

量子閉じ込めを使っているわけではないが, ヘテロ接合を使用した光学デバイスを一部紹介しておこう.

# 7.6 注入少数キャリアの閉じ込めと光デバイス

光や pn 接合によって注入された少数キャリアは, 拡散流, およびドリフト流によって固体中を移動する. 前者を 制御するためには, 少数キャリア注入の幾何学形状や注入量を変化させる. バイポーラトランジスタが典型例であ る. 後者は, ヘテロ, ショットキー, MOS 接合, 空間変調ドーピング, などによるポテンシャル, バイアス電圧や ゲート電圧によるその変化, などにより制御される. 後者のわかりやすい一例が, 太陽電池の窓層 (window layer) と呼ばれるものである. これは, 図 7.19(a) のように, 太陽電池の pn 接合トップ層の上にバンドギャップの大きな 半導体を接合したものである.

太陽電池の効率低下要因の一つが,表面の高密度局在準位 (Schottky 接合で Fermi 準位のピン止めなどを生じて いたもの)を介しての少数キャリア非輻射再結合である.外部への電流として取り出されるのは,pn 接合の内部電圧 で掃き出された少数キャリアである.表面側で光吸収により生じた少数キャリアは,ランダムな初期運動量を持ち, 表面方向にも拡散する.これらの多くは,表面準位を介して非輻射再結合を起こし,エネルギーが熱として失われ る.表面に反射防止のための凹凸構造があると,表面積の増大もあって更に表面再結合率は高くなる.

この時,表面側に図 7.19(a) のように大きなバンドギャップ *E*g2 を持つ層があれば,ヘテロ接合障壁により少数 キャリアの表面への拡散を押さえることができる.ヘテロ接合は,図の AlGaAs-GaAs のような接合性の良いものを 選べば接合面でのギャップ内準位の発生は押さえられ,界面で反射した少数キャリアは pn 接合へ拡散して光電流に



図 7.19 (a) 上:窓層付き太陽電池の模式図. AlGaAs/GaAs pn 接合を例に取った.下:同バンド模式図. (b) 量子効率スペクトルの概念図. 青線が窓層なし,赤線がありの場合. (c) HIT 太陽電池のパンフレットより. ヘ テロ接合による効率向上を示している.

寄与する. 図 7.19(b) が,エネルギーギャップ  $E_{g1}$  の半導体 pn 接合上にギャップ  $E_{g2}$  の窓層を積層した場合の量子 効率 (quantum efficiency) スペクトル  $\eta(h\nu)$  の模式図である ( $h\nu$  は光子のエネルギー). 量子効率は,入射した光子 数に対して光電流として流れる電子数の比で定義される. 窓層がない場合 (青線) は, $h\nu$  が大きくなり,吸収係数の 増大により表面近くでの少数キャリア生成が増えると,表面再結合増加によって  $\eta(h\nu)$  は減少するが,窓層を持つ場 合 (赤線) は,これがほぼなくなるため,1 に近い  $\eta$  が  $h\nu \sim E_{g2}$  近くまで得られる.  $h\nu$  が  $E_{g2}$  を超えると,窓層で の吸収が始まり,表面再結合が増えて  $\eta$  は減少する.  $E_{g2}$  として,太陽光スペクトルが減少して光子密度が低下する 付近を選ぶことができれば,変換効率の向上が期待できる.これは,拡散流をヘテロ障壁によって生じる一種のドリ フト流で抑える例と見ることができる.

巧妙な方法でこれを市場で販売する太陽電池に応用した例が,図7.19(c)に示した,SANYOで開発され,Panasonic ブランドで製造販売されている HIT(heterojunction with intrinsic thin-layer)太陽電池である. 基本的には Si 結晶 太陽電池であるが,Si はアモルファス化すると有効バンドギャップが広がることを利用し,活性層をアモルファス層 で挟んで少数キャリアを閉じ込める構造としたものである.変換効率の点では現在でもトップクラスであるが残念な ことに諸事情により製造中止がアナウンスされている.



7.6.1 発光ダイオード

図 7.20 GaAs pn 接合の EL スペクトル. [1] より.

思われる.

LED の特性で重要なのは、発光波長、そして発光効率である.ホモ pn 接合を発光層とする場合は、発光波長は式 (7.51) のように、ほぼバンドギャップで決定される。発光の量子効率  $\eta_q$  は、注入キャリア再結合過程 R に対する発光再結合過程  $R_r$  の割合

の発光強度は

$$\eta_{\rm q} \equiv \frac{R_{\rm r}}{R} = \frac{\tau_{\rm nr}}{\tau_{\rm nr} + \tau_{\rm r}} = \frac{\tau_{\rm tot}}{\tau_{\rm r}}, \quad \frac{1}{\tau_{\rm tot}} \equiv \frac{1}{\tau_{\rm nr}} + \frac{1}{\tau_{\rm r}}, \tag{7.52}$$

で定義される. *T*nr, *T*r はそれぞれ非輻射再結合,輻射再結合による少数キャリア寿命で,*T*tot はマティーセンの規則 で得られる総合的な少数キャリア寿命である.バンド間遷移による輻射再結合確率は,電子正孔濃度積に比例する. すなわち,

$$R_{\rm r} \propto np.$$
 (7.53)

ドリフト流閉じ込めの極めて重要な例として、発光デバ

イスを考える. 少数キャリア注入法としては, pn 接合によ

るものとする. すなわち, 電気を光に変換するエレクトロ

ルミネッセンスを考えることになる. pn 接合を使って注入 した少数キャリアの再結合で生じる光子を出力とする素子 が,発光ダイオード (light emitting diode, LED) である.

注入した少数キャリアが発光再結合によって光子を出力

(7.51)

する過程には様々存在するが,ここでは直接伝導帯端の電 子と価電子帯端の正孔が直接再結合するものを考える.そ

のように書くことができる. 図 7.20 に GaAs pn 接合から

の発光スペクトルの例を示す.温度低下と共に,格子定数 変化を主因とするバンドギャップ変化が生じ,発光は高エ

ネルギー側にシフトし、半値幅が狭まっている.77 Kのス

ペクトルに見える低エネルギー側の2番目のピークについ

ては, 論文 [1] では,「そのようなものが見える」としか記

述がないが、比較的浅めの不純物準位の発光ではないかと

 $I(\nu) \propto \nu^2 (h\nu - E_{\rm g})^{1/2} \exp\left[\frac{-(h\nu - E_{\rm g})}{k_{\rm B}T}\right]$ 

当然ながら、少数キャリア注入条件下では半導体方程式は成り立たず、 $np \neq n_i^2$ である.

少数キャリア電流密度は、(6.11)で見たように、電子電流密度と正孔電流密度の和、

$$j_e + j_h = e \left[ \frac{D_e n_{p0}}{L_e} + \frac{D_h p_{n0}}{L_h} \right] \left[ \exp\left(\frac{eV}{k_{\rm B}T}\right) - 1 \right], \tag{7.54}$$

及び,空乏層 (厚さ w<sub>d</sub>)内再結合電流密度

$$j_{\rm R} = \frac{en_i w_d}{2\tau_0} \left[ \exp\left(\frac{eV}{2k_{\rm B}T}\right) - 1 \right]$$
(7.55)

の和で表される. eV の項にファクター 1/2 がついているのは,空乏層内再結合は主にギャップ中央部の深い局在準 位を介して起こるためである.

pn 接合の n 側を高濃度ドープした  $n^+p$  接合では,発光は主に p 層内での電子-正孔再結合によるものである.従って,接合の注入効率は

$$\gamma = \frac{j_e}{j_e + j_h + j_R} \tag{7.56}$$

である.内部量子効率 (internal quantum efficiency) は (7.52), (7.56) より,

$$\eta_{\rm iq} = \gamma \eta_{\rm q} \tag{7.57}$$

と定義される.内部量子効率の決定要因としては,太陽電池などと同様,深い不純物準位など結晶質に関するもの, 表面再結合など構造に起因する様々なものがある.

LED デバイスにとって,最終的に重要なのが外部量子効率 (external quantum efficiency) である.式 (7.51) から もわかるように,バンド間直接発光光子のエネルギーは,状態密度を反映してエネルギーギャップよりも若干高いと ころにピークを持つため,結晶自身が発光光子を再吸収してしまい,最終的に外部に出て来ないと再吸収損失となる.



左図のように、表面からの距離をx、発光向きの表面 垂直方向からの角度を $\theta$ とすると、吸収係数を $\alpha$ と して、

$$\zeta_{\rm abs} = 1 - \exp(-\alpha x / \cos \theta) \tag{7.58}$$

の吸収損失が生じる.また,屈折率  $\bar{n}_1$  と  $\bar{n}_2$  の物質 の界面を光が通過する際には,

$$\Gamma = \left(\frac{\bar{n}_2 - \bar{n}_1}{\bar{n}_1 + \bar{n}_2}\right)^2 \tag{7.59}$$

の反射率で反射が生じる.表面でのこの反射による損

失を,フレネル (Fresnel) 損失と呼ぶ.また,半導体内部の方が外部より屈折率が大きいため, $\theta$ が全反射の臨界角  $\theta_c$ を超えると,表面で全反射され,これも光学損失となる.最終的に外部に放射される光子数の,結晶内部で発生し た光子数に対する割合を,光学効率 (optical efficiency),素子を通過した全キャリアに対する割合を,外部量子効率 と呼ぶ.光学効率を $\eta_{opp}$ ,外部量子効率を $\eta_{exq}$ と書くと,定義より,

$$\eta_{\rm exq} = \eta_{\rm opp} \eta_{\rm iq} \tag{7.60}$$

である. 単純な pn 接合の外部量子効率は一般に大変低く,数% にも満たないことが多い.

特に,光学損失の内,フレネル損失,全反射損失については,太陽電池の場合と同様,表面に微細構造で修飾をして,多重反射を生じさせることで低下させることが行われている.これも太陽電池の窓層と同様,内部量子効率を高め,光学損失の内でも特に吸収損失を強く抑える構造として,ダブルヘテロ接合 (double-heterojunction, DH) LED が,多くの場合,使用されている.これは,図7.21 に概念的に示したように,活性層物質に比べてエネルギーギャップの大きな物質でクラッド層を構成するものである.図では更に,pn 接合のドーピング部分もクラッド層で持たせており,活性層のドーピングをしないことで,ドーパントが非発光再結合中心となることを避けている.狭領域に注



図 7.21 ダブルヘテロ接合 LED の概念図. InGaN を活性層 とするものを例に取っている.

入キャリアを集中することで np 積を大きくして内部発光効率を高めることができる.更に発光光子エネルギーはク ラッド層のバンドギャップよりも小さいため,薄い活性層から出ると吸収が起こらない.背面側に鏡面になるような 構造を入れて背面側に射出された光子も前方へ反射するように設計されている.

文献 [2] では, InGaN をベースにした YAG 励起型の LED で外部量子効率 77% を達成した,としている.通常は, 30% 程度でも高効率な方であり,非常な高効率と言うことができる.

# 7.6.2 レーザーダイオード

LED の発光は、図 4.1 (b) の自然放出によるものであった.ここで、(c) の誘導放出を考える. 遷移確率中の  $|A_0|^2$ は、電磁場のエネルギー密度に比例する、このエネルギー密度を、系の体積を V、モード  $\lambda$  の光子数を  $n_{\lambda}$  として、  $n_{\lambda}\hbar\omega_{\lambda}/V$  とする.このようなコヒーレントな電磁場は、物質中に電気双極子モーメント  $\mu$  を誘起し、 $|a\rangle$  と  $|b\rangle$  の非 対角要素を生じる. $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 \cos(\omega_0 t)$  とすると、 $\mathbf{p} = m\omega_{\lambda}\mathbf{r}$  となる. $\vec{e} \cdot \mathbf{p}$  を、 $(\omega_{\lambda}m/e)\vec{e} \cdot \mu$  とし、 $\omega = \omega_0 = \omega_{\lambda}$  とす ると、 $|b\rangle \rightarrow |a\rangle$  の誘導放出確率振幅は

$$P_{ba}(t) = \frac{\omega_{\lambda}}{\epsilon\epsilon_0 \hbar V} |\langle a|\vec{e} \cdot \boldsymbol{\mu}|b\rangle|^2 n_{\lambda} \frac{t^2}{2}$$
(7.61)

で、 $n_{\lambda}$ に比例する.また、対称形であるから光吸収過程  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$ の確率振幅  $P_{ab} = P_{ba}$ である. (7.61) は、ある モードにいる光子の数が多いほど、このモードへの誘導放出確率が高いことを示しており、ボース・アインシュタイ ン凝縮などと同じボース誘導 (Bosonic stimulation) 現象の一種と捉えることもでき、誘導放出に際して、放出を誘 導 (刺激) する光子と放出される光子とがコヒーレントであることを示している [3].このことは、 $\mu$ が電磁場によっ て誘起されていることから、古典的にも了解される.

今,光が伝播する媒質を,このような二準位系の集合でモデル化する.二準位系のの内状態  $|a\rangle$ , $|b\rangle$  にあるものの密度をそれぞれ  $N_a$ ,  $N_b$  とする.上記  $\omega_\lambda$  の光が伝播する時,夫々の二準位系との平均相互作用時間を $\tau$ とすると,単位体積あたりの光子吸収エネルギーは

$$\mathcal{E} = (N_a - N_b) P_{ba}(\tau) \hbar \omega_\lambda \tag{7.62}$$



(c) Fabry-Perot type

(d) Distributed Feedback type

図 7.22 (a) 平行鏡による光の閉じ込め、鏡による帰還作用と見ることができる。(b) 二重ヘテロ構造レーザー ダイオードの構造模式図、半導体の代表例として AlGaAs, GaAs を挙げている、順方向バイアスにより, GaAs 部分に反転分布が生じる. (c) バンドギャップの大きな A 物質で B 物質を挟み,光の共振器に試料端のへき開 面での反射を用いたファブリ-ペロー型レーザー構造. (d) A 物質-B 物質界面に波型回折格子を設けた分布帰還 (DFB) 型レーザー構造.

となる. もし,  $N_b > N_a$  という状態が実現すれば $\mathcal{E} < 0$ , すなわち, 光が伝播するにつれて媒質からエネルギーを吸収して振幅が増大する. これは, 位相のそろったコヒーレント状態の光であり, このような光子の増幅現象(同一状態の光子数を増加させること)を生じさせること, およびその仕掛け (装置)を一般にレーザー (light amplification by stimulated emission of radiation, LASER) と呼ぶ.

レーザーダイオード (laser diode, LD) は, LED と同様に pn 接合を用いた発光素子であるが, 2 重ヘテロ接合 (あ るいはそれより更に強い閉じ込め構造) を用いて反転分布を作り出し,レーザーとするものである.光を強く増幅す るためには,反転分布媒質の中を光を進ませる必要があるが,光も鏡面を使って共鳴器中に閉じ込め,同じ媒質中を 往復させることで強く増幅する (図 7.22(a)).図 7.22(b) が初期の頃の LD の構造を示したものである.図 7.22(c) は共鳴器として最も単純なファブリ-ペロー (Fabry-Perot)型を用いた例.図 7.22(d) は,ヘテロ境界面を三角形の 連なり状態に加工し,面内での反射を使用して共鳴器としたもの.分布帰還型 (distributed feedback, DFB) レー ザーと呼ぶ.



# 第8章 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.

# 8.1 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 プ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 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<sup>\*1</sup>. 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って伝播する距離を量子コヒーレンス長と呼び *l*<sub>o</sub> 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 χ との間に相互作用をしたとする。その結果,

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

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  $\psi \geq \chi$  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、*χ*<sub>1</sub> と *χ*<sub>2</sub> が直交したのがたまたまで、更に時間発展すると直交が外れて干渉項が復活してし



<sup>\*1 「</sup>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.

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\*<sup>2</sup>.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  $E_{\rm F}$  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  $\Delta E = k_{\rm B}T$  である。時間  $\tau$  だけ伝播して生じる位相のずれは、  $2\pi\Delta f\tau = 2\pi\Delta E\tau/h = 2\pi k_{\rm B}T\tau/h$  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、

$$\tau_c = \frac{h}{k_{\rm B}T}$$

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  $l_{\rm th}$  は

$$l_{\rm th} = \sqrt{\frac{hD}{k_{\rm B}T}} \tag{8.1}$$

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<sub>F</sub> で試料を抜けていくと考えてよいので,

$$l_{\rm th} = \frac{hv_{\rm F}}{k_{\rm B}T} \tag{8.2}$$

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,  $l_{B} = \sqrt{h/eB}$  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.

## 8.2 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 [4]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.

<sup>\*&</sup>lt;sup>2</sup> 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のと同様, 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」が元に自然に ほどけて戻ることは事実上なく, 干渉性は失われたと考えてよい.



8.2.1 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,熱平衡にあっ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 μL, μR, とする. 伝導体の

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、

$$j(k) = \frac{e}{L}v_{\rm g} = \frac{e}{\hbar L}\frac{dE(k)}{dk}$$
(8.3)

である. 全電流 J は

$$J = \int_{k_{\rm L}}^{k_{\rm R}} j(k) \frac{L}{2\pi} dk = \frac{e}{h} \int_{\mu_{\rm R}}^{\mu_{\rm L}} dE = \frac{e}{h} (\mu_{\rm L} - \mu_{\rm R}) = \frac{e^2}{h} V$$
(8.4)

であるから,

$$G = \frac{J}{G} = \frac{e^2}{h} \equiv G_q \equiv R_q^{-1}.$$
(8.5)

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<sup>2</sup>/h を量子化伝導度と呼ぶ場合も多い. R<sub>q</sub> 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  $e/\Delta x$  で、その波束の速度は  $\Delta E/\hbar\Delta k$  であるから、

$$J = \frac{e}{\Delta x} \frac{\Delta E}{\hbar \Delta k} = \frac{e^2}{h} V \tag{8.6}$$

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.

## 8.2.2 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 8.1(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,??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 8.1(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??(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



図 8.1 (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 (8.8)の有効ポテンシャル  $V_{\text{eff}}(x)$ を模式的に書いたもの.

する.

$$H\psi(x,y) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \varphi_n(y)\phi(x)$$
  
=  $\varphi_n(y) \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{n\pi}{2W}\right)^2\right) \phi(x) = E\varphi_n(y)\phi(x)$  (8.7)

となる. (8.7) 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,

$$V_{\rm eff}(n,x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2W(x)}\right)^2 \tag{8.8}$$

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 8.1(b)の下の図である.y 方向の準 位量子化 n によって V<sub>eff</sub>(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

$$E_{\text{tot}} = E_{kx}(n, x) + V_{\text{eff}}(n, x)$$
(8.9)

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  $E_{kx}(n,x)$  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.

#### 8.2.3 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,(8.8)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 8.2(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 8.2(b) は, ゲート電圧  $V_g$  に対して QPC の電気伝導度  $G(流れる電流を,両側の電極の電位差 (化学ポテンシャル差を e で割ったもの) で割ったもの) をプロットしたものである. G が <math>V_g$  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 (8.5) の結果が確認されたことになる.

図 8.3 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 8.3(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>\*3</sup>.

### 8.2.4 伝導チャネルと透過率

以上,QPC を題材にして伝導チャ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  $E_{\rm F}$ の位置を固定すると, $E_{\rm F}$ 以下の伝導チャネル数が増大する.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 $n_{\rm 2D}$ として,単位長さあたりのチャネル数は, $\sqrt{n_{\rm 2D}}$ 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、伝導チャネル間の遷移である. そこで、散乱中心を図 8.4(b)のように点で表し、この 点を介してチャネル間を電子が移り変わるとする. 量子力学的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、チャネル描像では図 8.4(c)のように蜘蛛の巣状態となる. 一見収拾 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*番目のチャネルから1個の電子が出口



(a)

図 8.2 (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>\*3</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 €0 として 1/√(ϵ-€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



(a)

図 8.3 (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<sub>ch</sub> = 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)



図 8.4 (a) 2次元の伝導体を1次元チャ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」.

の j 番目のチャ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 l チャ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,

$$G = 2\frac{e^2}{h}\sum_{i,j}T_{ij} \tag{8.10}$$

となる. (8.10) をランダウアーの2端子公式 (Landauer formula for 2-terminal conductance) と呼ぶ.

# 8.3 S 行列

伝導チャ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 8.5(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,

$$\begin{pmatrix} b_1(k) \\ b_2(k) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{\rm L} & t_{\rm R} \\ t_{\rm L} & r_{\rm R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix}$$
(8.11)

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

$$T_{\rm L,R} = |t_{\rm L,r}|^2 = 1 - R_{\rm L,R} = 1 - |r_{\rm L,R}|^2$$
(8.12)

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 (8.11)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と、チャ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 個の伝導チャネルが存在し、フェルミ波数は各チャネルで異なっている. このような場合、式 (8.11)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)も失われる. そこで、波動関数を  $\psi_{ai}(k_F)$  などと書いて

$$a_i(k) = \sqrt{v_{\rm Fi}}\psi_{ai}(k_{\rm F}) \tag{8.13}$$

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い、(8.13) を複素確率密度流と呼 ぶことにしよう.

# 8.3.1 S 行列の接続 (合成)

T 行列を直列に接続するのは2 重障壁のところでや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

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = S_A \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{\rm L}^{(A)} & t_{\rm R}^{(A)} \\ t_{\rm L}^{(A)} & r_{\rm R}^{(A)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = S_B \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{\rm L}^{(B)} & t_{\rm R}^{(B)} \\ t_{\rm L}^{(B)} & r_{\rm R}^{(B)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}$$
(8.14)

と置く.



図 8.5 (a)T-行列 M<sub>T</sub> の概念図. (b) S-行列 S の概念図

$$\xrightarrow{a_1} S_A \xrightarrow{a_2} \xrightarrow{a_3} S_B \xrightarrow{a_4} \xrightarrow{b_4} \xrightarrow{b_4}$$

境界条件

$$b_2 = a_3, \quad a_2 = b_3 \tag{8.15}$$

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.

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} r_{L}^{(A)} + t_{R}^{(A)} r_{L}^{(B)} \left(I - r_{R}^{(A)} r_{L}^{(B)}\right)^{-1} t_{L}^{(A)} & t_{R}^{(A)} \left(I - r_{L}^{(B)} r_{R}^{(A)}\right)^{-1} t_{R}^{(B)} \\ t_{L}^{(B)} \left(I - r_{R}^{(A)} r_{L}^{(B)}\right)^{-1} t_{L}^{(A)} & r_{R}^{(B)} + t_{L}^{(B)} \left(I - r_{R}^{(A)} r_{L}^{(B)}\right)^{-1} r_{R}^{(A)} t_{R}^{(B)} \end{pmatrix}.$$
(8.16)

大変面倒な形をしていて、どうしてわざわざこのようなものを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.(8.16)の(1,1)成分を考え、第2項に現れた除算を

$$\left(I - r_{\rm R}^{(\rm A)} r_{\rm L}^{(\rm B)}\right)^{-1} = I + r_{\rm R}^{(\rm A)} r_{\rm L}^{(\rm B)} + (r_{\rm R}^{(\rm A)} r_{\rm L}^{(\rm B)})^2 + (r_{\rm R}^{(\rm A)} r_{\rm L}^{(\rm B)})^3 + \cdots$$
(8.17)

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 (8.11) 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す 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 (8.13) 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. (8.17) 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<sub>1</sub>などをベクトル,r(A)<sub>r</sub>など を行列で表示することで容易に多チャネルに拡張するためである.

伝送路上ではチャネル間に相互作用(散乱)を考えていない.従って, 多チャネルの場合,チャ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.

# 8.4 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 (8.13) の定義から, 確率密度の保 存により  $|a|^2 = |Sa|^2$  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 (Onsager 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 **B** に対して

$$S(\boldsymbol{B}) = {}^{t}S(-\boldsymbol{B}) \quad (S_{mn}(\boldsymbol{B}) = S_{nm}(-\boldsymbol{B}))$$
(8.18)

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

$$\left[\frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V\right]\psi = E\psi$$
(8.19)

の複素共役をとり、 $A \rightarrow -A$ とすると、

$$\frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \bigg] \psi^* = E\psi^* \quad \therefore \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\}$$
(8.20)

すなわち, $\psi(B)$ と $\psi^*(-B)$ は同じ解集合を形成している ({…} は… の集合を表す).ここで、考えている $\psi(B)$ は Schrödinger 方程式 (8.19)の散乱解だったことを思い出そう、散乱解を Sc{ $a \rightarrow b$ }(aは S 行列の入射波,b は散乱波)と表すと、

$$Sc\{\boldsymbol{a}(B) \to \boldsymbol{b}(B)\} \in \{\psi(B)\},\tag{8.21}$$

*i.e.*, 
$$\boldsymbol{b}(B) = S(B)\boldsymbol{a}(B)$$
 (8.22)

(8.22)の両辺の複素共役をとって

$$b^*(B) = S^*(B)a^*(B).$$
 (8.23)

一方,進行波 exp(±*i***kr**) 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>\*4</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

$$\operatorname{Sc}(\boldsymbol{b}^*(B) \to \boldsymbol{a}^*(B)) \in \{\psi^*(B)\}$$
(8.24)

$$\therefore \quad B \to -B \ \varepsilon \ \forall \ \delta \ \varepsilon \ \{ \boldsymbol{b}^*(-B) \to \boldsymbol{a}^*(-B) \} \in \{ \psi^*(-B) \} = \{ \psi(B) \}$$

$$(8.25)$$

*i.e.* 
$$a^*(-B) = S(B)b^*(-B)$$
 (8.26)

(8.26) より

$$\boldsymbol{b}^{*}(B) = S^{-1}(-B)\boldsymbol{a}^{*}(B) \tag{8.27}$$

であるから, (8.23) と比較して

$$S^*(B) = S^{-1}(-B) = S^{\dagger}(-B) \quad (\because \text{ unitarity } SS^{\dagger} = S^{\dagger}S = I)$$
$$\therefore S(B) = {}^tS(-B) \tag{8.28}$$

以上より相反性が証明された.

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

$$\rho_{xx}(\boldsymbol{B}) = \rho_{xx}(-\boldsymbol{B}) \tag{8.29}$$

が導かれる.これは,輸送係数の線形性を仮定しているので,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.

### 8.5 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 などで指数付けしよう (図 8.6). 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,

$$J_p = -\frac{2e}{h} \sum_{q} [T_{q \leftarrow p} \mu_p - T_{p \leftarrow q} \mu_q]$$
(8.30)

<sup>\*4 (8.19)</sup>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 iwt の符号はそのままにして ikr の符号のみ反転す ることを意味する.



図 8.6 LB 公式を導くモデル.

と書くことができる. $T_{p\leftarrow q}$ 等を,

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

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

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

と表すことができる. また,

$$V_q = \frac{\mu_q}{-e}, \quad G_{pq} \equiv \frac{2e^2}{h} T_{p \leftarrow q} \quad \succeq \ \forall < \succeq$$
$$J_p = \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q] \quad (8.31)$$

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

$$\sum_{q} J_q = 0 \tag{8.32}$$

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、

$$\sum_{q} [G_{qp} - G_{pq}] = 0 \tag{8.33}$$

となる.

更に、外部磁場 B に対して Onsager の相反定理

$$G_{qp}(B) = G_{pq}(-B) \tag{8.34}$$

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,

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}$$
(8.35)

と書くことができる.

さて、カシミール (Casimir) 問題と呼ばれる、

$$J_1 = -J_3, \quad J_2 = -J_4 \tag{8.36}$$

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

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{13} \\ V_{24} \end{pmatrix}$$
(8.37)

という形に書くことができる. ただし,

$$\alpha_{11} = 2G_q[-\mathscr{T}_{11} - S^{-1}(\mathscr{T}_{14} + \mathscr{T}_{12})(\mathscr{T}_{41} + \mathscr{T}_{21})]$$
(8.38a)

$$\alpha_{12} = 2G_q S^{-1} (\mathcal{T}_{12} \mathcal{T}_{34} - \mathcal{T}_{14} \mathcal{T}_{32}) \tag{8.38b}$$

$$\alpha_{21} = 2G_q S^{-1} (\mathscr{T}_{21} \mathscr{T}_{43} - \mathscr{T}_{23} \mathscr{T}_{41}) \tag{8.38c}$$

$$\alpha_{22} = 2G_q [-\mathscr{T}_{22} - S^{-1}(\mathscr{T}_{21} - \mathscr{T}_{23})(\mathscr{T}_{32} + \mathscr{T}_{12})]$$
(8.38d)

$$S = \mathscr{T}_{12} + \mathscr{T}_{14} + \mathscr{T}_{32} + \mathscr{T}_{34} = \mathscr{T}_{21} + \mathscr{T}_{41} + \mathscr{T}_{23} + \mathscr{T}_{43}$$
(8.39)

である. (8.37) 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, (8.36) の条件が満たされるように, V<sub>1</sub>, V<sub>2</sub>, V<sub>3</sub> を調 整することになる.

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. (8.34) が (8.37) に与える 条件は,

$$\alpha_{11}(B) = \alpha_{11}(-B), \quad \alpha_{22}(B) = \alpha_{22}(-B), \quad \alpha_{12}(B) = \alpha_{21}(-B)$$
(8.40)

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 R<sub>13,24</sub> などと書くこ とにすると,

$$\mathcal{R}_{13,24} = \frac{V_2 - V_4}{J_1} = \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \tag{8.41}$$

となり, 行列要素は Onsager の相反定理を満たしているが, R は (8.29) のような磁場反転に対する対称性を満たさない. 一方

$$\mathcal{R}_{24,13} = \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \tag{8.42}$$

と、(8.40)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

$$\mathcal{R}_{mn,kl} = R_q \frac{\mathscr{T}_{km} \mathscr{T}_{ln} - \mathscr{T}_{kn} \mathscr{T}_{lm}}{D}, \qquad D \equiv R_q^2 (\alpha_{11} \alpha_{22} - \alpha_{12} \alpha_{21}) S$$
(8.43)

なので,相反関係

$$\mathcal{R}_{mn,kl}(B) = -\mathcal{R}_{kl,mn}(-B) \tag{8.44}$$

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.

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* → −*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] W. N. Can, IEEE Trans. Electron Dev., ED-12, 531 (1965).
- [2] Y. Narukawa et al., Jpn. J. Appl. Phys. 46, L963 (2007).
- [3] 本格的に学ぶには例えば, R. Loudon, "The Quanutm Theory of Light" (3rd ed., Oxford, 2000); P. Meystre and M. Sargent III, "Elements of Quantum Optics" (Springer, 1990); 松岡正浩 「量子光学」 (裳華房, 2000) など.
- [4] 早川尚男 「非平衡統計力学」 (サイエンス社, 2007).
- [5] S. Datta, "ElectronTransport in Mesoscopic Systems" (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [6] 勝本信吾 「メゾスコピック系」 (朝倉書店, 2002)