

「磁性理論入門」磁性と伝導理論

2. 電気伝導の微視的理論

Magnetism and Transport

2. Microscopic Theories of Transport

井上順一郎 名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻
J. Inoue, Department of Applied Physics, Nagoya University

Key words: Kubo formula, Landauer formula, Green's function, conductance quantization, layered structure

1. はじめに

前回の講座¹⁾で述べたように、金属磁性体の残留抵抗を決めているのは、スピンの依存する散乱ポテンシャルであった。このような散乱ポテンシャルと、電子がフェルミ粒子であることを自動的に取り入れて電気抵抗を計算する手法はないのだろうか。そのような理論として、線形応答理論に基づく久保公式^{2)~4)}がある。

ある系の性質を調べるには、その系に外部から刺激を与え、その応答を測定する必要がある。例えば、外部刺激として磁場をとり、応答として磁化をとれば、その比例係数から物体の帯磁率が得られる。また、外部刺激を電場とし、応答を電流をとれば、その比例係数として電気伝導度が求まる。外部刺激に比例する応答がどのように決定されるかを明らかにしたのが線形応答理論である。線形応答理論では、系の応答は外部刺激に比例する量として得られる。したがって、その比例係数には外部刺激は含まれない。すなわち、比例係数は系の平衡状態の性質のみで決定されることになる。電気伝導について言えば、電気伝導度は系内の散乱機構や電子状態で決まることになる。

線形応答理論は、一般的表現が用いられているため、具体的計算をどのように行えば良いのか理解しにくい。ランダウアー⁵⁾は、久保公式が提唱されたのと同時期に、別のアプローチにより電気伝導に対する直感的な表式を提案した。この表式は系を電子が流れる場合、その透過率と電気伝導（コンダクタンス）を関係づけるものであり、系が微細な場合には取り扱いが簡単となる。したがって、いわゆるメゾスコピック系^{6), 7)}の問題に数多く適用されてきた。

外部刺激が大きくなると、系の応答は必ずしもそれに比例しない。すなわち非線形の応答となる。例えば、トンネル接合において、高電圧を印加すると、電流と電圧の関係には非線形性が現れる。トンネル接合における非線形応答領域のコンダクタンスの理論は、非平衡系のグリーン関数を用いて Caroli ら⁸⁾によって展開されている。非線形応答

の領域では、非弾性散乱も考慮せねばならないが、その取り扱いは現在においても十分とは言えない。

本講座では、線形応答、弾性散乱、および絶対0度の場合に限って、ランダウアー理論、久保公式の説明を行うことにしたい。これらの制限のもとで、Caroli らの得たトンネルコンダクタンスの線形極限の結果が、久保公式から導出できること、およびその結果からランダウアー理論が理解できることを示す。本講座の主目的は、久保公式が多層膜の電気伝導の計算にどのように適用されているのかを説明する点にある。説明を具体的にするために、膜面に平行な電流の場合と、垂直な電流の場合とを区別して取り扱うことにする。最後に、コンダクタンスの量子化が久保公式からも得られることを示しておくたい。

理論計算には、与えられたハミルトニアン固有値と固有関数が必要となる。しかしながら、実際の計算において固有関数を用いるのは不便であり、その代わりとしてグリーン関数が用いられている。さらに第二量子化を用いた表現となっている。グリーン関数については、なじみのない読者が多いかもしいない。物性理論では問題に応じてさまざまなグリーン関数^{9)~11)}が用いられる。以下では本章で必要となる、時間に依存しないグリーン関数について初歩的説明を加えることにした。グリーン関数の定義の部分だけをみて今回の講座の中心である第5節に進んでいたとしても結構であるし、なぜグリーン関数なるものが導入されるのかを学んでいただいても結構である。また、第2量子化については末尾に付録として簡単な説明を加えておいた。

2. ランドウアー公式

簡単のため Fig. 1 のように、サンプルにリード線が付けられている1次元系を考えよう。電気抵抗はサンプル領域で生じ、リード線での電気抵抗は無視できるほど小さいとする。電圧 V が印加されると、サンプル領域で eV の電圧降下が生じる。その結果、化学ポテンシャル μ_1 と $\mu_2 = \mu_1 - eV$ の間に存在する電子が伝導に寄与する。これらの電子の右方向への速度を $v(\epsilon)$ とし、スピン当たりの状態密

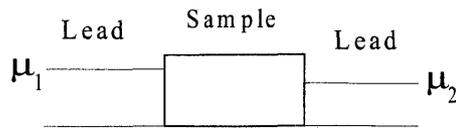


Fig. 1 Schematic figure for a one-dimensional system to which two leads are attached. μ_1 and μ_2 indicate the chemical potential.

度を $D(\epsilon)$ とすると、エネルギー ϵ をもつ電子は電流にスピン当たり $eD(\epsilon)v(\epsilon)$ だけの寄与をする。しかし、サンプル領域で反射された電子は電流に寄与しないので、サンプル領域での電子の透過率を T とすると、全体として電流は

$$I = 2e \int_{\mu_2}^{\mu_1} D(\epsilon)v(\epsilon)T d\epsilon \quad (1)$$

と与えられる。ここに、1次元系の関係、 $D(\epsilon) = \sqrt{m/2\epsilon}/2\pi\hbar$, $v(\epsilon) = \sqrt{2\epsilon/m}$ を代入し、 μ_1 と μ_2 の間で透過率はエネルギーに依存しないとすると、 $I = (2e^2/h)TV$ となる。係数 2 はスピン縮重である。したがって、コンダクタンス $\Gamma \equiv I/V$ が

$$\Gamma = \frac{2e^2}{h} T \quad (2)$$

と求まる。1次元であるので、一方向の電流に寄与する状態はフェルミ面(点)上で一つだけであり、それがコンダクタンスに寄与する単位がスピン当たり e^2/h というわけである。これは、電子の流れるパス(しばしばチャンネルと呼ばれる)一つ当たり $e^2/h \approx (26 \text{ k}\Omega)^{-1}$ のコンダクタンスが対応することを意味している。

サンプル領域が有限の幅をもつ擬1次元の場合には、その領域におけるエネルギー分散関係は Fig. 2 のようになり、フェルミ準位を切る状態がいくつか存在することになる。この場合にはチャンネル数が増え、コンダクタンスはこれらのチャンネルからの寄与の和となる。 $T=1$ の場合は、コンダクタンスは系の幅の変化に対して $2e^2/h$ の単位でとびとびに変化することになる。これがコンダクタンスの量子化である。2次元または3次元系となると、系の幅方向は無限に広く、サンプルの接合界面に平行な運動量成分 k_{\parallel} が定義される。したがって、電流やコンダクタンスは k_{\parallel} について和をとって与えられることになる。一般にフェルミ準位 ϵ_F での透過率が k_{\parallel} に依存し、 $T(\epsilon_F, k_{\parallel})$ と表されるとすると、コンダクタンスは

$$\Gamma = \frac{2e^2}{h} \sum_{k_{\parallel}} T(\epsilon_F, k_{\parallel}) \quad (3)$$

となる。(2)式や(3)式をランダウアー公式と呼ぶ。

上の議論では、散乱のない1次元系でも抵抗が $h/2e^2 \approx 13 \text{ k}\Omega$ となってしまう。散乱のない1次元系の本来の抵抗はゼロと思いたい。この違いは測定方法による。2端子法では1次元系は熱浴である左右の電子溜めにつながれている。この場合抵抗が電子溜めと1次元系の接合部分で生

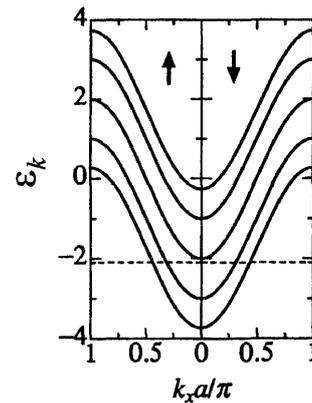


Fig. 2 Energy-momentum relation for a pseudo-one-dimensional system.¹³⁾ The dotted line indicates the position of the Fermi level and the arrows show the spin. In this case, there are two channels for each spin state.

じる。これが $h/2e^2$ となっているというわけである。1次元系そのものの抵抗は、さらに系自体に端子をつけ、4端子法で測定する必要がある。4端子法に対する理論では、1次元系の抵抗は期待どおりゼロになる。くわしくは、参考文献の 6, 7 を、実験については最近の報告¹²⁾ を見ていただきたい。

3. 線形応答理論—久保公式

系の電子状態が、1粒子ハミルトニアン

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (4)$$

で与えられるような1次元系を考えよう。ここで、 $V(x)$ は電気抵抗を生じる散乱ポテンシャルである。系の平衡状態はシュレディンガー方程式

$$H_0 \Psi_m = \epsilon_m \Psi_m \quad (5)$$

により決定される。

さて、電流をひき起こす外部刺激として、電位ポテンシャル $\phi(x)$ を採用する。線形応答理論では、状態 $\{\Psi_m\}$ で決定づけられている平衡状態にゆっくりと電位ポテンシャルを印加し、十分長い時間をかけて電流一定の状態にする。この状態での電流の熱平均(期待値)が我々の求めたいものである。電流密度演算子を j とすると、その期待値は、 $\langle j \rangle = \text{Tr} \langle \rho j \rangle$ と与えられる。ここで ρ は密度行列であり、カノニカル統計では、 $\rho = \exp(-\beta H) / \text{Tr} \exp(-\beta H)$ と定義される。なお、 $\beta = 1/k_B T$ である。 H は、 H_0 に電位ポテンシャル $\phi(x)$ を加えたものである。 $\langle j \rangle$ として H_0 の1次まで求めるのが線形応答理論であり、それによると電流は

$$I(x) = e \int_0^{\infty} dt \int_0^{\beta} d\lambda \langle \Phi(-i\hbar\lambda) j(x, t) \rangle \quad (6)$$

と与えられる。ここで、 $j(x, t) = e^{iH_0 t/\hbar} j(x) e^{-iH_0 t/\hbar}$ は電流密度演算子 $j(x)$ の相互作用表示である。また、 $\Phi(-i\hbar\lambda) =$

$e^{\lambda H_0} \Phi e^{-\lambda H_0}$ は虚数時間 λ を用いた相互作用表示であり、 $\dot{\Phi}$ は Φ の時間微分演算子である。

(6) 式で電流演算子が現れるのは、その熱平均 (期待値) として電流を計算するのであるから当然であろう。では、電位ポテンシャルの時間微分はなぜ現れるのだろうか。電位ポテンシャルが存在すると系の状態が変化し、密度行列 ρ そのものが変化する。 ρ の変化は、 $i\hbar \partial \rho / \partial t = [H, \rho]$ のように ρ と H との交換関係で決定される。 Φ の 1 次の範囲内で ρ の変化を求めていくと最終的に、 $\dot{\Phi} = i[H_0, \Phi(x)]/\hbar$ という電位ポテンシャルの時間微分が (6) 式に現れるというわけである。ボルツマン理論では、電圧印加による分布関数の変化を求めることで電流を計算した。分布関数に対応するものが線形応答理論では密度行列となっているのである。この (6) 式が久保公式の一般的表現である。

さて、(6) 式を計算に向くようなものに順次書き換えていこう。まず、電位ポテンシャルの時間微分の演算子と電流密度演算子を第 2 量子化の表示を用いて次のように表す。

$$\dot{\Phi} = \sum_{mn} c_m^+ \dot{\phi}_{mn} c_n \quad (7)$$

$$j(x) = \sum_{mn} c_m^+ j_{mn}(x) c_n \quad (8)$$

ここで、 c_m^+ と c_n は電子の生成、消滅演算子である。第 2 量子化を用いて物理量を表現する方法については、末尾の付録を参照していただきたい。これらを (6) 式に代入し、指数関数中の H_0 がエネルギー固有値に置き換わることに注意すると、

$$I(x) = e \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \sum_{mn} \langle c_m^+ c_n c_n^+ c_m \rangle \times \dot{\phi}_{mn} j_{mn}(x) e^{-(\varepsilon_n - \varepsilon_m)(-it/\hbar + \lambda)} \quad (9)$$

が得られる。上式での時間積分は $\varepsilon_n = \varepsilon_m$ 以外は振動項となりゼロとなることに注意すれば、 $\hbar \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m)$ となるのがわかる。 $\langle c_m^+ c_n c_n^+ c_m \rangle$ は、電流密度演算子により、状態 m の電子が状態 n に移され、それが電位ポテンシャル演算子により状態 n から m に戻る過程と考えられる。 $n=m$ では意味がないので $n \neq m$ とすると、 $\langle c_m^+ c_n c_n^+ c_m \rangle = \langle c_m^+ c_m \rangle (1 - \langle c_n^+ c_n \rangle) = f(\varepsilon_m)(1 - f(\varepsilon_n))$ が成立する。ここで $f(\varepsilon)$ はフェルミ分布関数である。この結果と、 λ の積分から

$$\int_0^\beta d\lambda e^{-(\varepsilon_n - \varepsilon_m)\lambda} \langle c_m^+ c_n c_n^+ c_m \rangle = - \frac{f(\varepsilon_m) - f(\varepsilon_n)}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \quad (10)$$

が得られる。ここで、

$$f(\varepsilon_n) \approx f(\varepsilon_m) + \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon = \varepsilon_m} (\varepsilon_n - \varepsilon_m) \quad (11)$$

と、絶対温度 0 度での関係式、 $\partial f / \partial \varepsilon|_{\varepsilon = \varepsilon_m} = -\delta(\varepsilon_m - \varepsilon_F)$ を用いると、最終的に、

$$I(x) = 2\pi e \hbar \sum_{mn} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_F) \dot{\phi}_{mn} j_{mn}(x) \quad (12)$$

が得られる。

電流密度演算子の行列要素は

$$j_{nm}(x) = \frac{i\hbar e}{2m} \left(\Psi_n^*(x) \frac{d\Psi_m(x)}{dx} - \frac{d\Psi_n^*(x)}{dx} \Psi_m(x) \right) \quad (13)$$

で与えられる。また、電位ポテンシャル演算子はハイゼンベルグの運動方程式 $\dot{\Phi} = i[H_0, \Phi(x)]/\hbar$ で与えられる。 $V(x)$ と $\Phi(x)$ とは交換するので、その行列要素は、

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_{mn} &= - \frac{i\hbar}{2m} \int dx \Psi_n^*(x) \left[\frac{d^2}{dx^2}, \Phi(x) \right] \Psi_m(x) \\ &= - \frac{1}{e} \int dx j_{mn}(x) \frac{d\Phi(x)}{dx} \end{aligned} \quad (14)$$

となる。ここで部分積分を一度用いている。電流は保存せねばならないので、 $j_{mn}(x)$ は x に依存しない。(このことは実際に示すことができる。) したがって積分が実行でき、 $\Phi(\infty) - \Phi(-\infty) \equiv \delta\Phi$ とすると、コンダクタンスが

$$\Gamma \equiv \frac{I(x)}{\delta\Phi} = 2\pi\hbar \sum_{mn} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_F) |j_{mn}|^2 \quad (15)$$

と得られる。以上の導出は川畑の解説¹⁴⁾ に従った。関連する事項についてはそれを参考にさせていただきたい。(15) 式は電流密度演算子 $j(x)$ を用いて表してあるが、 $j(x)$ と長さ L の 1 次元系の電流演算子 J とは、

$$J_{mn} = \int dx j_{mn}(x) = L j_{mn}(x)$$

で結びついている。ここで電流は x に依存しないことを用いた。

以上 (4)~(15) 式では 1 次元系を考えた。3 次元系におけるコンダクタンスと電気伝導度 σ とは、 $\Gamma = (\sigma/L)S$ の関係がある。ここで L は系の長さ、 S は断面積である。 $\Omega = LS$ を系の体積とすると、電気伝導度は、電流演算子 J を用いて

$$\sigma = \frac{2\pi\hbar}{\Omega} \sum_{mn} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_F) |J_{mn}|^2 \quad (16)$$

と与えられる。上式は $\{\Psi_m\}$ の表示で電気伝導度を表したものであるが、任意の表示とするには、トレースを用いて

$$\sigma = \frac{\pi\hbar}{\Omega} \text{Tr}[J\delta(\varepsilon_F - H)J\delta(\varepsilon_F - H)] \quad (17)$$

とすればよい。ここで、スピンの自由度をトレースの中に含めたので因子 2 が消えている。(15)~(17) 式も久保公式と呼ばれている。

具体的ハミルトニアンに対して計算が実行可能となるよう、グリーン関数を用いて久保公式をさらに変形していく。その準備として、グリーン関数について、簡単に述べておきたい。

4. グリーン関数

物性物理学で用いられるグリーン関数には、2 時間グリーン関数、温度グリーン関数、非平衡系グリーン関数など、さまざまなものがあり、問題に応じて使い分けられている。ここでは、最も簡単な時間に依存しない 1 粒子グ

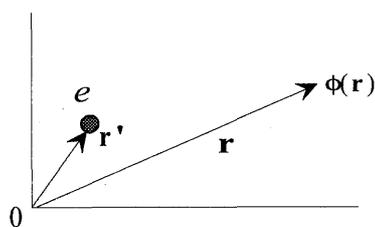


Fig. 3 The electro-potential $\phi(\mathbf{r})$ at \mathbf{r} is induced by the electrical charge e at \mathbf{r}' .

グリーン関数を説明する¹⁵⁾. 1粒子電子状態や不純物散乱を取り扱う場合には、これで十分である.

グリーン関数そのものは、量子力学で用いられる以前から、微分方程式論において用いられていた. まず、その一例を取り上げ、グリーン関数がどんなものか理解していただく.

4.1 古典的グリーン関数

Fig. 3 に示したように、 \mathbf{r}' の位置の電荷 e が、 \mathbf{r} の位置に作る電位を $\phi(\mathbf{r})$ とすると、それは、

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (18)$$

と与えられる. 電荷が $\rho(\mathbf{r}')$ で分布している場合には、ポアソン式、

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (19)$$

を解くことにより、電位が

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (20)$$

と得られる.

今、関数 $G(\mathbf{r})$ を次式で定義しよう.

$$\nabla^2 G(\mathbf{r}) = -\frac{\delta(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (21)$$

この関数は、 $G(\mathbf{r}) = 1/4\pi\epsilon_0 R$ と求まり、これを用いて、電位が

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\rho(\mathbf{r}') \quad (22)$$

と与えられる. したがって、いったん関数 $G(\mathbf{r})$ を求めておけば、(20) 式の代わりに (22) 式を用いて、任意の電荷分布 $\rho(\mathbf{r}')$ に対する電位が計算できる. この点が、グリーン関数と呼ばれる関数 $G(\mathbf{r})$ を持ち込むありがたみである.

4.2 時間に依存しない1粒子グリーン関数

さて、次のハミルトニアンに対するシュレディンガー方程式の解を求めることを考えよう.

$$H = H_0 + V \quad (23)$$

ここで、 H_0 に対する、シュレディンガー方程式

$$H_0\varphi(\mathbf{r}) = \epsilon\varphi(\mathbf{r}) \quad (24)$$

の固有値 ϵ_n 、固有関数 $\varphi_n(\mathbf{r})$ はわかっているとす. また、 V は任意の摂動である.

ハミルトニアン H に対するシュレディンガー方程式

$$H\Psi(\mathbf{r}) = \epsilon\Psi(\mathbf{r}) \quad (25)$$

を次のように書き換える.

$$(\epsilon - H_0)\Psi(\mathbf{r}) = V\Psi(\mathbf{r}) \equiv F(\mathbf{r}) \quad (26)$$

ここで、波動関数 $\Psi(\mathbf{r})$ を $\varphi_n(\mathbf{r})$ を用いて展開する. すなわち、

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (27)$$

これを、式 (26) に代入すると、

$$\sum_n a_n (\epsilon - \epsilon_n) \varphi_n(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \quad (28)$$

が得られる. これに、 $\varphi_m^*(\mathbf{r})$ をかけて空間積分すると、係数 a_m が

$$a_m = \int \varphi_m^*(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) d\mathbf{r} / (\epsilon - \epsilon_m) \quad (29)$$

と求まる. これを (27) 式に代入すると、 $\Psi(\mathbf{r})$ が

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}) &= \sum_n \int \frac{\varphi_n(\mathbf{r}') \varphi_n^*(\mathbf{r}')}{\epsilon - \epsilon_n} F(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &\equiv \int G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') F(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (30)$$

と表される. ここで、関数 $G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を

$$G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}')}{\epsilon - \epsilon_n} \quad (31)$$

と定義している. $F(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ ととると、 $\Psi(\mathbf{r}) = G(\epsilon, \mathbf{r})$ となることから、 $G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は次の式を満たすことがわかる.

$$(\epsilon - H_0)G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (32)$$

(30) 式からもわかるように、関数 $G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を一度求めておけば、任意の $F(\mathbf{r})$ に対する波動関数がわかることになり、前節で説明した電位ポテンシャルの問題と全く同じ形式となっていることがわかる. したがってここで現れる関数 $G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ もグリーン関数と呼ぶ.

しかし、シュレディンガー方程式の場合には、幾つかの複雑な点がある. その一つは、(26) 式の定義から明らかのように、上に現れた関数 $F(\mathbf{r})$ にも波動関数 $\Psi(\mathbf{r})$ を含んでいることである. したがって、現実には、逐次的に $\Psi(\mathbf{r})$ を求めていく必要がある. このとき、 $F(\mathbf{r})$ の値が変化するわけであるが、 $G(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ としては常に同じものを用いればよい. このことを利用して、摂動展開が系統的に実行できることになる.

もう一つの問題点は次に述べるグリーン関数の解析性である. 1次元自由粒子のグリーン関数を考えてみよう. (32) 式より、

$$\left(\epsilon + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) G(x, x') = \delta(x, x') \quad (33)$$

が得られる. ただし、グリーン関数の ϵ は略記した. この式は2階の微分方程式であるので、解として

$$G^\mp(x, x') = \mp \frac{i}{\hbar v} \exp[\pm ik|x-x'|] \quad (34)$$

の二つが存在する。指数関数の中の符号は粒子の進行方向を示している。 $G^-(x, x')$ は粒子が原点から外側に向かって運動することを意味している。逆に、 $G^+(x, x')$ は粒子が原点に向かって運動していることを意味する。どちらの解を採用するかは、問題に依存する。 $G^-(x, x')$ を遅延グリーン関数、 $G^+(x, x')$ を先進グリーン関数と呼んでいる。

これらのグリーン関数を区別するために、微分方程式に微小の複素量を持ち込む。すなわち、

$$\left(\varepsilon \pm i\eta + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) G^\mp(x, x') = \delta(x, x') \quad (35)$$

と定義する。ただし、 $\eta > 0$ である。このようにすると、 $k \rightarrow \sqrt{2m(\varepsilon \pm i\eta)}/\hbar \approx k(1 \pm i\eta/\varepsilon)$ となり、 $|x-x'| \rightarrow \infty$ で収束する解が物理的解となる。

(32) 式に $i\eta$ を導入して演算子 (行列) 表示すると、

$$(\varepsilon + i\eta - H)G = 1 \quad (36)$$

となる。(31) 式において、 $\varepsilon \rightarrow \varepsilon \pm i\eta$ として次の関係式

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} (\varepsilon \pm i\eta - \varepsilon_n)^{-1} = P(\varepsilon - \varepsilon_n)^{-1} \mp i\pi \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \quad (37)$$

を用いると (P は主値積分)、 $G(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv G(\varepsilon, \mathbf{r})$ の虚部として、

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} G^-(\varepsilon, \mathbf{r}) = \sum_n |\varphi_n(\mathbf{r})|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \quad (38)$$

が得られる。 $|\varphi_n(\mathbf{r})|^2$ は固有状態 n のとりうる確率であるから、上式右辺は場所 \mathbf{r} におけるエネルギー ε をもつ状態の密度、すなわち局所状態密度を与える。空間積分すると、全状態密度を $D(\varepsilon)$ として、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^-(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d\mathbf{r} G^-(\varepsilon, \mathbf{r}) \\ &= \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) = D(\varepsilon) \end{aligned} \quad (39)$$

となる。グリーン関数の虚部が状態密度となっているわけである。別の言い方をすれば、 $G^-(x, x')$ と $G^+(x, x')$ は $\varepsilon = \varepsilon_n$ で不連続であり、その差が状態密度になっているのである。

4.3 グリーン関数の意味

以下ではタイトバインディング模型を用いるので、そこで現れる数学的表現の意味を整理しておこう。この模型は、各原子に局在する波動関数を基底ベクトルとする。単一バンドのハミルトニアンは第2量子化の表現で、

$$H = t \sum_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_i v_i c_i^\dagger c_i \quad (40)$$

と表される。右辺第1項は、最隣接格子点間の電子の飛び移りを表し、その大きさが t である。第2項は各格子点上のポテンシャルを表している。格子点を示す添え字 (i, j) を用いて H を行列表示することができる。その行列を、

$$H = W + V \quad (41)$$

としよう。第1項、2項が(40)式の第1, 2項にそれぞれ対応している。 V は対角行列である。

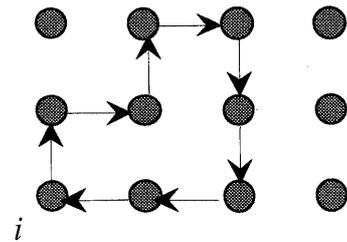


Fig. 4 Itinerancy of an electron from site i to i . The arrows indicate one of the possible paths.

グリーン関数は、(36) 式で示したように、 $\mathbf{G} = (z\mathbf{1} - \mathbf{H})^{-1}$ ($z = \varepsilon \pm i\eta$) であるから、行列演算に注意して、

$$\mathbf{G} = \mathbf{R}(\mathbf{1} - \mathbf{W}\mathbf{R})^{-1} \quad (42)$$

$$\mathbf{R} \equiv (z\mathbf{1} - \mathbf{V})^{-1}$$

と書き換えられる。上第1式の逆行列の部分に幾何級数展開すると、

$$\mathbf{G} = \mathbf{R} + \mathbf{R}\mathbf{W}\mathbf{R} + \mathbf{R}\mathbf{W}\mathbf{R}\mathbf{W}\mathbf{R} + \dots \quad (43)$$

のように無限の項が現れる。この意味は次のように理解される。もし、 $\mathbf{W} = 0$ であれば、 \mathbf{R} は対角行列であるので、 \mathbf{G} も対角行列である。これは、電子の飛び移りがなく、電子が局在していることを示している。電子の飛び移りが存在する場合には、 $\mathbf{W} \neq 0$ であり、 \mathbf{G} に非対角成分が生じる。これは、ある格子点にいた電子が結晶内を動き回ったあげく、別の格子点に移動することを意味している。移動の仕方は(43)式からわかるよう無限に存在する。 \mathbf{G} の対角成分 G_{ii} は Fig. 4 に示すよう格子点 i にいた電子が長時間かけ、あらゆる経路をたどって元の場所に戻ってくる確率を示しているのである。このように行列の積は電子が結晶内をどのように運動するかを表していることになる。次節で現れる、グリーン関数と電流演算子の積も同様に理解すればよい。

5. 多層構造への久保公式の適用

グリーン関数の説明が長くなってしまった。必要な式は、(17) 式と(36) 式である。まず、久保公式(17) 式をグリーン関数を用いて表そう。次の関係式

$$\begin{aligned} G^\pm(\varepsilon) &= [\varepsilon \mp i\eta - H]^{-1} \\ &= P[\varepsilon - H]^{-1} \pm i\pi \delta(\varepsilon - H) \end{aligned} \quad (44)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \delta(\varepsilon - H) &= \frac{1}{2\pi i} (G^+(\varepsilon) - G^-(\varepsilon)) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^-(\varepsilon) \end{aligned} \quad (45)$$

であるから、(17) 式は次のように変形できる。

$$\sigma = \frac{\hbar}{\Omega\pi} \text{Tr} [J \{ \text{Im} G^-(\varepsilon_F) \} J \{ \text{Im} G^-(\varepsilon_F) \}] \quad (46)$$

この式の右辺は演算子の積のトレース、すなわち行列の積の対角成分の和を示している。グリーン関数はハミルトニ

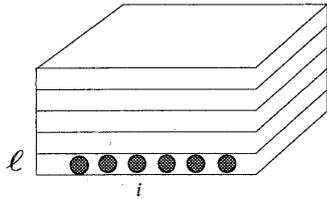


Fig. 5 Schematic figure of a multilayer.

アンに従って電子を移動させ、電流演算子も電子を移動させる働きをする。結局のところ電気伝導度は電子が結晶内をどう動き回るかによって決まるわけである。これは考えてみれば当然の結果であろう。以下では、多層膜を取り上げ、その電気伝導度の表式を具体的に求めていく。

5.1 層に平行な電流

多層構造の電気抵抗を計算する場合、格子点を、層と層内の位置で記述するのが良い。Fig. 5のように層の添え字を l 、層内の位置を i として、格子点を (l, i) で表そう。各層内には乱れはなく、層に平行な波数 \mathbf{k}_{\parallel} は保存するとする。位置 i をフーリエ変換して、 $(l, \mathbf{k}_{\parallel})$ の表示を用いる。ここで、 $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ である。すなわち、層は z 方向に積層しているとしている。

この表示を用いると、電流の方向を x 方向として、電気伝導度 (46) 式は

$$\sigma_{xx} = \frac{\hbar}{\Omega\pi} \text{Tr}[J_x(\mathbf{k}_{\parallel}) \text{Im} G^-(\mathbf{k}_{\parallel}) J_x(\mathbf{k}_{\parallel}) \text{Im} G^-(\mathbf{k}_{\parallel})] \quad (47)$$

となる。電流は電子速度 v_x に電荷をかけたものであるので、 $J_x(\mathbf{k}_{\parallel}) = -ev_x(\mathbf{k}_{\parallel})$ を代入して右辺のトレースを具体的にとると、

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2\hbar}{\Omega\pi} \sum_s \sum_{lm} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} v_x(\mathbf{k}_{\parallel}) v_x(\mathbf{k}_{\parallel}) \times \text{Im} G_{lms}^-(\mathbf{k}_{\parallel}) \text{Im} G_{mls}^-(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad (48)$$

となる。ここで、 s はスピンの添え字であり、 l と m は層の添え字である。タイトバインディング模型では $\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} = 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ であるので (a は格子定数)、速度は、

$$v_x(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}}{\partial k_x} = \frac{1}{\hbar} 2ta \sin(k_x a) \quad (49)$$

となり、これを (48) 式に代入すると、

$$\sigma_{xx} = \frac{4e^2 a^2}{\Omega\pi\hbar} \sum_s \sum_{lm} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sin^2(k_x a) t^2 \times \text{Im} G_{lms}^-(\mathbf{k}_{\parallel}) \text{Im} G_{mls}^-(\mathbf{k}_{\parallel}) \quad (50)$$

が得られる。この式は、与えられたハミルトニアンに対して、そのグリーン関数が求められれば、電気伝導度が計算されることを意味している。

では、グリーン関数は具体的にどのように計算されるのだろうか。単純立方格子からなる、層数 L の多層膜を考えてみよう。ハミルトニアンとして、(40) 式を採用する。ポテンシャルは層のみに依存し、層内では一定とする。またスピンの添え字は省略した。ハミルトニアンを層内の波数

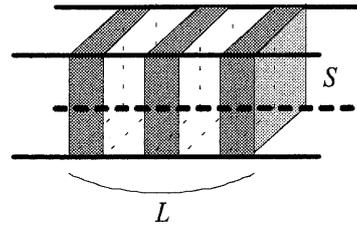


Fig. 6 Multilayer in which the current flows perpendicular to the planes.

\mathbf{k}_{\parallel} を用いてフーリエ変換すると

$$H = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \left[\sum_l (\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} + v_l) c_{l\mathbf{k}_{\parallel}}^\dagger c_{l\mathbf{k}_{\parallel}} + t \sum_{l,m} c_{l\mathbf{k}_{\parallel}}^\dagger c_{m\mathbf{k}_{\parallel}} \right] \quad (51)$$

となる。ハミルトニアンは \mathbf{k}_{\parallel} に関して対角となっているので、グリーン関数はエネルギー ($z = \varepsilon + i\eta$) と \mathbf{k}_{\parallel} を変数とする $L \times L$ の 3 重対角行列の逆行列として次のように表される。

$$G^-(z, \mathbf{k}_{\parallel}) = (z - H_{\mathbf{k}_{\parallel}})^{-1} = \begin{bmatrix} z - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} - v_1, & -t, & & & \\ -t, & z - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} - v_2, & -t, & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & -t \\ & & & & -t, z - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} - v_L \end{bmatrix}^{-1} \quad (52)$$

上式で表される逆行列の行列要素を求めて (50) 式に代入し、 \mathbf{k}_{\parallel} に関して和をとれば電気伝導度が得られるわけである。しかし $\eta \rightarrow 0$ の極限をとると電気伝導度は発散してしまう。ハミルトニアンには系の並進対称性を破る散乱ポテンシャルが含まれていないからである。実際には、散乱により電子の自己エネルギーが加わる。これが複素量であるため、グリーン関数の虚部が有限値となる。(52) 式の行列要素の対角成分にこのような複素成分を導入することで電気伝導度が計算できる。この複素成分がスピンの場合には、磁気抵抗効果が生じる。これは次回のテーマである。

5.2 層に垂直方向の電気伝導

この場合には、多層膜に金属リード線が繋がれ、全体の電気伝導度を測定することになるが、サンプル部分 (多層膜) の電気抵抗が全体を支配すると考えられる。このような場合には、電気伝導度よりも、次の式で定義されるコンダクタンス $\Gamma = (\sigma/L)S$ を問題にするほうが良い。ここで、 S は試料の断面積、 L は試料の長さである (Fig. 6)。そうすると、コンダクタンスは (17) 式より

$$\Gamma = \frac{\pi\hbar}{L^2} \text{Tr}[J\delta(\varepsilon_F - H)J\delta(\varepsilon_F - H)] \quad (53)$$

となる。

さて、この式を具体的計算が可能ないように変形しよう。格子点を前節のように、層の添え字と層内の添え字にわけて、 (l, i) と表そう。電流はすべての格子点からの寄与の和

となっているので

$$J = \sum_l J_l \quad (54)$$

のように各層からの和として表される。ここで、

$$\begin{aligned} J_l &= \frac{e\tau a}{i\hbar} \sum_i (c_{l+1,i}^\dagger c_{l,i} - c_{l,i}^\dagger c_{l+1,i}) \\ &= \frac{ea}{i\hbar} (|l+1\rangle W_l \langle l| - |l\rangle W_l^* \langle l+1|) \end{aligned} \quad (55)$$

であり、

$$W_l = W_l^* = t1 \quad (56)$$

は層間の飛び移り項を表す行列である。(55)式の第1式が(49)式に電荷をかけたものであることは、(55)式をフーリエ変換してみればわかる。

(54)式を(53)式に代入すると、

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\pi\hbar}{L^2} \frac{1}{(2\pi i)^2} \sum_{lm} \text{Tr}[J_l(G^+ - G^-)J_m(G^+ - G^-)] \\ &= \frac{\pi\hbar}{a^2} \frac{1}{(2\pi i)^2} \text{Tr}[J_l(G^+ - G^-)J_m(G^+ - G^-)] \end{aligned} \quad (57)$$

となる。電流はどの層でも同じであるから(電流保存則)、層の和をとることができて、分母の L が格子定数 a に変わっている。 $\tilde{G} = G^+ - G^-$ と定義し、(55)式を(57)第2式に代入すると、層に関するトレースをとって、コンダクタンスは

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{e^2 t^2}{2\hbar} \text{Tr}[\tilde{G}_{l,m+1} \tilde{G}_{m,l} + \tilde{G}_{l+1,m} \tilde{G}_{m+1,l} \\ &\quad - \tilde{G}_{l,m} \tilde{G}_{m+1,l+1} - \tilde{G}_{l+1,m+1} \tilde{G}_{m,l}] \end{aligned} \quad (58)$$

と表される。電流はどの層で計算しても同じはずであるから、 l と m は任意にとることができる。ここで、 $l=m$ とすると(58)式は

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{e^2 t^2}{2\hbar} \text{Tr}[\tilde{G}_{l,l+1} \tilde{G}_{l,l} + \tilde{G}_{l+1,l} \tilde{G}_{l+1,l} \\ &\quad - \tilde{G}_{l,l} \tilde{G}_{l+1,l+1} - \tilde{G}_{l+1,l+1} \tilde{G}_{l,l}] \end{aligned} \quad (59)$$

となる。これが、Lee-Fisher¹⁶⁾が用いた式である。層内と層間のグリーン関数を求めればコンダクタンスが計算できることになる。なお、ここで残っているトレースはスピンと層内の格子点に関するものである。

(59)式に現れるグリーン関数は、Fig. 7のような1次元模型を考えると理解しやすい。1次元模型では、 l は格子点になる。Fig. 7では、サンプル領域を、 $l=1 \sim N$ とし、左右にリード線がつないである。サンプル領域のポテンシャルを適当にとり、リード線のポテンシャルをゼロとし、 ε をバンド内のエネルギーととれば、(59)式よりサンプル領域のコンダクタンスが計算できることになる。この際、グリーン関数としては3重対角行列の逆行列の対角成分と隣り合う成分を求めればよいことになる。層に平行の電流の場合と違って、電子の自己エネルギーをグリーン関数に含めなくてもコンダクタンスは有限となる。Fig. 7から見てとれるよう、サンプル自体が散乱体となっているからで

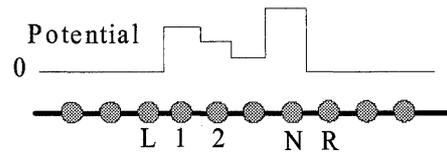


Fig. 7 Model of a one-dimensional system.

ある。以上のようにして有限系のコンダクタンスが数値計算できるわけであるが、系のサイズが大きくなりポテンシャルの分布について平均をとる場合には、適当な近似を用いる必要がある。また、実際の計算では、微小量 η を残したまま数値計算を実行する必要がある。これらの点に関しては原論文^{17)~20)}を参照していただきたい。

(59)式はもっと見やすい形に変形できる。左右のリード線がサンプルと接している格子点の局所状態密度をそれぞれ、 D_L, D_R とし、サンプルとリード線との間の電子の飛び移り積分を t_L, t_R 、とすると、若干の算術の後、

$$\Gamma = \frac{2e^2}{h} 4\pi^2 t_L^2 t_R^2 D_L D_R |G_{1N}^+|^2 \quad (60)$$

が得られる。これは、Caroliら⁸⁾が求めた式の線形極限の結果となっている。この式とランダウアー公式とを比較すると、式右辺の $2e^2/h$ 以外の因子が透過率に対応していることになる。透過率は、リード線の端の状態密度、リード線とサンプル間の電子の飛び移り積分、およびサンプル内で電子が格子点1から N まで移動する確率の2乗との積で表現されており、非常にわかりやすいと言えよう。(60)式で、状態密度は、半無限系の端の値であり、グリーン関数はそれらがつながった無限系のものであることに注意する必要がある。したがって、金属接合の場合には、サンプル内に入った電子は何度もリード線を行き来するが、トンネル接合の場合には左からいったんサンプル(絶縁層)に入った電子が左のリード線に戻る確立は非常に小さくなる。

6. コンダクタンスの量子化

一様な1次元系のコンダクタンスは、ランダウアー公式から得られるように $2e^2/h$ となるわけであるが、このことを、1次元系のグリーン関数の計算を兼ねて、(60)式を用いて直接確かめてみよう。ハミルトニアンは(40)式第1項からなる。グリーン関数は次のような単純な3重対角行列の逆行列である。

$$G(z) = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & & & \\ \cdot & z & -t & & \\ & -t & z & -t & \\ & & -t & z & -t \\ & & & -t & z & \cdot \\ & & & & \cdot & \cdot \end{bmatrix}^{-1} \quad (61)$$

したがって、どのようにでも計算できる。波数空間に変換

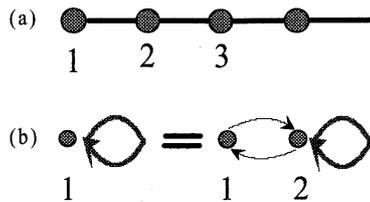


Fig. 8 (a) Model of a half-infinite one-dimensional system. (b) Graph showing the hopping process in (a).

してもよいが、乱れがある場合も取り扱えるように、直感的な導出を行ってみよう。また簡単のため、 $N=2$ とする。

(60)式を具体的に書き下すには、まず半無限系の端のグリーン関数(これを $f(z)$ とする)を求める必要がある。これには Fig. 8(a)のような半無限系の端を出発し、遍歴を繰り返した後、元に戻る成分を計算すればよいわけである。端を出発した電子は必ず隣の格子点に飛び移り、そこからさらに右側を遍歴する。Fig. 8(b)に示したように、格子点2を出発して途中で端の点1を通ることなく2に戻るグリーン関数は結局 $f(z)$ と同じである。したがって、

$$f(z) = \left(\begin{bmatrix} z & -t \\ -t & f^{-1}(z) \end{bmatrix}^{-1} \right)_{11} \quad (62)$$

と書ける。また、無限系のグリーン関数 $G_{12}(z)$ は電子が左右の方向に遍歴することを考慮すると、

$$G_{12}(z) = \left(\begin{bmatrix} f^{-1}(z) & -t \\ -t & f^{-1}(z) \end{bmatrix}^{-1} \right)_{12} \quad (63)$$

となる。(62)から、 $f(z) = 1/(z - t^2 f(z))$ が得られ、これを解いて $f(z)$ が求まる。エネルギーとしてバンドエネルギー

$$\varepsilon_k = 2t \cos ka \quad (64)$$

をとり、 $f(z)$ と(63)式の z に代入して、

$$f(z) = e^{\mp ika} / t \quad (65)$$

$$G_{12}(z) = \frac{i}{2t} \frac{e^{iha}}{\sin ka} \quad (66)$$

$$D_L = D_R = -\text{Im} f(z) / \pi = -\frac{\sin ka}{\pi t} \quad (67)$$

が得られる。これらを(60)式に代入すると、スピンの因子2をかけて $\Gamma = 2e^2/h$ が得られる。

7. おわりに

今回は久保公式を用いてどのように電気抵抗を計算するかを、絶対温度0度のポテンシャル散乱の場合に限って説明してきた。前回の講座では、強磁性体の残留抵抗にはスピンの依存する散乱ポテンシャルの存在が重要であることを指摘した。次回には、多層構造にこのようなスピン依存散乱を導入すると磁気抵抗効果が生じることを、現象論と今回説明した微視的理論とを用いて説明していきたい。

付録 第2量子化

場の演算子を完全系 $\{\varphi_n(\mathbf{r})\}$ を用いて次のように表す。

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) c_n$$

$$\hat{\Psi}^*(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r}) c_n^+ \quad (\text{A.1})$$

(A.1)式は、波動関数 $\Psi(\mathbf{r})$ を基底関数で展開した形式と同じであるが、それを拡張して、展開係数を演算子としたものである。その演算子 c^+ 、 c は次のフェルミ粒子の交換関係を満足する。

$$[c_m^+, c_n] \equiv c_m^+ c_n + c_n c_m^+ = \delta_{mn} \quad (\text{A.2})$$

$$[c_m^+, c_n^+] = [c_m, c_n] = 0$$

$\varphi_n(\mathbf{r})$ として結晶内の1電子ハミルトニアン H の固有関数を用いる。すなわち、

$$H \varphi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (\text{A.3})$$

が満たされているとする。物理量 O の第二量子化の表現は次のようにして得られる。

$$O \rightarrow \int \hat{\Psi}^*(\mathbf{r}) O \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{mn} O_{mn} c_m^+ c_n \quad (\text{A.4})$$

$$O_{mn} = \int d\mathbf{r} \varphi_m^*(\mathbf{r}) O \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (\text{A.5})$$

例えば、ハミルトニアンに対しては、スピンの添え字 σ を頭を書いて

$$H \rightarrow \sum_{\sigma} \sum_{m,n} \varepsilon_{mn} c_{m\sigma}^+ c_{n\sigma} \quad (\text{A.6})$$

$$\varepsilon_{mn} = \int d\mathbf{r} \varphi_m^*(\mathbf{r}) H \varphi_n(\mathbf{r}) \quad (\text{A.7})$$

とすれば良い。

参考文献

- 1) 井上順一郎: 日本応用磁気学会誌, **25**, 1384 (2001) 連載講座
- 2) R. Kubo: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **12**, 570 (1957).
- 3) 線形応答理論から電気伝導を論じたのは、中野藤生: 物性論研究, **88**, 25 (1955) が初めてである。
- 4) 教科書としては例えば、阿部龍蔵: 統計力学 (東京大学出版会, 1992).
- 5) R. Landauer: *Philos. Mag.*, **21**, 863 (1970).
- 6) S. Datta: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1995).
- 7) 川畑有郷: メゾスコピック系の物理学 (培風館, 1997).
- 8) C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James: *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **4**, 916 (1971).
- 9) G. Rickayzen: *Green's Functions and Condensed Matter* (Academic Press, New York, 1980).
- 10) E. N. Economou: *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag, New York, 1983).
- 11) G. D. Mahan: *Many-Particle Physics*, 3rd Ed. (Plenum, 2000).
- 12) R. de Picciotto *et al.*: *Nature*, **411**, 51 (2001).
- 13) 内藤康幸: 名古屋大学大学院工学研究科修士論文 (2001) よ

- り.
- 14) 川畑有郷: 日本物理学会論文選集, メゾスコピック系 解説 (1994).
 - 15) L. I. Schiff: 量子力学, 井上 健訳 (吉岡図書, 1969).
 - 16) P. A. Lee and D. S. Fisher: *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 882 (1981).
 - 17) Y. Asano, A. Oguri, J. Inoue, and S. Maekawa: *Phys. Rev. B*, **49**, 12831 (1994).
 - 18) H. Itoh, T. Kumazaki, J. Inoue, and S. Maekawa: *Jpn. J. Appl. Phys.*, **37**, 5554 (1998).
 - 19) B. Velicky: *Phys. Rev.* **184**, 614 (1969).
 - 20) H. Itoh, A. Shibata, T. Kumazaki, J. Inoue, and S. Mae-

kawa: *J. Phys. Soc. Jpn.*, **68**, 16323 (1999).

(2001年5月14日受理)

井上順一郎 いのうえ じゅんいちろう

昭51 名古屋大学大学院工学研究科応用物理学専攻博士課程修了, 昭52 名古屋大学工学部教務員, 昭61 同講師, 平2 同助教授, 平9 同教授, 現在に至る.

専門 物性理論

(工博)