG) を更に細長い領域に閉じ込めるやり方である.

QPC の場合, 「細長い」領域とは, 図 4.3(a) のように, 広い領域から何らかの方法で 2DEG の伝導領域を制限し, 次第に細長い領域に閉じ込めたものを指す. これが, 4.1.1 節のスプリットゲートにより実現されることは, すぐにお気づきの事と思う.

これを図 4.3(b) のようにモデル化し, 長手方向を  $x$  軸に取って 2 次元領域から入射する電子は全エネルギー  $E = E_{kx} + E_{ky}$  を変化させずにこの領域を通過する, ただし,  $x, y$  各方向の運動エネルギー  $E_{kx}, E_{ky}$  は閉じ込めの壁からの反射によってエネルギーロスなく相互に移り変わるとする (断熱近似).

本来は, 図 4.1(b) のような調和ポテンシャルが良い近似であるが, 簡単のため閉じ込めは矩形的でポテンシャルの高さは無限大とすると,  $y$  方向の波動関数は, 閉じ込め幅を  $W$  として,  $\varphi_n(y) = \cos(n\pi y/2W)$  ( $n$  は奇数),  $\sin(n\pi y/2W)$  ( $n$  は偶数) である. 幅の変化は十分緩やかで  $x$  と  $y$  で変数分離でき  $\psi(x, y) = \varphi_n(y)\phi(x)$  と書けるとする.

$$\begin{aligned} H\psi(x, y) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi_n(y)\phi(x) \\ &= \varphi_n(y) \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( \frac{n\pi}{2W} \right)^2 \right) \phi(x) = E\varphi_n(y)\phi(x) \end{aligned} \quad (4.8)$$

となる. (4.8) は局所的な近似であり, 各  $x$  についてこれが成立するとすると,  $x$  方向に関しては,

$$V_{\text{eff}}(n, x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{2W(x)} \right)^2 \quad (4.9)$$

だけの有効ポテンシャルを持つ1次元問題となる．この様子を描いたものが，図 4.3(b) の下の図である． $y$  方向の準位量子化  $n$  によって  $V_{\text{eff}}(n, x)$  は離散的に変化する．結局中央部分では各電子のエネルギー分配状態は

$$E_{\text{tot}} = E_{k_x}(n, x) + V_{\text{eff}}(n, x) \quad (4.10)$$

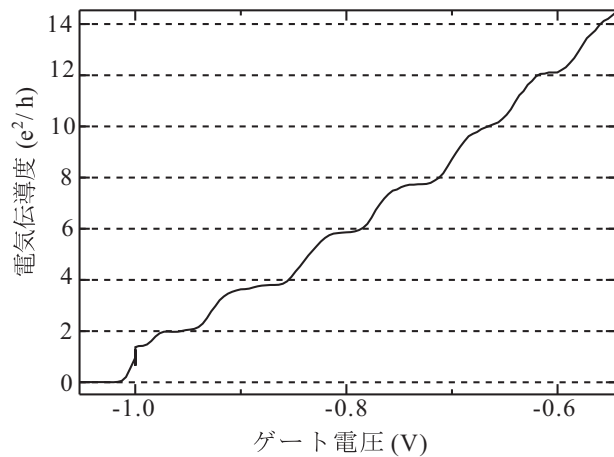
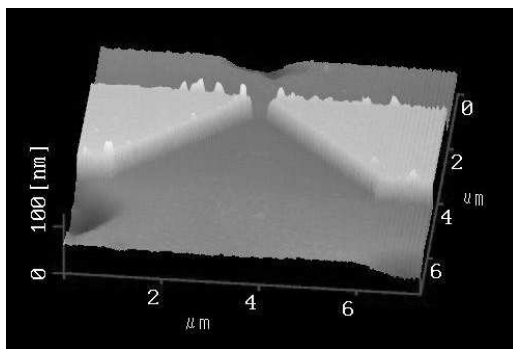
であり， $n$  で指数付けされている1次元状態と考えることができる．このような1次元伝導状態を**伝導チャネル** (conductance channel) と呼ぶ．各伝導チャネルの状態密度は，式 (8.1) の  $d_f = 1$  で表されることになる．上記  $E_{k_x}(n, x)$  はチャネル毎に異なるから，全体の  $E_F$  は固定されており， $k_{xF}$  はチャネル毎に定義され，状態密度もチャネル別に決まる．

### 量子ポイントコンタクトの電気伝導実験

実際に QPC を作って伝導を調べた実験を見てみよう．ゲートに加える負電圧の大きさを増加させると，(4.9) の有効ポテンシャルは  $W(x)$  の現象に伴い高くなり，細線部分をポテンシャルに妨げられずに通過できるチャネルの数が減少する．

図 4.4(a) は実際に微細加工で作ったスプリットゲートを原子間力顕微鏡 (AFM) で観察した像．図 4.4(b) は，ゲート電圧  $V_g$  に対して QPC の電気伝導度  $G$  (流れる電流を，両側の電極の電位差 (化学ポテンシャル差を  $e$  で割ったもの) で割ったもの) をプロットしたものである． $G$  が  $V_g$  に対して階段的に変化しており，階段の高さはほぼ一定で  $2e^2/h$  であることがわかる．すなわち， $G$  は  $2e^2/h$  の整数倍に量子化されている．時間反転対称性が保たれ，スピン縮退が解けていないことを考えると，この実験で式 (4.6) の結果が確認されたことになる．

図 4.5 の実験では，QPC の伝導度が  $n \times 2e^2/h$  ( $n$  は整数) のステップの上 (プラトー) にある時に，原子間力顕微鏡 (AFM) の針を QPC の近くに下ろす．すると，QPC の伝導度の方にわずかなシフトが生じる．探針を動かしながら，このシフトをプロットすると，図 4.5(b) のように， $n = 2$  のプラトーでは2つの腹をもった波が流れ出ている様子が， $n = 3$  では3つ， $n = 1$  では1つになる様子がわかる．これから，細線中での  $y$  方向の定在波の腹の数，すなわち細線を透過するチャネル数と伝導度の量子化数  $n$  とが等しいことが実験的に示された<sup>\*4</sup>．



(a)

(b)

図 4.4 (a)QPC 構造の原子間力顕微鏡像．白く浮き上がって見えているのがゲート電極．下地は Al-GaAs/GaAs 2次元電子系．(b) ゲート電圧に対して QPC の伝導度をプロットしたもの．測定温度は 30 mK.

<sup>\*4</sup> 例えば，チャネル数が 3 であれば，腹が 1, 2, 3 の波が重なって出るはずではないか，と思われた方もいるとおもう．確かにそうなのだが，1次元系の状態密度は，バンドエッジを  $\epsilon_0$  として  $1/\sqrt{\epsilon - \epsilon_0}$  と変化するので，実際には最も上にあるチャネルの波動関数振幅が測定にかかる．また，進行方向の運動エネルギーを考えると最上チャネルを通ってくる波が最も小さいので，プローブのポテンシャルに散乱されやすく，測定にかかりやすいこともある

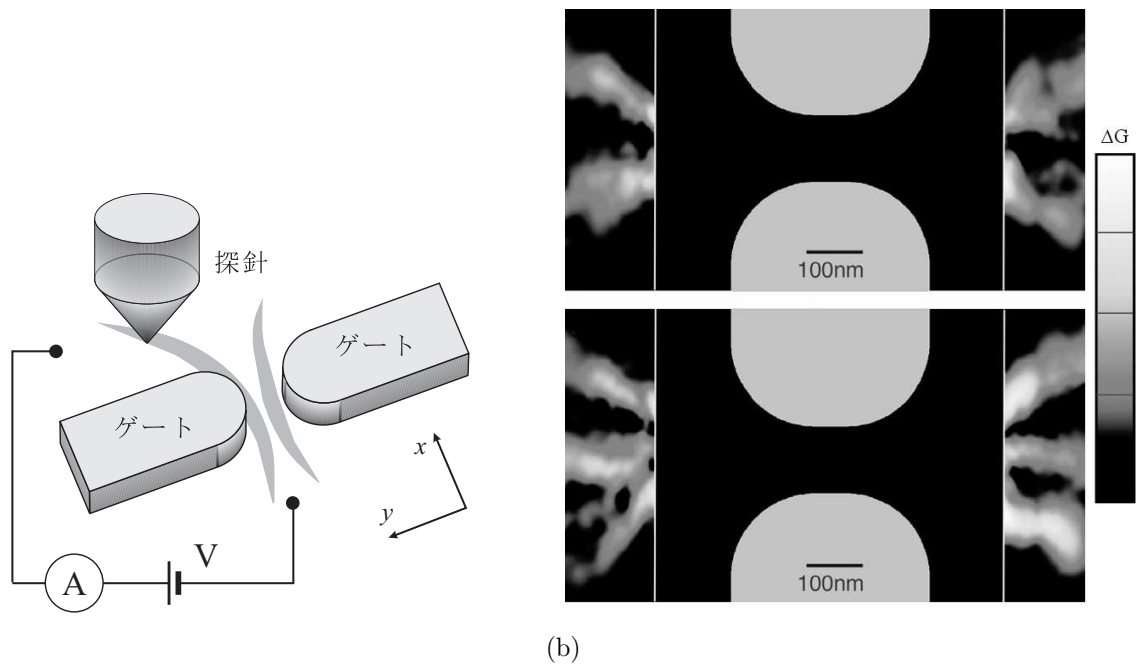


図 4.5 (a)QPC から流れ出る波動関数密度を走査プローブ顕微鏡 (SPM) を使用して測定するための実験のセットアップ. QPC の伝導度を測定しながら, SPM の探針を走査する. (b) このセットアップを使って得られた伝導度の量子化値からの「ずれ」の像. 中央部分は原子間力顕微鏡像から得られた QPC 構造を描いたもの (形状は正確だが像そのものではない). 上は  $n_{\text{ch}} = 2$  の伝導度ステップでの測定, 下は 3 のステップでの測定. (データは Topinka *et al.*, Science **289**, 2323 (2000) より)

### 伝導チャンネルと透過率

以上, QPC を題材にして伝導チャンネル概念を導入した. QPC のように短い構造としたのは実験的に得やすいということが大きく, 長い構造であっても散乱がなければ同じであり, 実際高移動度の 2 次元系を使って細線構造を作ると伝導度量子化が確認される. 次にこの量子細線を太くしていくことを考える. 幅の増大に伴い, 幅方向の量子化エネルギー準位間隔は狭まり, バンドの底からのフェルミ準位  $E_F$  の位置を固定すると,  $E_F$  以下の伝導チャンネル数が増大する. 幅を無限に広げて 2 次元系にすることを考えると, 2 次元系の電子濃度を  $n_{2D}$  として, 単位長さあたりのチャンネル数は,  $\sqrt{n_{2D}}$  となる.

以上では, 散乱の全くない系を考えていた. 今考えているのはコヒーレントな量子輸送であり, フォノンその他によるランダムな非弾性散乱は取り合えず考察の対象外であるが, 不純物や格子欠陥などによるポテンシャル散乱は量子コヒーレンスを破らないため, これを取り入れることは可能である. 散乱は伝播する状態間の遷移であり, 従って今考えている言葉でいえば, 伝導チャンネル間の遷移である. そこで, 散乱中心を図 4.6(b) のように点で表し, この点を介してチャンネル間を電子が移り変わるとする. 量子力学的な散乱であるからあみだくじのようにまるまる乗り移るわけではなく, 波動が点で分離して流れていくことになる. 伝導チャンネルはちょうどマイクロ波の導波管のような役割を果たしており, 導波管は様々な形状の継ぎ手を使ってマイクロ波を分離したり合流したりできるが, 散乱中心がこの継ぎ手の役割を果たしている. 継ぎ手では波を逆行させる反射も生じるが, 当然散乱中心でも生じる. 散乱中心が増えて乱れた伝導体と呼ばれる状態になると, チャンネル描像では図 4.6(c) のように蜘蛛の巣状態となる. 一見收拾がつかないように見えるが, 伝導体の出口と入り口のみに着目し, 入り口の  $i$  番目のチャンネルから 1 個の電子が出口の  $j$  番目のチャンネルに出ていく確率を  $T_{ij}$  と書いてみる. 散乱が全くない 1 チャンネルの電気伝導度が  $e^2/h$  で透過率  $T = 1$  であったことから, 透過確率行列  $\{T_{ij}\}$  を持つ伝導体の伝導度  $G$  は, スピン自由度 2 も加えると,

$$G = 2 \frac{e^2}{h} \sum_{i,j} T_{ij} \quad (4.11)$$

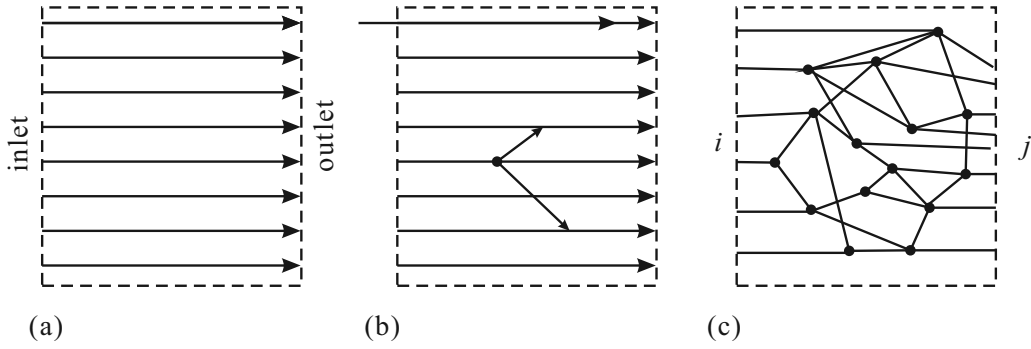


図 4.6 (a) 2次元の伝導体を1次元チャンネルの集合として表す. 2端子構成. (b) 散乱中心の導入. 伝導チャンネル間の遷移を引き起こす. (c) 多数の散乱中心を持つ「乱れた伝導体」.

となる. (4.11) をランダウアーの2端子公式 (Landauer formula for 2-terminal conductance) と呼ぶ.

### 4.2.3 S 行列

伝導チャンネルをマイクロ波導波管と比較して散乱中心(継手)を導入したが, **電子導波管 (electron waveguide)** という呼び方もしばしばされる. コヒーレントな伝導体においては, 散乱中心ではなく実際に導波管の継手のように伝導チャンネルを分岐統合して干渉回路を構成するような枝分かれもしばしば使用される. その取扱いに良く使用されるのが, マイクロ波回路でも使用される **散乱行列 (S 行列)** (scattering matrix, S-matrix) である. これは, 図 4.7(b) のように散乱体に左右から入射してくる波動関数を  $a_1(k)$ ,  $a_2(k)$ , 流出する波動関数を  $b_1(k)$ ,  $b_2(k)$  とし,

$$\begin{pmatrix} b_1(k) \\ b_2(k) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L & t_R \\ t_L & r_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

とするものである.  $A_i(k)$  などとは一部波動関数の進行方向が異なるため小文字表記とした. ここで,  $t_{L,R}$ ,  $r_{L,R}$  はそれぞれ左, 右からの複素透過率・反射率である. 散乱の際には**位相シフト (phase shift)**が生じるので, これらは一般に複素数である. 透過率・反射率  $T_{L,R}$ ,  $R_{L,R}$  との関係は

$$T_{L,R} = |t_{L,R}|^2 = 1 - R_{L,R} = 1 - |r_{L,R}|^2 \quad (4.13)$$

である.

S 行列は T 行列と異なり, 作用するベクトルにチャンネルが混じっていることから, 一般には T 行列のように出力を次の入力とすることができない. 一方, 式 (4.12) のように, 各行列要素の物理的な意味が明確であり, 散乱に関する物理量を直ちに取り出せる点が特長である.

以上は, 同じ波数を持つ2つの1次元チャンネルの接続について考えた. 一般の場合に拡張しようとする, チャンネル毎に波数や分散が異なり, 困難が生じる. 最も簡単な QPC のような場合でも,  $G = n \times 2e^2/h$  のプラトー状態の場合,  $n$  個の伝導チャンネルが存在し, フェルミ波数は各チャンネルで異なっている. このような場合, 式 (4.12) の入出力のベクトルで  $a_1(k)$  などに, 単純に波動関数を使用すると, S 行列の物理的意味も曖昧となりユニタリー性 (後述)

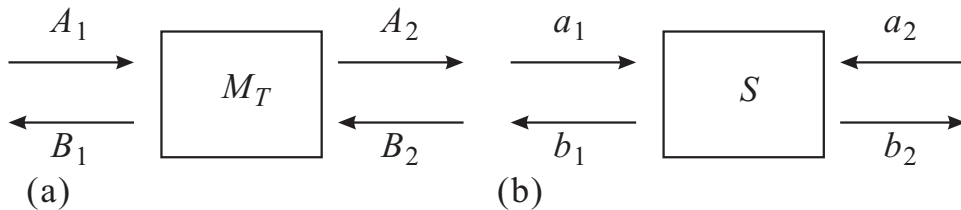


図 4.7 (a) T-行列  $M_T$  の概念図. (b) S-行列  $S$  の概念図



も失われる．そこで，波動関数を  $\psi_{ai}(k_F)$  などと書いて

$$a_i(k) = \sqrt{v_{Fi}} \psi_{ai}(k_F) \quad (4.14)$$

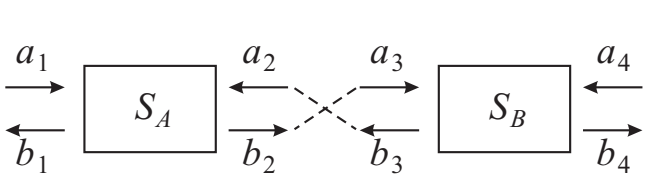
などとする ( $b_i$  についても同様) ことで，入出力ベクトルのノルムをとった際に「確率密度流」の大きさになるようにすることができる．複素透過率  $t$  に対して， $|t|^2 = T$  が透過率になることにならない，(4.14) を複素確率密度流と呼ぶことにしよう．

### S 行列の接続 (合成)

T 行列を直列に接続するのは 2 重障壁のところで行ったように単純に積を取れば良く，計算を簡単化するのに役立つ．一方，S 行列の場合，直列接続の場合下の図のように，全体で 8 本の入出力をクロス接続して，2 つで 1 つの S 行列とする．計算上は，まず

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = S_A \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} & t_R^{(A)} \\ t_L^{(A)} & r_R^{(A)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = S_B \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L^{(B)} & t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} & r_R^{(B)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

と置く．



境界条件

$$b_2 = a_3, \quad a_2 = b_3 \quad (4.16)$$

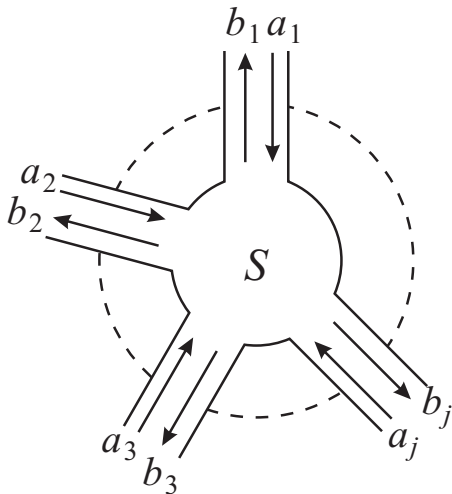
を使用して，最終的な式からこれらの変数を消去し，1 つの S 行列の形に書きなおす．その結果得られるのが，次の合成 S 行列  $S_{AB}$  である．

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} r_L^{(A)} + t_R^{(A)} r_L^{(B)} (I - r_R^{(A)} r_L^{(B)})^{-1} t_L^{(A)} & t_R^{(A)} (I - r_L^{(B)} r_R^{(A)})^{-1} t_R^{(B)} \\ t_L^{(B)} (I - r_R^{(A)} r_L^{(B)})^{-1} t_L^{(A)} & r_R^{(B)} + t_L^{(B)} (I - r_R^{(A)} r_L^{(B)})^{-1} r_R^{(A)} t_R^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

大変面倒な形をしていて，どうしてもわざわざこのようなもの考えるのか不思議かもしれない．しかし，これは 2 つの散乱体があった時，その間を伝播する波が時空間でどのような経路を取るかを示している．(4.17) の (1,1) 成分を考え，第 2 項に現れた除算を

$$(I - r_R^{(A)} r_L^{(B)})^{-1} = I + r_R^{(A)} r_L^{(B)} + (r_R^{(A)} r_L^{(B)})^2 + (r_R^{(A)} r_L^{(B)})^3 + \dots \quad (4.18)$$

と展開すると，結局この第 2 項が散乱体 A, B 間での何回かの反射の後に反射される過程を足し上げたものであることがわかる．S 行列は各要素の意味が式 (4.12) のように簡単明瞭であり，各散乱の単一摂動過程を表しているため，物理的な解釈がしやすく，またチャンネル数および電極数が増えた場合にも適用が容易である．



以上の T 行列，S 行列接続においては伝送路上での位相回りは考えなかった．これは，位相回りを表す T, S 行列を挿入することで対応できる．伝送路自身が共鳴器として働くような場合もこれによって対応できる．

式 (10.18) のように入出力を複素確率密度流に定義しなおしたので，多チャンネル化は容易であり，入出力ベクトルの次元を増やせば良い．(4.18) を書き下ろす際に積の順番に注意し，また除算は逆数を乗ずる形とし，1 を  $I$  としているが，これは， $a_1$  などをベクトル， $r(A)_r$  などを行列で表示することで容易に多チャンネルに拡張するためである．

伝送路上ではチャンネル間に相互作用 (散乱) を考えていない．従って，多チャンネルの場合，チャンネルをどう伝送路に配置するかは S 行列の場合問題にならない．従って，左図のように伝送路に差別なく結線 (wire

connection) を行うことができる。この意味で、 $S$  行列は結節点と取ることもできる。T 行列も当然同じではあるのだが、(入力)→(出力) の関係があるので、 $S$  行列のように伝送路が等価でないので扱いに注意が必要となり、また当然接続において単純に積を取れば良いという特性は使えなくなる。

#### 4.2.4 オンサガー相反性

$S$  行列の大切な性質として、**ユニタリー性** (unitarity) がある。複素確率密度流 (10.18) の定義から、確率密度の保存により  $|\mathbf{a}|^2 = |S\mathbf{a}|^2$  でなければならず、ユニタリー性の要請は自明である。これより導かれる電気伝導において重要な対称性の1つが**オンサガー相反性** (Onsagar reciprocity) である。輸送現象一般に成立する対称性であるが、 $S$  行列形式では磁場  $\mathbf{B}$  に対して

$$S(\mathbf{B}) = {}^t S(-\mathbf{B}) \quad (S_{mn}(\mathbf{B}) = S_{nm}(-\mathbf{B})) \quad (4.19)$$

と表すことができる。

これは、次のように導かれる。今、考えているのが、1体の Schrödinger 方程式の散乱問題だったことを思い出そう。Schrödinger 方程式

$$\left[ \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi = E\psi \quad (4.20)$$

の複素共役をとり、 $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$  とすると、

$$\left[ \frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi^* = E\psi^* \quad \therefore \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (4.21)$$

すなわち、 $\psi(B)$  と  $\psi^*(-B)$  は同じ解集合を形成している ( $\{\dots\}$  は  $\dots$  の集合を表す)。ここで、考えている  $\psi(B)$  は Schrödinger 方程式 (4.20) の散乱解だったことを思い出そう。散乱解を  $\text{Sc}\{\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{b}\}$  ( $\mathbf{a}$  は  $S$  行列の入射波、 $\mathbf{b}$  は散乱波) と表すと、

$$\text{Sc}\{\mathbf{a}(B) \rightarrow \mathbf{b}(B)\} \in \{\psi(B)\}, \quad (4.22)$$

$$i.e., \quad \mathbf{b}(B) = S(B)\mathbf{a}(B) \quad (4.23)$$

(4.23) の両辺の複素共役をとって

$$\mathbf{b}^*(B) = S^*(B)\mathbf{a}^*(B). \quad (4.24)$$

一方、進行波  $\exp(\pm i\mathbf{k}\mathbf{r})$  に対して複素共役をとることは、波の進行方向を逆転することになる<sup>\*5</sup>。つまり、複素共役を取ることで入射波と散乱波が入れ替わり

$$\text{Sc}\{\mathbf{b}^*(B) \rightarrow \mathbf{a}^*(B)\} \in \{\psi^*(B)\} \quad (4.25)$$

$$\therefore B \rightarrow -B \text{ とすると } \text{Sc}\{\mathbf{b}^*(-B) \rightarrow \mathbf{a}^*(-B)\} \in \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (4.26)$$

$$i.e., \quad \mathbf{a}^*(-B) = S(B)\mathbf{b}^*(-B) \quad (4.27)$$

(4.27) より

$$\mathbf{b}^*(B) = S^{-1}(-B)\mathbf{a}^*(B) \quad (4.28)$$

であるから、(4.24) と比較して

$$\begin{aligned} S^*(B) &= S^{-1}(-B) = S^\dagger(-B) \quad (\because \text{unitarity } SS^\dagger = S^\dagger S = I) \\ \therefore S(B) &= {}^t S(-B) \end{aligned} \quad (4.29)$$

以上より相反性が証明された。

<sup>\*5</sup> (4.20) は、「時間によらない」 Schrödinger 方程式なので、ここで複素共役と呼ぶのは  $i\omega t$  の符号はそのままにして  $i\mathbf{k}\mathbf{r}$  の符号のみ反転することを意味する。

特に、ここまで考えてきたような **2 端子伝導** の場合、すなわち入口と出口、およびそれに接続された電極が 1 つずつあって電極間の電圧降下と電流との比で電気抵抗を考える場合、電気抵抗 ( $\rho_{xx}$ ) の磁場応答 (磁気抵抗) について対称性

$$\rho_{xx}(\mathbf{B}) = \rho_{xx}(-\mathbf{B}) \quad (4.30)$$

が導かれる。これは、輸送係数の線形性を仮定しているの、非線形素子では有限バイアス下で破れる。特性が正負バイアスで対称であれば、バイアス反転も含めれば回復する。

#### 4.2.5 Landauer-Büttiker の公式

これまで、2 端子の伝導体のコヒーレントな伝導について扱ってきた。コヒーレントな伝導の実験は、S 行列の扱いなどを見てもわかるように、一種の散乱実験とも見ることができる。散乱波を検出する検出器に相当するのが端子であり、端子の数は一般の伝導実験では 2 端子以上、多数考えることができる。端子数に特に制限を設けず、すべてを同等に扱う散乱理論形式が **Landauer-Büttiker** の公式である。

端子を  $p, q$  など指数付けしよう (図 4.8)。端子  $p$  は化学ポテンシャル  $\mu_p = -eV_p$  を持つ粒子溜めに接続されているとする。端子  $p$  から試料に流れ込む電流  $J_p$  は、 $p$  から試料へと向かうチャネルの電流から、 $p$  以外の各端子から試料を通して  $p$  へ流れ込む電流を差し引いたものであるから、

$$J_p = -\frac{2e}{h} \sum_q [T_{q \leftarrow p} \mu_p - T_{p \leftarrow q} \mu_q] \quad (4.31)$$

と書くことができる。  $T_{p \leftarrow q}$  等を、

$$\mathcal{T}_{pq} \equiv T_{p \leftarrow q} \quad (p \neq q), \quad \mathcal{T}_{pp} \equiv -\sum_{q \neq p} T_{q \leftarrow p}$$

と、行列  $\mathcal{T}$  の形で表すと、 $\mathbf{J} = {}^t(J_1, J_2, \dots)$ 、 $\boldsymbol{\mu} = {}^t(\mu_1, \mu_2, \dots)$  (いずれも列ベクトル) として、

$$\mathbf{J} = \frac{2e}{h} \mathcal{T} \boldsymbol{\mu}$$

と表すことができる。また、

$$V_q = \frac{\mu_q}{-e}, \quad G_{pq} \equiv \frac{2e^2}{h} T_{p \leftarrow q} \quad \text{とおくと}$$

$$J_p = \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q] \quad (4.32)$$

である。基本はこれだけであるが、以下のように様々な制限条件がつく。

まず、電流の保存から

$$\sum_q J_q = 0 \quad (4.33)$$

である。次に、全端子の電位が同じなら電流は零のはずであるから、

$$\sum_q [G_{qp} - G_{pq}] = 0 \quad (4.34)$$

となる。

更に、外部磁場  $B$  に対して **Onsager の相反定理**

$$G_{qp}(B) = G_{pq}(-B) \quad (4.35)$$

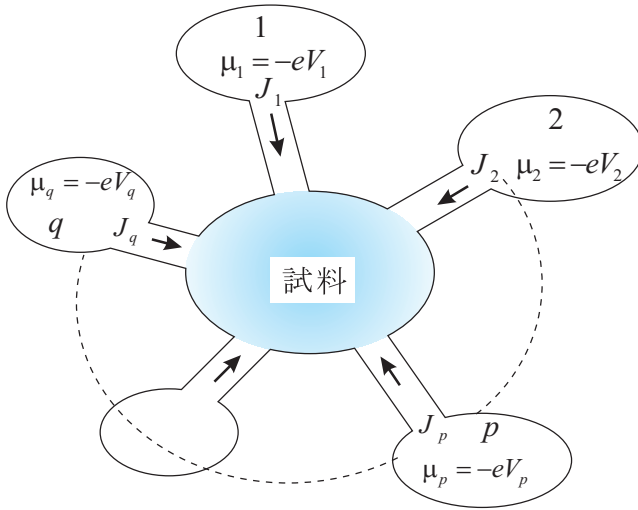


図 4.8 LB 公式を導くモデル。

が成立する．これはもちろん，S-matrix の時に成立した Onsager の相反定理からの帰結である．以上がランダウアー・ビュティカーの伝導公式である．

4つの端子を持つ試料を考える．4つの化学ポテンシャル（電位）の内，端子4の電位を参照電位として  $V_4 = 0$  とおく．すると，

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

と書くことができる．

さて，カシミール (Casimir) 問題と呼ばれる，

$$J_1 = -J_3, \quad J_2 = -J_4 \quad (4.37)$$

という境界条件を考えよう．これは， $J_2 = 0$  とおけば，1-3 に電流を流して 2-4 で（電流を流さずに）電圧を測定する通常の4端子測定問題になるので，これを含んでいる．この問題の解は， $V_{ij} \equiv V_i - V_j$  とおいて

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{13} \\ V_{24} \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

という形に書くことができる．ただし，

$$\alpha_{11} = 2G_q[-\mathcal{T}_{11} - S^{-1}(\mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{12})(\mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{21})] \quad (4.39a)$$

$$\alpha_{12} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{12}\mathcal{T}_{34} - \mathcal{T}_{14}\mathcal{T}_{32}) \quad (4.39b)$$

$$\alpha_{21} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{21}\mathcal{T}_{43} - \mathcal{T}_{23}\mathcal{T}_{41}) \quad (4.39c)$$

$$\alpha_{22} = 2G_q[-\mathcal{T}_{22} - S^{-1}(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{23})(\mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{12})] \quad (4.39d)$$

$$S = \mathcal{T}_{12} + \mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{34} = \mathcal{T}_{21} + \mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{23} + \mathcal{T}_{43} \quad (4.40)$$

である．(4.38) は電圧で電流を表す形になっているが，もちろんこれは式の上でそう書けているだけで，物理的な操作としては何らかの電気回路等のフィードバックを使用して，(4.37) の条件が満たされるように， $V_1, V_2, V_3$  を調整することになる．

上の結果は，実際に量子コヒーレントな試料に対して4端子を接続して測定したとき，どのような磁気抵抗が現れるか分析する上でも重要な手がかりを与えている．すなわち，一般に4端子測定においては磁場の反転 ( $B \rightarrow -B$ ) を行っても測定される電気抵抗の値は同じになるとは限らない．しかし，電流電圧端子を入れ替えた上で逆向きの磁場の下で抵抗を測定すると，それは同じ値になっているべきである．Landauer-Büttiker 公式を使って，4端子伝導度ではどのようなことが生じるか考える．

(4.35) が (4.38) に与える条件は，

$$\alpha_{11}(B) = \alpha_{11}(-B), \quad \alpha_{22}(B) = \alpha_{22}(-B), \quad \alpha_{12}(B) = \alpha_{21}(-B) \quad (4.41)$$

である．

通常の4端子問題に適用して，13:電流端子，24:電圧端子，とした時のLB流「電気抵抗」を  $\mathcal{R}_{13,24}$  などと書くことにすると，

$$\mathcal{R}_{13,24} = \frac{V_2 - V_4}{J_1} = \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (4.42)$$

となり，行列要素は Onsager の相反定理を満たしているが， $\mathcal{R}$  は (4.30) のような磁場反転に対する対称性を満たさない．一方

$$\mathcal{R}_{24,13} = \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (4.43)$$

と，(4.41) より，電流電圧端子を入れ替えた磁気抵抗は，磁場反転に対して対称である．

一般に

$$\mathcal{R}_{mn,kl} = R_q \frac{\mathcal{T}_{km}\mathcal{T}_{ln} - \mathcal{T}_{kn}\mathcal{T}_{lm}}{D}, \quad D \equiv R_q^2(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})S \quad (4.44)$$

なので、相反関係

$$\mathcal{R}_{mn,kl}(B) = -\mathcal{R}_{kl,mn}(-B) \quad (4.45)$$

が成立する。負号がついたのはもちろん単なる端子の順番の問題である。

これより、実際に量子コヒーレントな試料に対して4端子を接続して測定したとき、どのような磁気抵抗が現れるか分析する上でも重要な手がかりを与えている。すなわち、一般に4端子測定においては磁場の反転 ( $B \rightarrow -B$ ) を行っても測定される電気抵抗の値は同じになるとは限らない。しかし、電流電圧端子を入れ替えた上で逆向きの磁場の下で抵抗を測定すると、それは同じ値になっているべきである。

## 参考文献

- [1] 早川尚男 「非平衡統計力学」 (サイエンス社, 2007).
- [2] S. Datta, “Electron Transport in Mesoscopic Systems” (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [3] 勝本信吾 「メゾスコピック系」 (朝倉書店, 2002)

## 付録 F : シュミット分解とエンタングルメント・エントロピー

まず、量子エンタングルメントについて簡単におさらいしておく。2つの系の量子状態がそれぞれ2次元のヒルベルト空間で表されているとし、 $|\psi\rangle = (|A\rangle + |B\rangle)/\sqrt{2}$ 、 $|\phi\rangle = (|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}$  と書く。この時、 $|\psi\rangle$  と  $|\phi\rangle$  との間に関係がなければ、複合系の状態  $|\Phi\rangle$  は

$$|\Phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = (|A\rangle|1\rangle + |A\rangle|2\rangle + |B\rangle|1\rangle + |B\rangle|2\rangle)/2$$

と直積の形で書かれる。今、仮に状態が

$$|\Phi\rangle = |A\rangle|2\rangle + |B\rangle|1\rangle \quad (F.1)$$

と、一部の項が欠けた形で与えられたとする。今、 $\psi$  サブシステムで測定を行い、 $A$  という結果を得たとすると、これは自動的に  $\phi$  サブシステムでも測定を行ったことに対応し、 $2$  という結果を得たことになっている。

このように、2つの系の量子力学的自由度間に生じた何らかの制限関係が量子エンタングルメントである。(F.1) の場合は、片方が決まるともう一方も完全に決まってしまう制限が課されていて**最大エンタングルド状態** (maximally entangled state) にある、と言う。

次に考えるのは、2つの系が「どの程度エンタングルしているのか」という指標である。上記の2つのような極端な例は簡単であるが、一般にどのような指標がもっともらしいか? という問題は大変面倒で満足のいく答は得られていない (満足の答がある保証はない)。ここでは、比較的良く用いられる概念、**エンタングルメント・エントロピー** (entanglement entropy) を紹介しておこう。

改めて、2つの系  $\mathcal{H}_A$ 、 $\mathcal{H}_B$  を考え、これらの状態をそれぞれ  $|A\rangle = \sum_{i=1}^{d_A} b_i |\eta_i\rangle$ 、 $|B\rangle = \sum_{j=1}^{d_B} c_j |\xi_j\rangle$  と、それぞれの系の基底を用いて書く。この表現を使うと、例えばエンタングルメントのない状態は

$$|A\rangle \otimes |B\rangle = \sum_{i,j=1}^{d_A, d_B} b_i c_j |\eta_i\rangle |\xi_j\rangle$$

である。一般の状態は

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |\eta_i\rangle |\xi_j\rangle \quad (F.2)$$

と書くことができる。

$|\psi_{AB}\rangle$  は次のようにシュミット分解 (Schmidt decomposition) することができる. 基底を  $\{|\eta_i\rangle\}$ ,  $\{|\xi_j\rangle\}$  から, それぞれ正規直交基底  $\{|u_i\rangle\}$ ,  $\{|v_i\rangle\}$  に取り直すことで

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{k=1}^d d_k |u_k\rangle |v_k\rangle, \quad \sum_{k=1}^d d_k^2 = 1 \quad (d = \min(d_A, d_B)) \quad (\text{F.3})$$

と書くことができる. これがシュミット分解である. この時基底  $\{|u_i\rangle \otimes |v_i\rangle\}$  をシュミット基底,  $d_k$  をシュミット係数と呼ぶ. この基底を使って, A, B それぞれ, 互いに自由度を積分して消去した時の密度演算子は

$$\rho_A = \sum_k d_k^2 |u_k\rangle \langle u_k|, \quad \rho_B = \sum_k d_k^2 |v_k\rangle \langle v_k| \quad (\text{F.4})$$

と書くことができる. この時,  $\rho_A$  あるいは  $\rho_B$  に対し,

$$S(\rho_A) = S(\rho_B) \equiv - \sum_{k=1}^d d_k^2 \log_2(d_k^2) \quad (\text{F.5})$$

とした時の  $S$  をエンタングルメント・エントロピー (entanglement entropy) あるいはフォン・ノイマン エントロピー (von Neumann entropy) と呼ぶ.

良くある例で, それぞれ基底  $\{|\phi \uparrow\rangle, |\phi \downarrow\rangle\}$ ,  $\{|\chi \uparrow\rangle, |\chi \downarrow\rangle\}$  で表される 2 つの系を考え, スピン 1 重項状態

$$|\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi \uparrow\rangle |\chi \downarrow\rangle - |\phi \downarrow\rangle |\chi \uparrow\rangle) \quad (\text{F.6})$$

について, シュミット分解して密度行列を求めると

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S(\rho) = 1 \quad (\text{F.7})$$

となる.

本文の 2 重スリットの例では

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle |\chi_1\rangle + |\psi_2\rangle |\chi_2\rangle) \quad (\text{F.8})$$

で,  $\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle = 0$  であれば, 上と全く同じく,  $S(\rho) = 1$ . 一方,  $\chi_1 = \chi_2$  であれば,  $|\Psi\rangle = (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \otimes |\chi\rangle$  であり, 全くエンタングルしていない. この時,  $S(\rho) = 0$  である.