

講義ノート「低温物理学」 No.8

2009.5.28

物性研究所 勝本信吾

4.4.3 近藤効果

不純物アンダーソンモデルで、電子がドット内に1個だけいる状態 ($n = 1$) が基底状態になっている状態を考える。この時、ドットはスピン $1/2$ を持ち、一種の磁性不純物と捉えることができる。電子1個を外部からドットに付け加える際に必要な余分なエネルギーを ΔE^+ 、取り除く方を ΔE^- とする。

$$\Delta E^+ = \mu_2 - \mu = \epsilon_0 + U - \mu, \quad \Delta E^- = \mu - \mu_1 = \mu - \epsilon_0 \quad (145)$$

である。これらのエネルギー差から、不確定性関係から許される時間 $\hbar/\Delta E^\pm$ 程度は、このような励起状態が存在可能であり、これを中間状態とする H_T の2次過程によるトンネルは可能である。その振幅は

$$\frac{-\gamma_L^* \gamma_R}{\Delta E^-}, \quad \frac{\gamma_L^* \gamma_R}{\Delta E^+} \quad (146)$$

となる。このような高次のトンネル過程を同時トンネル (co-tunneling) 現象と呼ぶ。近藤効果は、この同時トンネルによるトンネル確率振幅が異常増大する現象と捉えることもできる。

近藤効果は実験でまず見出され、「謎」とされた時期を経て近藤淳により理論的説明が与えられたが、この「理論的説明」はむしろ近藤問題という理論的な大問題を提示することになった。この近藤問題に取り組む過程において繰り込み群、スケージングの考え方が大発展し、これをクォークの問題に応用することで量子色力学が誕生したのである。近藤問題自身は、熱平衡な場合にはベーテ仮説 (Bethe ansatz) による厳密解が見出され、一応の解決がついたものの、非平衡な場合や $SU(2)$ 以外の場合など更に様々な問題が生まれ発展を続けている。ここでは、最も素朴な近藤の導出をほぼ追うことで、この魅力的な問題への導入としたい。少しでも詳細を追う時間的余裕は残念ながらない。

まず、ハミルトニアン (141) に対して、次のユニタリー変換を考える。

$$\begin{cases} c_{k\sigma} = (\gamma_L^* c_{L,k\sigma} + \gamma_R^* c_{R,k\sigma})/\gamma \\ \bar{c}_{k\sigma} = (-\gamma_R c_{L,k\sigma} + \gamma_L c_{R,k\sigma})/\gamma \end{cases}, \quad \gamma^2 \equiv \gamma_L^2 + \gamma_R^2 \quad (147)$$

この時、トンネルハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_T &= \sum_{k,\sigma} [(\gamma_L c_{L,k\sigma}^\dagger + \gamma_R c_{R,k\sigma}^\dagger) d_\sigma + \text{h.c.}] \\ &= \sum_{k,\sigma} [\gamma c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{h.c.}] \end{aligned} \quad (148)$$

となり、 $\bar{c}_{k\sigma}$ はドットとの結合に関係しないので無視することができる。結局この変換をすることで、2つの電極を考え、左右電極からの電子のトンネルを独立に考えていたのを、1つの演算子にまとめてしまい、「フェルミ面を持つ系とドットとの電子のやりとり」という描像に繰り

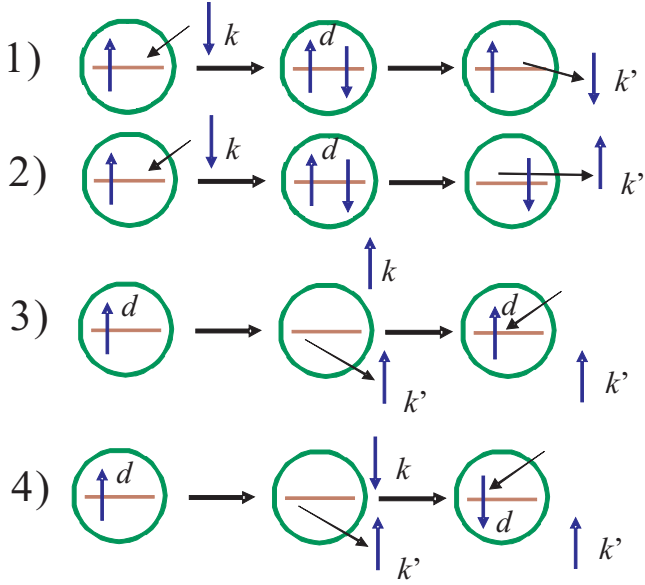


図 1: 初期状態としてドット中に上向きスピン電子がいた場合に考え得る 2 次のトンネルプロセス. これら 1)~4) は式 (151), (152) の 1)~4) に相当する.

込んだことになる. 左右リードを持つ量子ドットと, 金属中の磁性不純物というかなり大きく異なる系であったが, この変換により少なくとも形式的には同じになったことになる¹.

書き換えた不純物 Anderson 模型をもう一度書き下すと

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{k\sigma} (\gamma c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{h.c.}) + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} \quad (149)$$

である. 基底状態でドット中に電子が 1 個だけ存在する条件は

$$\epsilon_d < E_F < \epsilon_d + U \quad (150)$$

である. この条件下で, 電極の伝導電子 (s 電子) とドットの電子 (d 電子) との相互作用項 (V_{kd} の入った第 3 項) を摂動として取り扱おう. 1 次摂動はドットの電子数を変えてしまうために存在せず, 2 次摂動, すなわち co-tunneling 過程を考える.

ドットの電子がスピン \uparrow を持っている状態 (ψ_{\uparrow} と書く) に対する摂動過程は, 次の 4 つが考えられる (Pauli 原理により最初の電子が出て行かない限り, \downarrow 電子しかドットに入れぬ).

- 1) $k \downarrow \rightarrow d \downarrow \rightarrow k' \downarrow$
- 2) $k \downarrow \rightarrow d \downarrow, d \uparrow \rightarrow k' \uparrow$ (下向きスピン電子がドットに飛び込み, 上向きスピン電子が飛び出す)
- 3) $d \uparrow \rightarrow k' \uparrow, k \uparrow \rightarrow d \uparrow$ (上向きスピン電子が飛び出し, 上向きスピン電子が飛び込む)
- 4) $d \uparrow \rightarrow k' \uparrow, k \downarrow \rightarrow d \downarrow$ (上向きスピン電子が飛び出し, 下向きスピン電子が飛び込む)

それぞれの過程に対応する有効ハミルトニアンは, 2 次摂動で次のようになる

$$1) \rightarrow -\frac{\gamma^2}{\Delta E^+} c_{k'\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} d_{\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}, \quad 2) \rightarrow -\frac{\gamma^2}{\Delta E^+} c_{k'\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}, \quad (151)$$

$$3) \rightarrow \frac{\gamma^2}{\Delta E^-} d_{\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{k'\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}, \quad 4) \rightarrow \frac{\gamma^2}{\Delta E^-} d_{\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} c_{k'\uparrow}^\dagger d_{\uparrow}. \quad (152)$$

¹ただし, 物理的な意味はかなり違っているところがある. 金属中不純物の場合, $c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ は不純物散乱を表しているが, 量子ドットの場合は, 同時トンネリングを介した透過および反射を表している. なお, 不純物の場合は k が 3 次元というの大きな違いであるが, これについては, 散乱波を部分波展開することで 1 次元の問題に帰着できる (ペーテ仮説による厳密解の求解にはこれを用いる) ので, 数学的等価性には影響しない.

同様に ψ_{\downarrow} に対して4つの摂動過程が存在し、これらの有効ハミルトニアンは上で $\uparrow\downarrow \rightarrow \downarrow\uparrow$ とすることで得られる。これらを足しあげ、次のように表す。

$$\begin{aligned} & \sum_{k\sigma} \frac{\gamma^2}{\Delta E^-} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \sum_{kk'\sigma} \frac{\gamma^2}{\Delta E^+} c_{k'\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \\ & + \sum_{kk'} \gamma^2 \left(\frac{1}{\Delta E^+} + \frac{1}{\Delta E^-} \right) (c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}). \end{aligned} \quad (153)$$

ここで、第1項は、過程3)で $k = k'$ の場合である。 k はフェルミ球の外側にあるので、十分低温でフェルミ縮退しているとし、 $c_k c_k^{\dagger} = 1$ 、 $c_k^{\dagger} c_k = 0$ とした。第2項は過程1)である。 $d_{\downarrow} \psi_{\uparrow} = 0$ より、 $d_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} = 1$ 、 $d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} = 0$ を用いた。過程3)の残りとして2),4)が第3項である。ここで、

$$c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} = \frac{1}{2} (c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}) (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}) + \frac{1}{2} (c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} + c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}) (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow})$$

と変形してみる。すると、ドットのスピン演算子を \hat{S} と書いて

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}), \quad \hat{S}_+ = d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}, \quad \hat{S}_- = d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}$$

であるから、(153)の第2項、第3項の和は次の2つ (H_d, H_{sd}) の和に書き換えられる。

$$H_d = \sum_{kk'\sigma} \gamma^2 \left[\frac{1}{\Delta E_k^+} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\Delta E_{k'}^+} + \frac{1}{\Delta E_{k'}^-} \right) \right] c_{k'\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}, \quad (154)$$

$$H_{sd} = \sum_{kk'} \gamma^2 \left[\frac{1}{\Delta E_k^+} + \frac{1}{\Delta E_{k'}^-} \right] \left[\hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}) \right] \quad (155)$$

上で、係数部分の k 依存性を無視し、

$$J = \gamma^2 \left(\frac{1}{\Delta E^+} + \frac{1}{\Delta E^-} \right) \quad (156)$$

とおくと、

$$H_d = \sum_{kk'} \left(-\frac{J}{2} \right) c_{k'\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \quad (157)$$

は通常のポテンシャル散乱であり、スピンの依存しない形になる。一方、

$$\begin{aligned} H_{sd} &= J \sum_{kk'} \left[\hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}) \right] \\ &= J \sum_j \left[(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) (\hat{s}_{xj} - i\hat{s}_{yj}) + (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) (\hat{s}_{xj} + i\hat{s}_{yj}) + 2\hat{s}_{zj} \hat{S}_z \right] \\ &= 2J \sum_j \hat{s}_j \cdot \hat{S} \end{aligned} \quad (158)$$

は、伝導電子スピン s_j とドットスピンとの交換相互作用を表している。これはしばしば sd ハミルトニアンと呼ばれるもので、本来は希薄磁性不純物系での電子スピン (s)-局在スピン (多

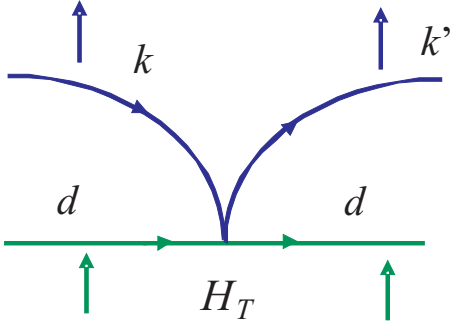


図 2: H_T の 1 次で電子がドットに散乱を受け, $k \rightarrow k'$ と変化する過程をダイアグラムとして描いたもの. 時間軸は左から右へと流れている. d はドットを表し, 上下を向いた矢印はスピンを示している.

くは d 電子であるため, d の相互作用を表すものであるが, (147) の変換により, 量子ドット-リード系も同じハミルトニアンで近似できることがわかった.

透過を表すハミルトニアン H_T としては通常のポテンシャル散乱 H_d は考えないこととし, H_{sd} をとる. すると, 上に示したように, 電極電子部分を加えた有効ハミルトニアン

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \sum_{kk'} \left[\hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right]. \quad (159)$$

が得られる (Schrieffer-Wolff 変換).

近藤が行った計算は, 有効ハミルトニアン (159) に対して Born 近似の 2 次までを計算する, というものである. すなわち, (159) の中の J の項を摂動として 2 次まで (γ については 4 次) 扱う. 左右の電極間の遷移を与える演算子 \hat{T} は, 次のように与えられる (以降は $H_T = H_{sd}$).

$$\hat{T} = H_T + H_T \frac{1}{\epsilon - H_0 + i\delta} H_T + \dots \quad (160)$$

この時, $L \rightarrow R$ のトンネル確率は

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = 2 \sum_{k,k'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle Rk' | \hat{T} | Lk \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_{Rk'} - \epsilon_{Lk}) f(\epsilon_{Lk} - \mu_L) [1 - f(\epsilon_{Rk'} - \mu_R)] \quad (161)$$

となる.

$|k \uparrow\rangle \rightarrow |k' \uparrow\rangle$ の散乱を考える. J の 1 次の摂動は図 2 で表され,

$$\langle d \uparrow; k' \uparrow | \hat{T}^{(1)} | d \uparrow; k \uparrow \rangle = J/2 \quad (162)$$

である. もちろん, H_T の過程にはトンネルが 2 回必要であるから, γ に関しては 2 次で (従って J は γ^2 に比例する), これは, (146) の同時トンネル過程に相当する.

J の 2 次 $\langle d \uparrow; k' \uparrow | \hat{T}^{(2)} | d \uparrow; k \uparrow \rangle$ には 3 種類のプロセスが存在する (図 3, 図 4). 最初の 2 つはスピン反転を伴わないもので, 中間の伝播プロセスとして電子によるもの (図 3(a)) と電子ホー

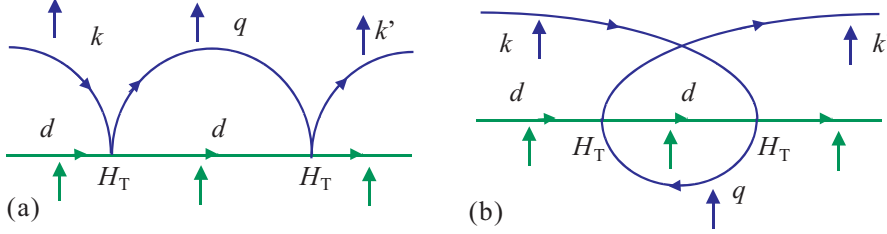


図 3: H_T の 2 次のプロセスの中でスピン反転散乱を伴わない過程 . (a) 中間状態を電極中の電子励起として伝播する過程 . (b) 中間状態として電子-ホール対が生成し伝播する . ホールは , 電極中の電子と 2 番目の散乱で対消滅する .

ル対によるもの (図 3(b)) によってこの 2 種類に分かれている² . この 2 つの寄与は

$$\begin{aligned}
& \sum_q \left(\frac{J}{2}\right)^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_q + i\delta} [1 - f(\epsilon_q)] + \sum_q \left(\frac{J}{2}\right)^2 \frac{-1}{\epsilon - (2\epsilon - \epsilon_q) + i\delta} f(\epsilon_q) \\
&= \sum_q \left(\frac{J}{2}\right)^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_q + i\delta} \\
&= \left(\frac{J}{2}\right)^2 \int_{-D}^D d\epsilon' \nu \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + i\delta} \quad \nu : \text{Density of states} \\
&= \left(\frac{J}{2}\right)^2 \nu \left[\ln \left| \frac{D + \epsilon}{D - \epsilon} \right| - i\pi \right]. \tag{163}
\end{aligned}$$

これは , 電子正孔のバランスによって結果に発散などの異常は生じていない . ここで , 金属中の電子状態については , エネルギー軸上で $[-D, D]$ に一様な状態密度 ν のバンドがある , という極めて粗い , というより抽象的な近似を行っているが , 現象の本質を見るためにはこのようなモデルが都合がよい .

図 4 に示した過程では途中でスピン反転散乱が生じているが , (a) では , 角運動量の保存のためにはドットスピンの $3/2$ にならなくてはいけなくなり , この過程は存在しないことがわかる . (b) は電子-正孔対で中間状態を伝播しており , この寄与は

$$\begin{aligned}
& \sum_q J^2 \frac{1}{\epsilon - \epsilon_q + i\delta} f(\epsilon_q) = J^2 \nu \int_{-D}^D \frac{1}{\epsilon - \epsilon' + i\delta} f(\epsilon') d\epsilon \\
& \approx \begin{cases} -J^2 \nu \ln |\epsilon|/D & |\epsilon| \gg k_B T \\ -J^2 \nu \ln k_B T/D & |\epsilon| \ll k_B T \end{cases} \tag{164}
\end{aligned}$$

この項が近藤が発見した異常項であり , 温度低下あるいは小さな ϵ に対して対数発散する . この異常によって生じる様々な効果を近藤効果と呼ぶ .

まず , この項のよって来たところを考えておこう . スピン反転散乱がない場合に異常項が出なかった理由は , 電子と正孔との対称性によって異常項が打ち消し合ったためであった . す

²ここで「ホール」(正孔)と呼ぶものは , フェルミの海から電子を 1 個引き抜いてできた孔状態である . 半導体物理においてしばしば呼称される , 伝導帯から電子を引き抜いて得られる正孔状態とは , 一般に有効質量の符号など大きく異なるものである .

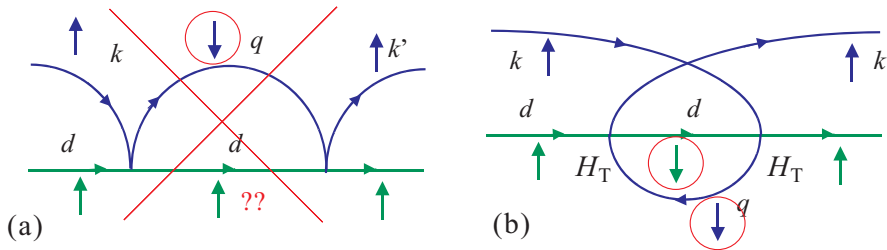


図 4: H_T の 2 次のプロセスの中でスピン反転散乱を伴う過程 . (a) 中間状態を電極中の電子励起として伝播する過程であるが , 角運動量保存のためにはドットスピンの $3/2$ にならねばならず , この過程は存在しない . (b) 中間状態として電子-ホール対が生成し伝播する .

なわち , 電子 , 正孔それぞれに限定すれば , 異常は発生しており , その原因はフェルミ面という巨大な非対称性の存在である . 絶対零度においては , 電子にとってはフェルミ球の内部は入り込めない , 事実上全く状態のない領域であるのに対して , フェルミ面直上はほとんど無限に状態が縮退している . スピン反転を含まない過程においてこの非対称性を見事に打ち消してしまうのが , 電子-正孔対称性である . これに対して , スピン反転を含む過程においては , スピン角運動量が絡むために電子による中間状態の伝播過程が消えてしまい³ , フェルミ面での非対称性が結果に反映された結果 , 異常が現れる .

摂動の結果が , 異常 (発散) を与えた , ということは , 発散条件に近い状況では摂動による取り扱いは破綻していることを示している . そこで , この問題を取り扱うためには発散を取り扱うための様々な手法が必要となる . むしろ , この近藤問題を取り扱うために繰り込み群を始め , 様々な手法が開発されてきたと言っても良い . ここではもちろん , これらの詳細には立ち入らない . その後の長年の研究で明らかになったことについて低温の極限についてごく簡単に述べておく .

sd ハミルトニアン (158) において , ドットスピンと伝導電子スピンとの間に反強磁性的な相互作用が働いたことを思いだそう . その原因にはスピン反転の項が影響している . すなわち , ドットスピンは co -tunneling を介したいわゆる交換相互作用によって , 反平行なスピンを持つ電子を引きつけ , 平行なスピンを持つ電子を遠ざける . これは , 遠方から見ると , 伝導電子のスピン分極の雲がドット (不純物) スピンに纏い付くように見えるであろう . 近藤効果は , 低温でその効果が異常に強くなることを示している . このようにしてできあがるスピン分極の雲を近藤雲 (Kondo cloud) と呼ぶ . ただし一方 , ドット周辺のスピン分極の合計がドットスピンをちょうど打ち消す程度になれば , 遠方からはドットスピンは見えなくなるため , それ以上ドットスピン周辺でスピン分極が生じることはなくなる . これをユニタリ極限と呼ぶ .

この現象は , 多体の共鳴効果という捉え方も可能である . 一体の共鳴効果 (系のポテンシャル形状による共鳴効果) の代表として , 2 重障壁構造の共鳴トンネル現象を思いだそう . 2 重障壁構造においては , 障壁高さがいかに高く , トンネル確率がいかに小さくても , 入射波のエネルギーが共鳴エネルギーの所では , 2 つの障壁でコヒーレントな反射と透過によって , 反射

³これは , 数式的には \hat{S}_+ と \hat{S}_- の非可換性 (交換関係から \hat{S}_z が出てくる) から生じており , このような量子効果が生じている , という言い方もできる .

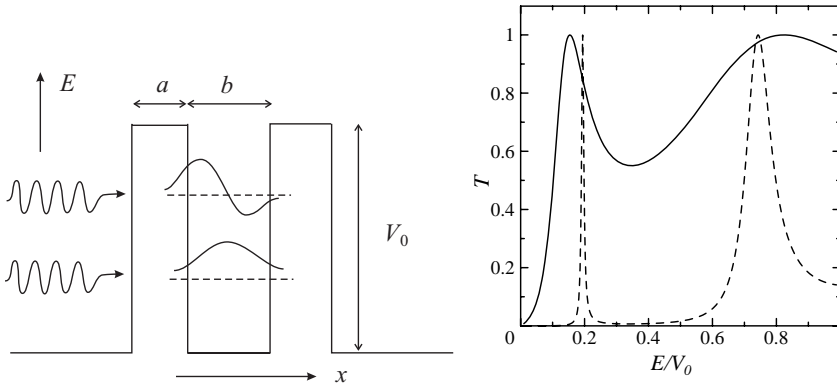


図 5: 左図: 2重障壁ポテンシャルの模式図。縦軸はエネルギー, 横軸は空間座標。破線位置に準束縛状態ができ, 共鳴トンネル位置となる。入射波の波長は本来イラストよりずっと長い。右は透過率の計算例。 $k_0 \equiv \sqrt{2mV_0/\hbar}$ として, $k_0 a$ が 0.5(実線), 2.0(破線) の場合, $k_0 b$ を 5.0 に固定。

波は無数個の打ち消し合う波の重ね合わせになり, 透過波は無数個の強め合う波の重ね合わせになる結果, 最終的な透過率は 1 となる。この「共鳴エネルギー位置」は, 両側の障壁が無数に厚いとした場合(この場合, 障壁に挟まれた領域は「量子井戸」となる)の束縛エネルギー位置付近である。障壁が有限の場合に戻ると電子の障壁間での平均滞在時間が異常増大する「準束縛状態」のエネルギーである。この場合は, 準束縛状態に入ってもいずれは外界に漏れ出ていくため, 障壁外側のこのエネルギーの自由電子とは共鳴状態にある。障壁外側のフェルミ面がこの状態に当たると, 伝導を担うフェルミ面の電子が透過率 1 で 2 重障壁構造を透過するため, 電気伝導度がピーク構造を示す。読者に思い出してもらうため, 図 5 にポテンシャル模式図と透過率の計算例を示した。

近藤効果もこれに多くの共通点を有していることがわかるであろう。一体共鳴効果が無限回の反射を基礎にしていたのに対して, 近藤効果の場合は, フェルミ面上の無限のエネルギー縮退が類似現象を引き起こしている。一体共鳴の場合, 軌道効果であったから準束縛状態により存在確率の偏りが生じたが, 近藤効果の場合は, スピン間に働く力であるため, 電子密度に偏りは生ぜず, スピン偏極の局在状態(近藤雲)が生じる。近藤雲の場合, 一体共鳴と決定的に違うのは, フェルミ面の異常によって生じている状態であるため, 常に共鳴位置がフェルミ準位にあることである。

準束縛状態には電子が有限時間しか止まらないため, 平均滞在時間を τ_a として, 寿命幅 $\hbar/\tau_a (= \hbar\Gamma, \Gamma$ はトンネル頻度) を持つ。近藤状態には共鳴幅はあるのか? またそれはどの程度であろうか。今, 高温から次第に温度を下げていくと, 温度によるエネルギー幅が共鳴幅より非常に大きい間は共鳴ラインの寄与は温度にはあまり依存しないであろう。逆に温度幅が共鳴幅より十分狭くなると, この場合もまた温度依存性が失われる。近藤効果の場合の共鳴幅を表すエネルギースケールは, 温度換算で近藤温度と称され, 良く T_K と記される。近藤温度をきちんと見積もるには (164) の摂動では不十分で, スケーリングなど何らかの形で高次の寄与を取り込まなければならない。が, 高温側で, (164) の温度変化のある項が摂動を考えない場合の J とほぼ同程度になる温度がそうであろう, とすると,

$$-J^2\nu \ln k_B T_K / D \sim J$$

より,

$$k_B T_K \sim D e^{-J\nu}$$

と見積もることができる。上の粗い見積りを見ると, 反強磁性結合の元来の強さ J が大きくなると, 指数関数的に T_K は下がる。これは共鳴以前の束縛エネルギー, 2 重障壁構造で言えば,

障壁高さが高いことを示しており，トンネル確率の減少によって寿命幅が狭くなることと対応している．状態密度 ν についても同じである．これに対して，バンド幅 D が大きくなると， T_K は高くなる，すなわち，共鳴幅は広がる．実は，今の簡単なモデルでは， J と D は独立ではないがそれは別として， D によって共鳴幅が広がってしまうのは，非対称性の強いフェルミ面付近の過程以外に，バンドの深い内部の q を用いた過程の割合も増えてくるためと解釈することができる．

4.4.4 量子ドット特有の近藤効果

量子ドットの場合， H_T が表す過程は，物理的にはドットを通して電子が透過することを表している．従って， H_T の効果が増大することは伝導度が増大することを表す．ここで，2重障壁とのアナロジーを思い出すと，近藤多体共鳴によってドットを通した伝導は異常増大し，クーロンブロッケードによって本来の伝導度が非常に小さくなっている場合でも最終的な透過率は1(ユニタリ)になる．この場合の伝導度は，次節の Landauer の公式の所で述べるように $2e^2/h$ とユニバーサルな値になる．

近藤効果に非常に特徴的なのは，それがフェルミ面で生じているため，常にフェルミ面と共鳴状態にあるということである．従って，最も単純には電子数奇数のクーロンの谷においては伝導度は近藤効果のユニタリ極限により $2e^2/h$ となり，偶数の谷ではクーロンブロッケードにより0となる．図6に，以上の考察から考えられる伝導度の振舞いと，実際に量子ドットで測定された近藤効果の様子を示した．

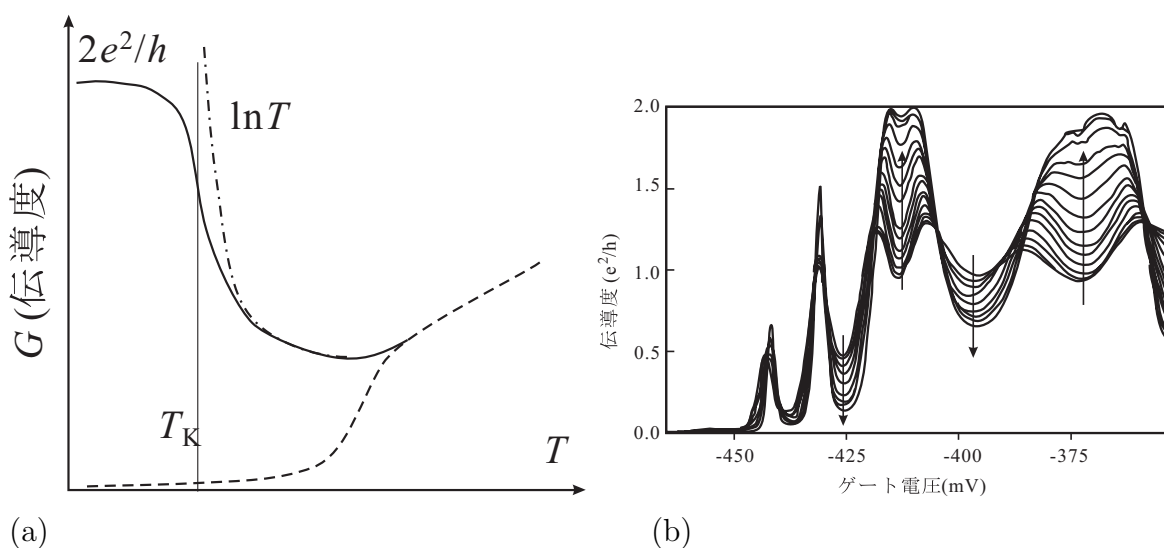


図 6: (a) 量子ドットで近藤効果が生じたときのドットを通した電気伝導度を温度の関数として模式的に描いたもの．実線がドットの電子数が奇数の場合で近藤効果が生じて温度低下と共に伝導度が $\ln T$ に比例して上昇し， T_K より下がると飽和し，ユニタリ極限 ($2e^2/h$) に達する．電子数が偶数の場合は伝導度はクーロンブロッケードによりゼロとなる (破線)．(b) 量子ドットの実験に現れた近藤効果．矢印は温度低下を表し，電子数奇数の谷では低下と共に伝導度は増加，偶数の谷では逆が生じていることがわかる．

5 コヒーレントな電気伝導

我々は、試料に導線をつないで電気抵抗を測る。これは、系に様々な電磁氣的刺激（摂動）を与えて、その応答を見る行為の一種である。電気伝導現象は、この意味では電子回路を使用することにも似ている。そこで、この講義では、電気伝導を調べる系を量子回路 (quantum circuit) として捉えることを考える。これをどのようにモデル化するか、実験にそれがどのように反映するか、がこの講義の中心となる。

ただし、注意すべきことがひとつある。それは、量子デコヒーレンスが起るとそれ以上の量子力学的発展を追うことは無意味であるということである。量子デコヒーレンスを量子回路の考え方の中に現象論的に取り入れることはもちろん可能である。しかし、例えば量子計算機を実現しようとする技術開発においては、デコヒーレンスそのものに取り組みなければならない。

5.1 量子回路 (quantum circuit) として系を捉える

電気伝導は、最も一般的には図1のように試料に電流を流して、適当な2点での電圧降下を測ることによって測定する。

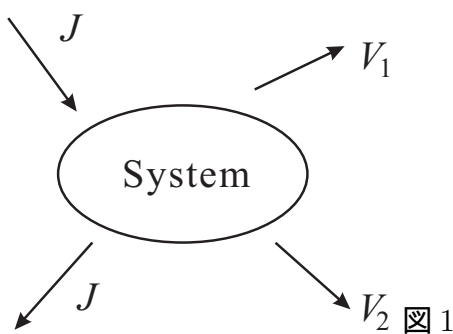


図1

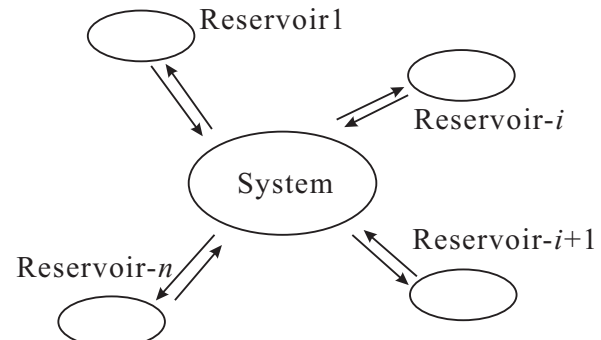


図2

この状況をやや一般化すること、特殊化することの両方を行う。系に図2のように複数の粒子溜め (particle reservoir) がつながっている、としよう。reservoir は一般に、極めて容量が大きく、常に熱平衡状態にあると考える。従って化学ポテンシャル μ が定義できる。これは、電子回路的には定電圧電源であることを意味する。その発生する接地電位からの電圧 (電位) は μ/e である。電源については後述。

結局、ある境界条件の下にある量子系を考えることになる。しかし、この境界条件が、

複数の reservoir を接続する

という少し特異なものであるため、様々な独特の工夫を必要とする。

これに対し、例えば、微弱な外場に対して、系の線形応答がどのようになるかを与えるのが、久保公式に代表される久保の線形応答理論である。

5.1.1 量子細線

電子回路は部品と配線からなる。もちろん、この2つの間に画然とした区別があるわけではない。量子回路で配線の基本となるのは量子細線 (その名も quantum wire) である。

量子細線：粒子 (本講義では主に電子) の運動の自由度で、空間3次元の内2次元を量子閉じ込めなどの何らかの方法によって無効化し、1次元のみ自由に動けるようにしたもの。

ex) ナノチューブ, 量子ポイントコンタクト (後述)

しかし, Coherent な伝導の特徴として, 乱雑な電子の運動を「Feynman 経路」と捉え, 「古典経路」を量子細線と考える考え方も存在する.

まずは, 量子細線を組み合わせた回路の取り扱いについて考える. 古典的には, Kirchhoff の法則にあたる. この段階でのキーは, 電子が量子力学的波動であること (準平衡状態では) 確率密度の保存から, 系全体でユニタリティーが保たれていることである.

要するに, 系を (一体の) Schrödinger 方程式に支配されるひとつの巨大かつ複雑なポテンシャル問題と考え, その散乱問題として問題を考えることになる. この点を常時念頭に置いておく必要がある.

5.1.2 電源をどう捉えるか: particle reservoir

量子細線の話なのになぜ電源が現れるのか: 電気伝導を起こしている状態は非平衡状態である. 量子細線を「どのように非平衡にするか」ということに電源が大きな役割を果たす.

前節でも考えたように, 「電源」の物理モデルとして, 「粒子溜め」を考える. これは

1. 十分大きく, ここで考えている電流では熱平衡を乱されない. すなわち化学ポテンシャルが定義できる.
2. 電流として流れ込んだ/引き抜かれた電子/ホールは即時に緩和する. これは, 電子が位相コヒーレンスを失う (量子デコヒーレンス) ことを意味する.
3. 電子溜めに到達した電子は反射されることなく溜め中に取り込まれる.

という仮定から構成される.

これからすぐに思いつくことは, デコヒーレンスを現象論的に取り込むには, このような「粒子溜め」を試料にたくさんつけてやればよろしいということで, 実際一部の理論計算ではこの手法を用いている.

すでに述べたが, 化学ポテンシャルが定義できるということは, 定電位 (定電圧) 電源として働くということである. これは, たとえば, 無限の電気容量を持つコンデンサとしてモデル化できる.

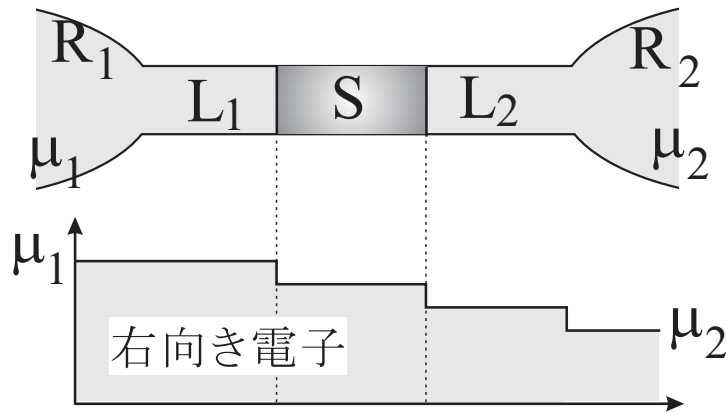
一方電源の中には, 導線に流れる電流を一定にするようにフィードバックをかけたもの, すなわち定電流電源も存在する. このような電源のひとつのモデルとして次のようなもの考えることができる.

理想導線に対して化学ポテンシャルの差 $\Delta\mu$ だけある reservoir を考える. 「理想導線」および「非平衡にあるはずの導線の化学ポテンシャル」の意味は後述. 導線と reservoir との間のコンダクタンスを g と置く. 電流は

$$J = g\Delta\mu/e \quad (165)$$

となる. そこで, $g\Delta\mu$ を一定にしながら, $g \rightarrow 0$, $\Delta\mu \rightarrow \infty$ の極限をとると, $\Delta\mu$ が有限に変動しても J は変化しない.

図 7: ランダウアー公式を導く際の量子細線の電気伝導のモデル



5.2 Landauer の公式

弾道的な伝導チャンネル(サブバンド)が一つだけの量子細線を考え, スピンや谷による縮退を考えない(スピンなし1次元フェルミ系を考える)ことにする. また, 電子間相互作用, 温度の影響もとりあえず考えない($T = 0$). 量子細線の伝導を考えるモデルとして図7のようなもの考える. すなわち, 試料の左右に電子溜め(reservoir) $\text{Res}_1, \text{Res}_2$ を置く. これらの化学ポテンシャルはそれぞれ μ_1, μ_2 で, $\mu_1 > \mu_2$ とする. これより, Res_1 と Res_2 との間には, $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$ だけの電圧がかかっていることになる. また, 試料と電子溜めとの間には「理想(完全)導線」(perfect lead) L_1, L_2 が入っているとする.

理想導線とは, 電子の散乱がなく, また次の仮定を常に満たしているような導体と定義する.

1. 2つのリードと試料の中では, μ_2 以下の状態はすべて占有されている.
2. L_1 の中では更に, 速度が右向きでエネルギー μ_1 以下の状態はすべて占有されている.
3. は化学ポテンシャルが定義できることから, こう仮定しないと議論が成立しない. 速度右向きの電子は一定の割合で導線から出て行くので, 2. は Res_1 から L_1 へ電子がこれに対して十分たっぷり供給されていることを要求していることになる. 1. は μ_2 以下のエネルギーの電子は, 左右に同じだけ運動しているので, 伝導に寄与しないことを規定している.

L_1, L_2 と試料の量子細線の間には, 一般には電子波の反射があるが, まずはこれも全くない場合を考えよう. すると, 結局導線と試料細線の区別はなくなり, 仮定 1., 2. により, 細線中では右向きの電子は μ_1 以下の状態を占め, 左向きの電子は μ_2 以下の状態を占めている. 細線方向の運動の分散関係を $E(k)$ と書く. 波数 k の状態が運ぶ電流 $J(k)$ は

$$J(k) = \frac{e}{L} v_g = \frac{e}{\hbar L} \frac{dE(k)}{dk} \quad (166)$$

となる. ただし, L は, 波動関数を1次元方向で規格化するときを使用した規格化の長さである. $E(k)$ が μ_2 と μ_1 との間にある状態が電流を運ぶことができるので, 全電流 J は

$$J = \int_{k_2}^{k_1} J(k) L \frac{dk}{2\pi} = \frac{e}{h} \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE = \frac{e}{h} (\mu_1 - \mu_2) = \frac{e^2}{h} V \quad (167)$$

ここで、 $k_i (i = 1, 2)$ は $E(k_i) = \mu_i$ で定義される。量子細線の伝導度 (コンダクタンス, conductance) G は

$$G = \frac{e^2}{h} \equiv G_q \equiv R_q^{-1} \quad (168)$$

となる。(168) が最も簡単な無反射単チャンネルの場合の 2 端子ランダウアー公式である。導出、結果とも、以上のように極めて簡単なものである。 R_q は $25.8\text{k}\Omega$ 程度で、量子化抵抗 (quantum resistance), G_q は $3.87 \times 10^{-5}\text{S}$ 程度で、量子化コンダクタンス (quantum conductance) と呼ばれる。

量子化コンダクタンスの意味

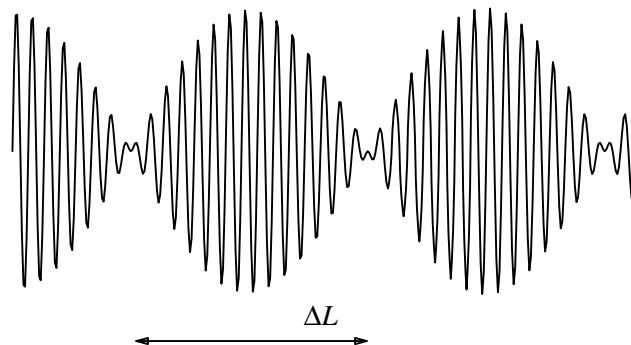
良く知られているように、磁気単極 (magnetic monopole) があると、マクスウェルの方程式を完全に対称化することができる。ディラックの解説にもあるように、その時の単位磁荷は量子論の要請から量子磁束 h/e となるべきである (量子磁束の意味は後述)。コンダクタンスは試料を流れる電流と試料に発生する電圧の比であるが、電流方向に流れるのが電荷、電圧方向に流れるのが磁荷である。したがってコンダクタンス量子化の単位はその比であるべきで、それはまさしく $e/(h/e) = e^2/h$ になっていることになる。

Landauer 公式を簡単に導く

上記の導出は簡潔ではあるが、結果と関係のない規格化の長さ L が出てくるのがうさんくさいと感じる人がいるかもしれない。これは結局、 k 空間での波動関数を取り扱う場合に常に出てくる問題であり、結局実空間 L の中に波束を作って k 空間での状態を離散化し、Pauli 原理により「1 状態 1 個」の詰め込みを行った結果である。ある一定のエネルギー差を使って、1 次元の Fermi 粒子系に一定時間内に詰め込める粒子数には Pauli 原理により上限があり、 k 空間で状態の密度を増やして詰め込もうとすると、不確定性によって実空間密度が減って、この上限を超えることはできない。従って、 L には関係のない結果が出る。

次のように考えると L を出さずに導けるが、結局「すべての状態をフェルミ粒子が満たしている (電極から電子がたっぷり供給されている)」と仮定している点で同じことをしており、 k 空間でしたことを、実空間で行ったに過ぎない。

図 8: 量子細線中に波束列を作ったと考える



μ_2 から μ_1 まで eV の幅のエネルギー状態を使用して電子を運ぶことになる。この時、群速度を考えたときのように、 eV の幅のエネルギーの電子が「ビートを打つ」と考えてみる。すると、ビートの周波数を f として $hf = eV$ である。このビートひとつが1個の波束状態を表していると考え、電子はフェルミオンで1個の電子が1個の波束状態を占め、電極から電子がたっぷり供給されているため、すべての波束状態はそれぞれ電子1個で埋まっているとすると、電流は $ef = e^2V/h$ であるから、コンダクタンスは $e^2/h = G_q$ となる。

「簡潔な導き」から派生すること：ショットノイズの問題

実際の量子細線の伝導では、上記のように波束列になって流れているわけではなく、電子相関を考えなければ電子密度は一様であろう。実際には電子間反発、電子相関があるので問題は面倒である。

さて、「波束状態」がきちんと電子で占有されていない場合、それはショットノイズとして現れる。透過率を T 、入射電子の占有数を $\langle n_{in} \rangle = 1$ とすると、透過及び反射の占有数は $\langle n_T \rangle = T$ および $\langle n_R \rangle = R = 1 - T$ となる。占有数のゆらぎは

$$\Delta n_T = -\Delta n_R \quad (169)$$

と考えると、 $\langle (\Delta n_T + \Delta n_R)^2 \rangle = 0$ より、

$$\langle (\Delta n_T)^2 \rangle = \langle (\Delta n_R)^2 \rangle = -\langle \Delta n_T \Delta n_R \rangle \quad (170)$$

だが、これは $T(1-T)$ になると計算されている。すなわち $T = 1$ でショットノイズは零になってしまう。これは、beam のフェルミ縮重度が1の状態、上で考えた「等間隔運動」の場合に相当している。

このように電子がフェルミ統計に従うことにより、古典的なショットノイズより量子論的に抑えられたショットノイズを量子ショットノイズと呼ぶ。

5.2.1 量子ポイントコンタクトのモデル

量子ポイントコンタクト実験の紹介

量子ポイントコンタクトを単純化したモデルを考える。もっとも簡単な Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi = E\psi \quad (171)$$

を境界条件

$$\psi \left(x, y = \pm \frac{W(x)}{2} \right) = 0 \quad (172)$$

の下で解くことを考える。これは、 y 方向のポテンシャルが鋭くて無限大の高さを持っていると考えていることになる。

この問題は特殊な $W(x)$ の場合を除いて、完全に解くことはできないが、断熱近似を使って評価できる。すなわち、壁の間隔の変化は緩やかであるとすると、 y 方向の運動エネルギーは

$$E_y = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{W(x)} \right)^2 \quad (n : \text{integer}) \quad (173)$$

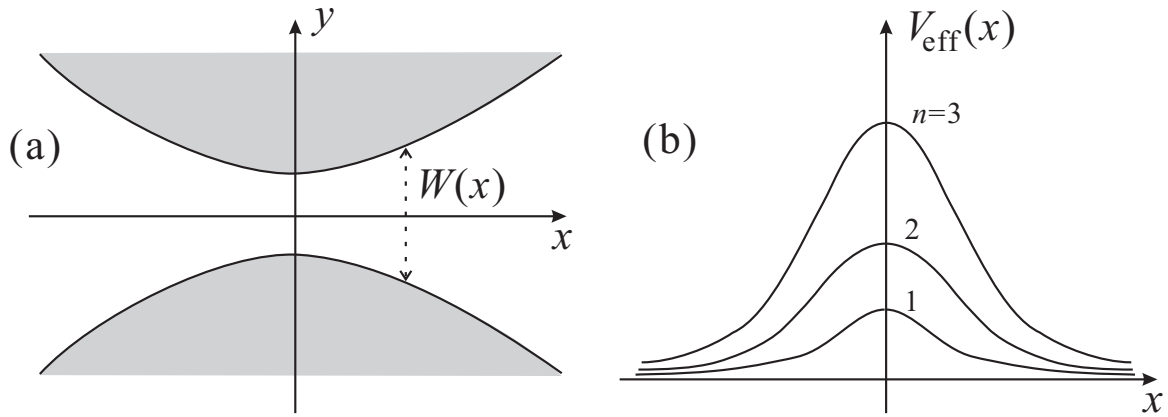


図 9: 2次元電子系に横方向の閉じ込めポテンシャルを導入することで作成した量子ポイントコンタクトのモデル。(a) 閉じ込めポテンシャルの横方向形状の例。x 軸をはさんで対称的であると仮定すると、閉じ込め境界は、 $y = \pm W(x)/2$ で表される。(b) (a) の閉じ込めが境界で急峻であると仮定した場合の x 方向の有効ポテンシャル $(\hbar^2/2m)(n\pi/W(x))^2$ を、 $n = 3$ まで描いたもの。

で量子化されているから、x 方向の運動に対する有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{n\pi}{W(x)} \right)^2 \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{eff}}(n, x) \quad (174)$$

となって、図 9(b) のような有効ポテンシャル中の 1 次元的な運動を考えることになる。

E_F が有効ポテンシャルの頂上よりも大きい n に対しては、これまでの議論から伝導度は G_q で与えられる。一方、 V_{eff} の頂上が E_F を超えてしまう場合、トンネル伝導となり、トランジェントな領域を除いて伝導度は小さい。ゲート電圧により $W(x)$ は変化し、このために V_{eff} の最大値が E_F を超えない n の数も変化するため、伝導度が段階的に変化する。実験から言えること: 1 次元量子細線中に複数伝導チャンネルがオーバーラップして存在している場合、その伝導度を足し上げることで全体の伝導度が得られる (線形性)。

参考文献

- [1] J. Kondo, Solid State Physics **23**, 183 (1989) (eds. Seitz and Tunrball).
- [2] A. C. Hewson, "The Kondo problems and to heavy Fermions" (Cambridge University Press, 1993).
- [3] 芳田 奎, 「磁性」(岩波書店, 1991).
- [4] 近藤 淳, 「金属電子論」(裳華房, 1983).