

半導体 第 10 回

勝本信吾
東京大学物性研究所

2013 年 6 月 20 日

2 変調ドープと 2 次元電子系

ヘテロ接合を用いて作製される人工系で最もポピュラーなものが変調ドープヘテロ接合 2 次元電子系 (two-dimensional electron gas, 2DEG) で、図 10.1 のように単一のヘテロ接合を作り、バンドギャップの大きな半導体側にドーピングを行う。以下 n 型について見ていく。

z 軸を図のように表面、ヘテロ接合面に垂直に取る。硬いバンド近似では接合面で伝導帯に不連続 ΔE_c が生じ、電荷が再配置する。半導体の組み合わせとして混晶 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ と GaAs の組み合わせを使用すると、この ΔE_c の階段関数 $V_h(z)$ 前節の近似内では包絡関数を波動関数そのものと考え、更に電子間相互作用を Hartree 近似で扱えば、イオン化ドナー、バンド不連続、2DEG 自身が作る静電ポテンシャルそのものが 2DEG の量子化準位を作る形の自己無撞着な Poisson-Schrödinger 方程式を解くことで面垂直方向波動関数 (包絡関数) が得られる。

接合面に垂直な内部方向に z 軸を取る。図 10.1 で表面の Schottky 障壁により空乏化領域が生じる。第 9 回 4.1 節で見たように、表面に金属があるとここに堆積した電荷を $-Q$ とすると、Schottky 障壁による電場は、空乏領域のイオン化ドナー (図では Si) 電荷 $+Q$ によって補償され、内部には入らない。残りのイオン化ドナーすべて (すなわち、 z 方向に積分したもの) の接合単位面積あたりの密度を N_{dep} とすると、これによって生じる静電ポテンシャルは、ドープ領域より内部では $V_D(z) = (4\pi e^2/\epsilon\epsilon_0)N_{\text{dep}}z$ である。ドープ領域とヘテロ接合面との間には通常スペーサーと呼ばれる非ドープ領域が設けられる。これによって 2 次元電子とイオン化不純物中心が空間的に分離されるため、2 次元電子は極めて高い移動度を持つ。ただし、図からわかるように、スペーサーを厚くするとバンドが持ち上がりすぎて 2 次元電子ができなくなってしまう。

2DEG 波動関数を前節でやったように $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y)\zeta(z)$ と変数分離形に書いておく。 $\zeta(z)$ が包絡関数である。2DEG 面密度を n_{2d} と書くと、これは、 $\zeta(z)$ が z 方向の運動エネルギーとして持つ離散準位エネルギー E_z の関数である。位置 z' の電荷面密度は $-en_{2d}|\zeta(z')|^2$ で、このシート電荷が作る電場は、Gauss の定理より

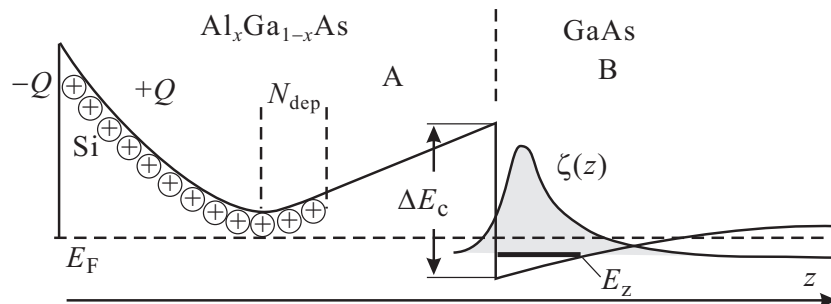


図 10.1 変調ドープによるヘテロ接合 2 次元電子系の生成スキーム例。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ の場合について例示している。

$-(4\pi e^2/\epsilon\epsilon_0)n_{2d}|\zeta(z')|^2|z-z'|$ と書くことができる．これが，平均場近似の Hartree ポテンシャルを作ると考える．

$$V_{2d}(z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0}n_{2d}(E_z) \int_{-\xi}^{\infty} |\zeta(z')|^2|z-z'|dz'.$$

ξ は， $\zeta(z)$ の AlGaAs 側への沁み出し距離より十分長く取る．接合面で不連続 ΔE_c を持つ階段ポテンシャルを $V_h(z)$ とすると，2DEG が感じるポテンシャルは

$$V(z) = V_h(z) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon\epsilon_0} \left[N_{\text{dep}}z - n_{2d}(E_z) \int_{-\xi}^{\infty} |z-z'||\zeta(z')|^2 dz' \right] \quad (10.1)$$

となる．これと， $\zeta(z)$ に関する Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \zeta(z) = E_z \zeta(z) \quad (10.2)$$

を自己整合的に解くことで $\zeta(z)$ を得ることができる．ただし，有効質量 m^* は 2 つの半導体で変化し，境界条件として

$$\zeta(0)^{(A)} = \zeta(0)^{(B)}, \quad \left. \frac{1}{m_A^*} \frac{d\zeta^{(A)}}{dz} \right| = \left. \frac{1}{m_B^*} \frac{d\zeta^{(B)}}{dz} \right| \quad (10.3)$$

を課す．(10.1) から (10.3) までを整合させて解く形式が Poisson-Schrödinger 形式である．これは Hartree 近似であり，では電子相関 Fock の効果はどうか，ということであるが， $\zeta(z)$ や E_z を議論する限りではそれ程大きな影響を与えないことがわかっている．

Poisson-Schrödinger 方程式を数値的に解くことは，GaAs の伝導帯のようにバンド構造が比較的単純でスピン軌道相互作用も小さいものについては比較的簡単であるが，谷数が増え，スピン軌道相互作用が重要になる場合は次第に計算規模が大きくなる． $\zeta(z)$ を使って更に計算をしたい場合，簡単な形を持つ近似解が便利である．Fang-Howard 近似は

$$\zeta(z) = \sqrt{\frac{b^2}{2}} z \exp\left(-\frac{bz}{2}\right) \quad (10.4)$$

を試行関数， b を変分パラメーターとして変分法を行うもので，結果は

$$b^3 = \frac{48\pi m e^2}{\epsilon\epsilon_0 \hbar^2} \left(\frac{11}{32} n_{2d} + N_d \right) \quad (10.5)$$

となる．これは沁み出しを無視しており，沁み出しを考慮した近似式は [1] などに与えられている．

3 コヒーレント量子輸送現象

3.1 量子コヒーレンスが輸送現象に重要になる時

第 3 回第 4 節で考えたボルツマン方程式による取り扱いでは，各粒子を古典的に扱い，統計性のみで量子性を適用した．量子コヒーレンスが問題になるような伝導では，統計性と伝播速度に関係が生じ，更に透過率に試料の詳細な境界条件が現れ，全くと言ってよいほど異なる様相が現れる．また，閉じ込めによって量子相関や電子間相互作用も極めて顕著な形で現れることがある．

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^{*1}．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_ϕ と書くことが多い．

^{*1} 「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．

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，

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

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 ψ と χ は最大エンタングルド状態 (maximally entangled state) にある (付録 K)．

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_1 と χ_2 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まうのではないかと，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*2．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 τ 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 2π になる時間が臨界伝播時間として τ_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

$$l_{th} = \sqrt{\frac{hD}{k_B T}} \quad (10.6)$$

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，

$$l_{th} = \frac{hv_F}{k_B T} \quad (10.7)$$

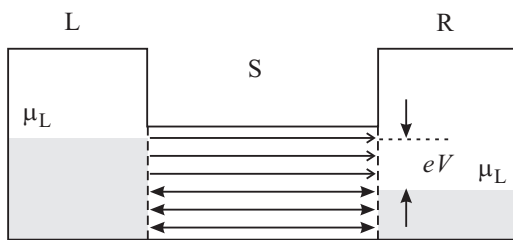
となる．以上の熱長 (thermal length) は，デコヒーレンスと直接の関わりがないにも関わらず，実験上，見かけのコヒーレンス制限長になるので注意が必要である．

*2 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」が元に戻るにほめて戻ることが事実上なく，干渉性は失われたと考えてよい．

l_ϕ はわかったとして、では l_ϕ 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_ϕ 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_ϕ 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關与する。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_ϕ 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。

3.2 1次元フェルミ粒子系の電気伝導度



「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）につながっている。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 μ_L, μ_R とする。伝導体

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、

$$j(k) = \frac{e}{L} v_g = \frac{e}{\hbar L} \frac{dE(k)}{dk} \quad (10.8)$$

である。全電流 J は

$$J = \int_{k_L}^{k_R} j(k) \frac{L}{2\pi} dk = \frac{e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} dE = \frac{e}{h} (\mu_L - \mu_R) = \frac{e^2}{h} V \quad (10.9)$$

であるから、

$$G = \frac{J}{V} = \frac{e^2}{h} \equiv G_q \equiv R_q^{-1}. \quad (10.10)$$

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 Δk の幅の波数を使って Δx 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、

$$J = \frac{e}{\Delta x} \frac{\Delta E}{\hbar\Delta k} = \frac{e^2}{h} V \quad (10.11)$$

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。

3.2.1 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10.2(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。この図では斜線で引いたような形状に微細加工した金属を2DEG

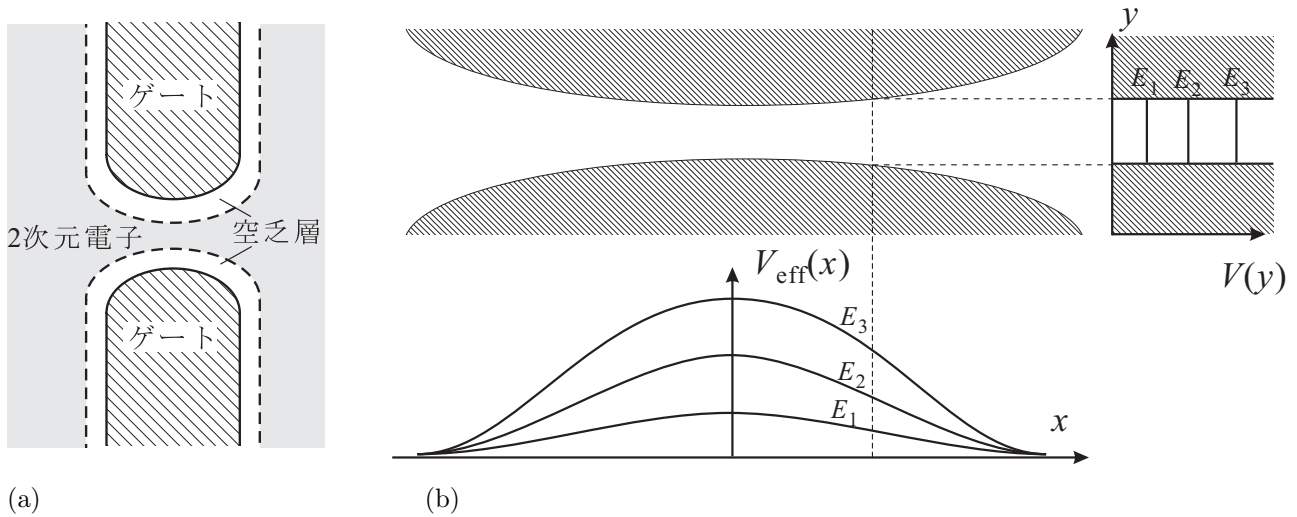


図 10.2 (a) 量子ポイントコンタクト (Quantum Point Contact, QPC, 後述) の模式図．(b) QPC の簡単なモデル．上：実空間で斜線部分からは電子が排除され，空白部分に 1 次元的に閉じ込められているとする．右の図は，点線で示した断面での閉じ込めポテンシャル．離散化固有エネルギー $E_{1,2,3}$ は，下図の 3 つの有効ポテンシャルに対応．下：式 (10.13) の有効ポテンシャル $V_{\text{eff}}(x)$ を模式的に書いたもの．

上に乗せて，第 9 回 4.1 節で見たショットキー障壁を形成する．通常ショットキーゲートと称するが，今の場合，2 つに別れた形状のためスプリットゲート (split gate) とも呼ぶ．このゲートに負電圧を加えると，点線で示したように空乏領域がゲート下に広がり，細長い伝導領域ができる．

これを図 10.2(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 $E = E_{k_x} + E_{k_y}$ 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_{k_x}, E_{k_y} 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)．

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．

$$\begin{aligned} H\psi(x, y) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi_n(y)\phi(x) \\ &= \varphi_n(y) \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{n\pi}{2W} \right)^2 \right) \phi(x) = E\varphi_n(y)\phi(x) \end{aligned} \quad (10.12)$$

となる．(10.12) 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，

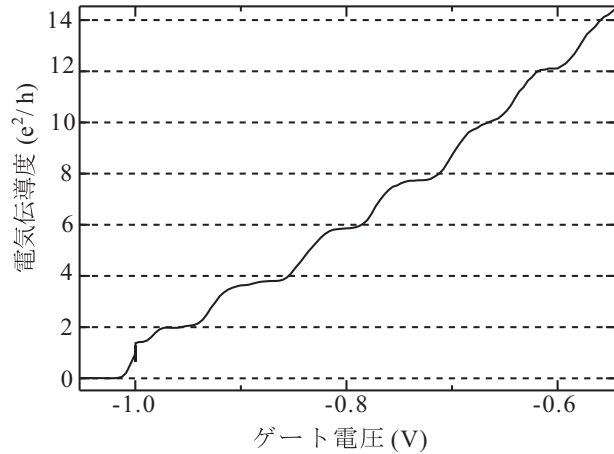
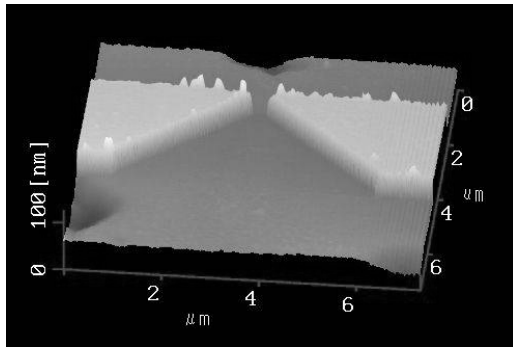
$$V_{\text{eff}}(n, x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2W(x)} \right)^2 \quad (10.13)$$

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 10.2(b) の下の図である*3． 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

$$E_{\text{tot}} = E_{k_x}(n, x) + V_{\text{eff}}(n, x) \quad (10.14)$$

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．

*3 (10.13) のような矩形井戸ポテンシャルは現実のスプリットゲートでは実現し難く，実際には調和振動子ポテンシャルに近づいていると考えられる．従って，有効障壁ポテンシャルは n に対して等間隔で並ぶようになる．



(a)

(b)

図 10.3 (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 30mK．

3.2.2 量子ポイントコンタクトの電気伝導実験

実際に図 10.2(a) のような構造を作って伝導を調べた実験を見てみよう．図のキャプションにも記入したように，短い量子細線に広い「電極」がついた構造を量子ポイントコンタクト (quantum point contact, QPC) と呼ぶ．ゲートに加える負電圧の大きさを増加させると，(10.13) 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ンネルの数が減少する．

図 10.3(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 10.3(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 (10.10) の結果が確認されたことになる．

図 10.4 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 10.4(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ン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^{*4}．

3.3 1次元系の接続と S 行列

量子輸送を量子回路として捉える上で「ワイヤー」に相当する伝導チャンネルの伝導度を考えた．回路としては次にこれらをつなぎ合わせる必要がある．量子回路に重要なのはその際に量子コヒーレンスを保つことである．電子回路，例えば高周波回路などで伝送線路をつなぎ合わせると，一部は反射し，一部は透過する．これは量子回路では散乱に相当する．これを表すのが S 行列である．

以下，S 行列，また場合によっては T 行列を使って 1次元の伝導チャンネルをつなげて量子回路を形成していくことを考えよう．

^{*4} 例えば，チャンネル数が 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 ϵ_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ン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ンネルを通過し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

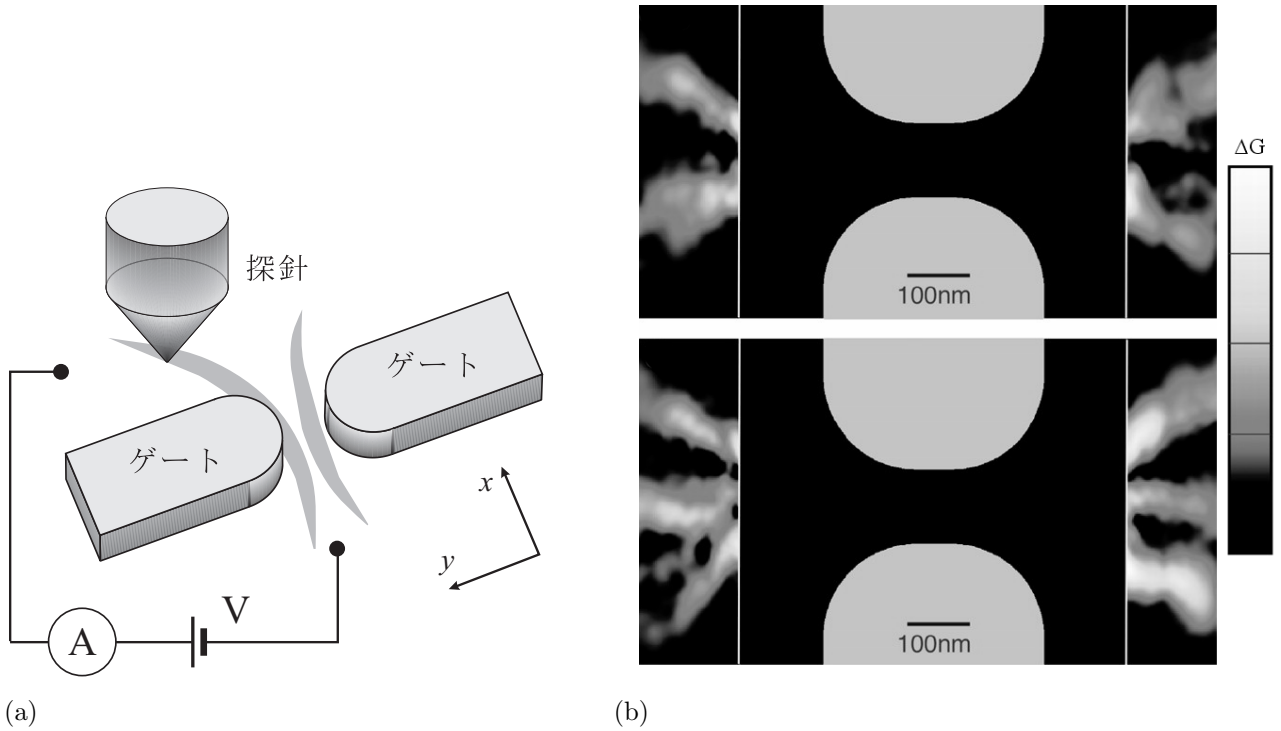


図 10.4 (a)QPC から流れ出る波動関数密度を走査プローブ顕微鏡 (SPM) を使用して測定するための実験のセットアップ．QPC の伝導度を測定しながら，SPM の探針を走査する．(b) このセットアップを使って得られた伝導度の量子化値からの「ずれ」の像．中央部分は原子間力顕微鏡像から得られた QPC 構造を描いたもの (形状は正確だが像そのものではない)．上は $n_{\text{ch}} = 2$ の伝導度ステップでの測定，下は 3 のステップでの測定． (データは Topinka *et al.*, Science **289**, 2323 (2000) より)

3.3.1 T 行列と S 行列

1次元の完全伝導体中に散乱体がある時，確率密度流の一部を反射，一部を透過する．図 10.5(a) のように，1次元伝導体を結晶波数 $\pm k$ の波が伝播する状況を考え， $+k$ の波動関数を $A_i(k)$ ， $-k$ を $B_i(k)$ ($i = 1, 2$) とそれぞれ置く．次で定義された T 行列 (transfer matrix, T-matrix)

$$\begin{pmatrix} A_2(k) \\ B_2(k) \end{pmatrix} = M_T \begin{pmatrix} A_1(k) \\ B_1(k) \end{pmatrix} \quad (10.15)$$

は，これら 1, 2 の 1次元チャンネルの接続を行列の形で表したものの一種である．接続点を「散乱体」と見ることができる．行列が変換の対象とするベクトルが，1つの 1次元チャンネルの伝播性質をまとめたものであるから，出力を更に次の T 行列の入力とすることができる．

類似の概念で，散乱行列 (S 行列) (scattering matrix, S-matrix) を導入しておこう．これは，図 10.5(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，

$$\begin{pmatrix} b_1(k) \\ b_2(k) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_L & t_R \\ t_L & r_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(k) \\ a_2(k) \end{pmatrix} \quad (10.16)$$

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

$$T_{L,R} = |t_{L,r}|^2 = 1 - R_{L,R} = 1 - |r_{L,R}|^2 \quad (10.17)$$

である．

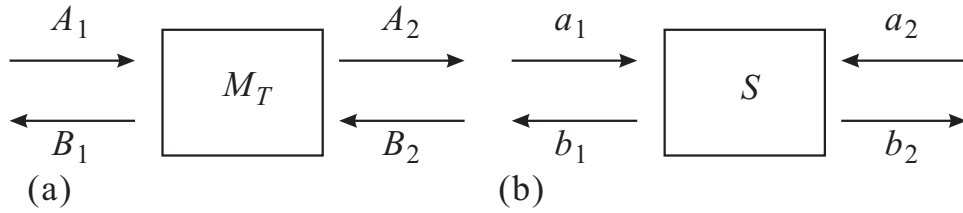


図 10.5 (a) T-行列 M_T の概念図 . (b) S-行列 S の概念図

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 (10.16) 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とき，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 (10.16) の入出力のベクトルで $a_i(k)$ 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

$$a_i(k) = \sqrt{v_{Fi}} \psi_{ai}(k_F) \quad (10.18)$$

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り，(10.18) を複素確率密度流と呼ぶことにしよう．

以上，問題に応じて，T 行列と S 行列を適当に使い分けて計算するのが便利である．

参考文献

- [1] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [2] S. Datta, “Electron Transport in Mesoscopic Systems” (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [3] 勝本信吾 「メソスコピック系」 (朝倉書店, 2002)

付録 K：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とき，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

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

と，一部の項が欠けた形で与えられたとする．今， ψ 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 ϕ 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．(K.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 (満足な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

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j}^{d_A, d_B} c_{ij} |\eta_i\rangle |\xi_j\rangle \quad (\text{K.2})$$

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

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

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

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

と書くことができる . この時 , ρ_A あるいは ρ_B に対し ,

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

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

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

について , シュミット分解して密度行列を求めると

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

となる .

本文の 2重スリットの例では

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

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 .