

半導体量子ドットの物理学: 近藤効果を中心に

江藤 幹雄

慶應義塾大学 理工学部 物理学科

1 はじめに

半導体微細加工によって作製される微小な系は、ミクロとマクロの中間の意味でメゾスコピック系と呼ばれる。メゾスコピック領域は、電子の粒子性、波動性、相関効果による新しい現象が次々と見つかったり、物性物理学のフロンティアである。本サブゼミでは、メゾスコピック系全般の簡単な紹介の後、ナノスケールのゼロ次元系、量子ドット、の基礎から最近の研究までを解説する。

量子ドットでは大きな帯電効果 (クーロンブロックード) を利用して、その内部の電子数を1個ずつ制御することができる。離散的な量子準位構造、縮退準位近傍で現れる高スピン状態 (フント則) など、原子に類似の性質を示すことから、量子ドットは「人工原子」とも呼ばれる。

電子数が奇数の場合、人工原子のスピンと外部電極とのトンネル結合によって、近藤効果が観測される。近藤効果は、金属中の磁性不純物系で長い間研究されてきた、物性物理学における非常に重要な問題である: 局在スピンとフェルミの海との相互作用によってスピン1重項が形成され、それが電気伝導に大きな影響を及ぼす。最近、量子ドット中の離散準位間隔を制御することで、軌道準位の縮退近傍での近藤効果の増大や偶数電子での近藤効果が見つかり、注目されている。また、量子ドットを結合させた「人工分子」の近藤効果も調べられている。

本テキストでは、量子ドットのクーロンブロックード現象と近藤効果に絞って解説する。メゾスコピック系物理学の全般については、例えば文献 [1] を参照されたい。また、最近研究が活発な、量子ドットの量子情報処理への応用については文献 [2] がわかりやすい。

2 量子ドットの電気伝導特性

2.1 クーロン振動

ナノスケールの箱、量子ドット、に2つのリードをトンネル接合で接続した系を考える [図1(a)]。量子ドットの中では、エネルギー準位はとびとびの値に量子化される。左右のリードのフェルミ準位の間にドット中の《量子準位》が存在すれば、その準位を通して電気伝導が生じる。量子ドットの静電エネルギーをドットの近傍に取り付けたゲート電極 (電圧 V_g) で上下させると、《量子準位》が上述の範囲に現れる度に電流が流れるので、電流はゲート電圧の関数としてピーク構造を示す [図1(b)]。

電子間の相互作用がなければ、この《量子準位》は1電子準位 ϵ_j そのものである。が、電子間のクーロン相互作用が存在する場合にはどうなるであろうか。クーロン斥力が一定値 U である“constant interaction model” を考えると、電子数 N の全エネルギーは

$$E_N = \sum_{j=1}^N \epsilon_j + N C_2 U.$$

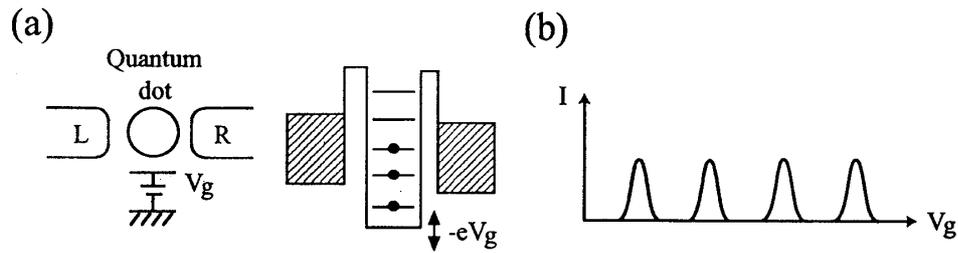


図 1: (a) リード L/R とトンネル接合で結合した量子ドット。ドット中の《量子準位》は、ドットにつけたゲート電極 (電圧 V_g) によって上下する。(b) 量子ドットを流れる電流のゲート電圧依存性 (クーロン振動)。

N 番目の電子を量子ドットに付け加える化学ポテンシャル (正確には、静電ポテンシャルを含めた electro-chemical potential),

$$\mu_N = E_N - E_{N-1} = \epsilon_N + (N-1)U$$

が、この場合の《量子準位》となる。1 電子準位の間隔 $\Delta\epsilon$ がクーロン斥力 U に比べて無視できるとき、電流ピークの間隔は一定値 $\eta e\Delta V_g = U$ となるが、この周期構造が従来「クーロン振動」と呼ばれて来た¹。また、ピークとピークの間谷の領域で電流が抑制される現象は「クーロンブロックード」と呼ばれる。クーロンブロックード領域では、量子ドット中の電子数 N がほぼ確定する。ゲート電圧の変化とともに、谷から谷へ、 N は一つずつ増加する。

この《量子準位》は、リードとのトンネル結合のために、有限の線幅 Γ をもつ。準位 N の寿命 τ は、Fermi の黄金律より

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\alpha=L,R;k} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \alpha k | H_T | j \rangle|^2 \delta(\epsilon_k - \mu_N) = \frac{2\pi}{\hbar} \nu (|V_L|^2 + |V_R|^2),$$

ここで V_α はリード α とのトンネル結合 [H_T は後出の tunnel Hamiltonian, 式 (5)], ν はリードの状態密度である (リード中の状態 k についての和を積分で置き換えた)。したがって、線幅は

$$\Gamma = \frac{1}{2\tau} = \pi\nu (|V_L|^2 + |V_R|^2) \quad (1)$$

で与えられる。クーロン振動が観測される条件は、ピーク間隔 $\Delta_N = \mu_N - \mu_{N-1}$ (addition energy と呼ばれる) が、熱揺らぎ $k_B T$ と量子揺らぎ Γ より十分小さいことである。

2.2 人工原子

実際の量子ドットに対して constant interaction model は十分でない。その一例として、樽茶氏らによる実験を見てみよう²。

この実験の量子ドットは、AlGaAs/InGaAs/AlGaAs のヘテロ構造を縦型に加工したもので、AlGaAs がトンネル障壁を形成している [図 2(a)]³。InGaAs の量子ドットは薄い円盤形をしてい

¹現実の系では、リード (L, R) やゲート電極と量子ドット間とのクーロン相互作用も存在する。それらの静電結合を電気容量 C_L, C_R, C_g で表すと (capacitance model), $N C_2 U \rightarrow (e^2/C) N^2$, ここで $C = C_L + C_R + C_g$ 。ゲート電圧と静電エネルギーの比例定数は $\eta = C_g/C$ で与えられる [3]。

²S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, R. J. van der Hage and L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. Lett. 77, 3613 (1996).

³このような量子ドットを「縦型量子ドット」と呼び、2次元電子ガスの上に蒸着した金属のゲート電極によってリードドット-リードの構造を作る横型量子ドット [図 1(a) 左の模式図] と区別する。

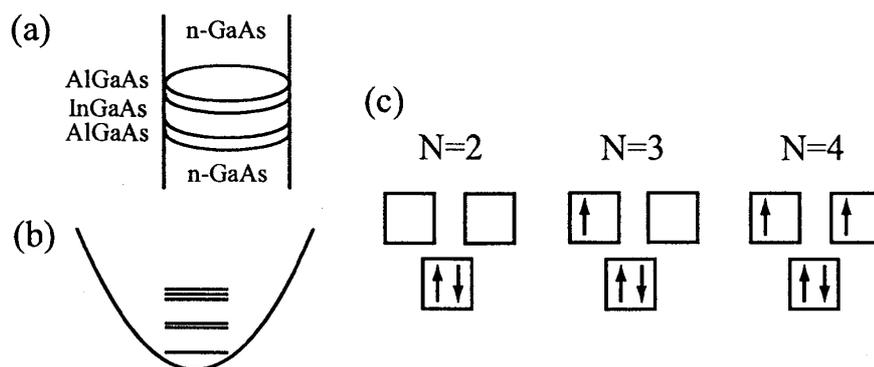


図 2: (a) AlGaAs/InGaAs/AlGaAs のヘテロ構造を縦型に加工して作られる量子ドットの模式図。AlGaAs がトンネル障壁を、InGaAs が円盤上の量子ドットを形成する。量子ドットのまわりに金属のゲート電極がつけられ、離散エネルギー準位を上下することができる。(b) 2次元放物線によく近似される閉じ込めポテンシャルとエネルギー準位の模式図。(c) 電子数 $N = 2, 3, 4$ の電子状態。四角形は下から3つの量子準位を表す。

て、その閉じ込めポテンシャルは2次元調和ポテンシャルによく近似される [図 2(b)]。量子ドット中の1体部分の Hamiltonian は

$$H_{\text{dot},0} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2 + y^2),$$

m は有効質量 (GaAs の伝導帯の場合、真空中の電子の質量の 0.067 倍) である⁴。この Hamiltonian の与える離散エネルギー準位は、

$$\varepsilon_{n_x, n_y} = \hbar\omega_0(n_x + n_y + 1) \quad (n_x, n_y = 0, 1, 2, 3, \dots).$$

最低エネルギー準位は $\hbar\omega_0$ で、量子数 $(n_x, n_y) = (0, 0)$ が対応する。次の準位 $2\hbar\omega_0$ は2重に縮退 [(n_x, n_y) = (1, 0), (0, 1)]、その次の準位 $3\hbar\omega_0$ は3重に縮退 [(n_x, n_y) = (2, 0), (1, 1), (0, 2)]、…、と「殻構造」を成す。

量子ドットに電子を入れていくとき、電子数が $N = 3$ までは、エネルギー準位を下から順番に占有する。が、電子数 $N = 4$ のときは、縮退準位を2つの電子がスピンをそろえて占有し、スピン3重項 ($S = 1$) を形成する [図 2(c)]。これは交換相互作用によってエネルギーを得るためであり、「フント則」として知られている。これは constant interaction model では説明することができない効果であり、電子間相互作用を量子力学的に考慮する必要がある。このスピン3重項は、次節で述べるクーロン振動の磁場依存性の測定で確認されている。

エネルギー準位の殻構造やフント則のように、量子ドット中の電子状態は、原子のそれに類似している。原子の周期律表では、原子番号の増加とともに $1s, 2s, 2p, \dots$ の軌道が順番に詰まっていく。例えば原子番号8のO (酸素) 原子の電子状態は $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$ であるが、 $2p$ の準位は3重に縮退しているため、フント則によって高スピン状態 ($S = 1$) が出現する。この原子との類似性から、量子ドットはしばしば「人工原子」と呼ばれる。

⁴ 量子ドットのサイズは数 10~100 nm で、結晶格子の間隔に比べて非常に大きい。電子の波動関数は、格子の周期で振動する成分を含んだブロッホ関数であるが、格子間隔程度の激しい振動成分を除いて考えている (有効質量近似)。この Hamiltonian は包絡関数に対するものである。 z 方向の厚さは、 xy 面内のサイズよりずっと小さく、最低準位を常に占有するものとして無視している。

2.3 磁場中の人工原子

円盤上の量子ドットに垂直に一様な磁場 \mathbf{B} をかけた場合を考えよう。1体部分の Hamiltonian は

$$H_{\text{dot}} = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2.$$

磁場の効果をベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ で取り入れている: $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$. 磁場は Zeeman 効果によってスピン \uparrow, \downarrow のエネルギーを分裂させるが ($E_Z = g\mu_B B/2$, g は g 因子、 μ_B はボーア磁子)、GaAs 中では g 因子が 0.4 と小さいためにこの効果は弱磁場では無視できる。

この Hamiltonian の固有値、固有状態は解析的に求めることができる。エネルギー準位は

$$\varepsilon_{n,m} = \hbar\Omega(B)(2n + |m| + 1) - \frac{1}{2}\hbar\omega_c m,$$

$$\Omega(B) = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2/4},$$

で与えられる。ここで n は動径方向の量子数 ($n = 0, 1, 2, \dots$)、 m は角運動量の量子数 ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)、 $\omega_c = eB/m$ はサイクロトロン振動数である。図 3(a) にエネルギー準位の磁場依存性を図示したが、これを Darwin-Fock diagram と呼ぶ。

量子ドットに N 個の電子を入れたとき、電子間にはたらくクーロン相互作用を厳密対角化の方法によって取り入れて、電子状態を数値的に計算することができる⁵ [4]。基底状態のエネルギー E_N を計算し、electro-chemical potential, $\mu_N = E_N - E_{N-1}$, を求める。それを磁場の関数として図 3(b) に示した。

μ_1, μ_2 の磁場依存性は、図 3(a) の準位 $(n, m) = (0, 0)$ のそれと定性的に一致し、これは 1 番目、2 番目の電子が最低準位 $(0, 0)$ を占有することを示している。 μ_3, μ_4 の磁場依存性は準位 $(0, 1)$ の振舞いと (ゼロ磁場付近を除いて) 一致する。 μ_5 と μ_6 を見ると、5 番目、6 番目の電子が低磁場では準位 $(0, -1)$ を占有し、 $\omega_c/\omega_0 = 0.6$ 付近から $(0, 2)$ を占めることが分かる。

μ_4, μ_5 には、ゼロ磁場付近にカスプが現れるが、それは前節で説明したフント則のためである。 $N = 4$ の基底状態を図 3(b) の右上図に示した。 $B = 0$ の近傍ではほぼ縮退した 2 つの準位, $(0, 1)$, $(0, -1)$, を電子が 1 個ずつ占有し、スピン 3 重項状態 ($S = 1$) となる。磁場をかけるとそれらの準位は分裂するため、ある値よりも高磁場では $(0, 1)$ を 2 個の電子が占有したスピン 1 重項状態 ($S = 0$) に基底状態が転移する。この E_4 の特異性が、 $\mu_4 = E_4 - E_3$ および $\mu_5 = E_5 - E_4$ に反映される。同様に、 μ_6, μ_7 の $\omega_c/\omega_0 = 0.6$ 辺りのカスプは、 $N = 6$ の基底状態が $(0, -1)$ と $(0, 2)$ の準位交差の近傍でスピン 3 重項になるためである。

図 3(b) の μ_N の磁場依存性は、クーロン振動の実験結果とよく一致し、フント則が実証された。

以上の人工原子の性質は、(constant interaction model) + (縮退準位の近傍でのフント則) で定性的に理解される。が、磁場をさらに増やすと状況が変わる。高磁場下では準位間隔が非常に小さくなり、 $\omega_c \gg \omega_0$ では「ランダウ準位」にほとんど縮退する。クーロン相互作用が準位間隔に比べて大きくなると、離散準位が下から順に詰まっていく「一電子描像」は成立しない。例えば、 $N = 2$ の基底状態は、低磁場では $(0, 0)$ に 2 個の電子が詰まったスピン 1 重項であるが、高磁場では $(0, 0)$, $(0, 1)$ に 1 つずつ電子が詰まってスピン 3 重項となる。交換相互作用に加えて、異なる軌道に入ることで電子が互いに避けあう「相関エネルギー」を得するためである。この電子相関に

⁵ N 個の電子に対する Hilbert 空間の部分空間を考え、電子間相互作用も含めた Hamiltonian を対角化する計算方法。例えば 4 個の電子を下から 15 番目までの 1 電子準位のどれかにつめる状態の数は、 $S_z = 0$ の空間に制限すると $({}_{15}C_2)^2 = 11025$, したがって 11025×11025 の行列を対角化することになる。(全角運動量の保存則を用いると、行列の次元を減らすことができる。)「厳密対角化」と言っても Hilbert 空間を制限する近似をするので、基底の数が十分かどうかをチェックする必要がある。

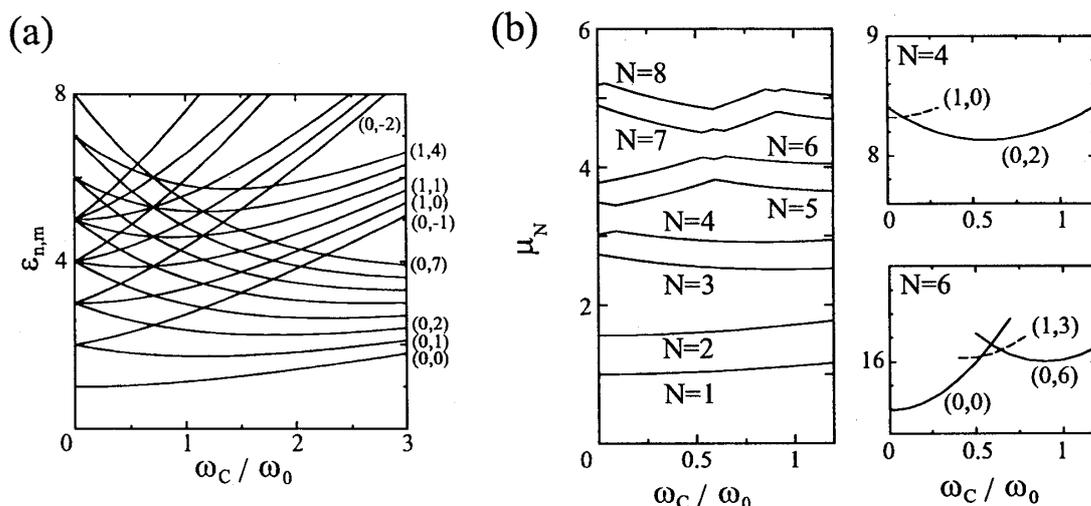


図 3: (a) 2次元放物線ポテンシャル中の電子のエネルギー準位の磁場依存性。 (n, m) は動径方向と角運動量の2つの量子数を表す。縦軸 $\epsilon_{n,m}$ の単位は $\hbar\omega_0$ 、横軸の $\omega_c = eB/m$ はサイクロトロン振動数。(b) 電子間のクーロン相互作用を数値的に取り入れた計算結果。左図は electro-chemical potential μ_N 、右図はエネルギー E_N ($N = 4, 6$) の磁場依存性。縦軸の単位はいずれも $\hbar\omega_0$ 。右図では各状態に (全スピン S , 全角運動量 M) を示した。

起因する基底状態の転移は実験でも観測されている⁶。電子相関の効果が重要となる高磁場領域については、「分数量子ホール効果」とも関係して研究が進行中である。

2.4 電気伝導度の計算

クーロン振動の電流ピークを詳細にみるため、量子ドット中の1つの準位を流れる電気伝導度を計算する。モデルとして、Impurity Anderson model と呼ばれる次の Hamiltonian を考える。

$$H = H_{\text{leads}} + H_{\text{dot}} + H_T, \quad (2)$$

$$H_{\text{dot}} = \sum_{\sigma} \epsilon_0 d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} d_{\uparrow}, \quad (3)$$

$$H_{\text{leads}} = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{\alpha,k\sigma}^{\dagger} c_{\alpha,k\sigma}, \quad (4)$$

$$H_T = \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k\sigma} (V_{\alpha} c_{\alpha,k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.}). \quad (5)$$

ここで $c_{\alpha,k\sigma}^{\dagger}$, $c_{\alpha,k\sigma}$ はリード $\alpha = L, R$, 運動量 k , スピン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ の電子の生成・消滅演算子、 d_{σ}^{\dagger} , d_{σ} はドット中のスピン σ の電子の生成・消滅演算子を表す。リード α 中、伝導電子は連続的なエネルギー準位をフェルミ準位 μ_{α} まで占める。 H_{dot} では、2個の電子が準位 ϵ_0 を占めたときのクーロン斥力 U を取り入れている。 H_T はドットとリード間のトンネル結合を表す tunnel Hamiltonian である。

本節では 電子間相互作用がない場合 ($U = 0$) について、電気伝導度の厳密な表式を導出する⁷。

⁶L. P. Kouwenhoven, T. H. Oosterkamp, M. W. S. Danoesastro, M. Eto, D. G. Austing, T. Honda and S. Tarucha, Science 278, 1788 (1997).

⁷ $U \neq 0$ の場合は、 U について平均場 (Hartree-Fock) 近似、グリーン関数の decoupling 近似、摂動展開やくりこみ群の方法 (または U は厳密に扱い、 H_T を摂動で取り入れて master 方程式を作る) などによって計算される。

講義ノート

H_T を摂動と考え、リード L から R への伝導を計算する。一般に始状態 $|\text{init}\rangle$ から終状態 $|\text{fin}\rangle$ への遷移確率 P は、

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \text{init} | \hat{T} | \text{fin} \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{\text{fin}} - \varepsilon_{\text{init}}), \quad (6)$$

$$\hat{T} = H_T + H_T \frac{1}{\varepsilon - H_0 + i\delta} H_T + H_T \frac{1}{\varepsilon - H_0 + i\delta} H_T \frac{1}{\varepsilon - H_0 + i\delta} H_T + \dots, \quad (7)$$

ここで $H_0 = H_{\text{leads}} + H_{\text{dot}}$, \hat{T} は T 行列と呼ばれる。 $\hat{T} = H_T$ と近似すると、 P はフェルミの黄金律に一致する。リード L から R への電子のトンネル確率は

$$\Gamma_{L \rightarrow R} = 2 \sum_k \sum_{k'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle Rk' | \hat{T} | Lk \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{Rk'} - \varepsilon_{Lk}) f(\varepsilon_{Lk} - \mu_L) [1 - f(\varepsilon_{Rk'} - \mu_R)]. \quad (8)$$

$f(\varepsilon) = [1 + \exp(\varepsilon/k_B T)]^{-1}$ はフェルミ分布関数、右辺最初の因子 2 は電子のスピンに因る。電流は

$$I = e(\Gamma_{L \rightarrow R} - \Gamma_{R \rightarrow L}), \quad (9)$$

ただし $eV = \mu_L - \mu_R$, と書かれる。

T 行列はグリーン関数 \hat{G} を用いて計算することができ (補遺 A)、結果は

$$\begin{aligned} \langle Rk' | \hat{T} | Lk \rangle &= \langle Rk' | H_T + H_T \hat{G} H_T | Lk \rangle = V_R^* \langle d | \hat{G} | d \rangle V_L, \\ \langle d | \hat{G} | d \rangle &= \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 + i\Gamma}. \end{aligned}$$

電流の表式, (8), (9), に代入すると電気伝導度 G は

$$G = \frac{dI}{dV} = \frac{2e^2}{h} \int \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2} \left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \quad (10)$$

と求められる。ここで $\Gamma_\alpha = \pi\nu|V_\alpha|^2$ ($\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R$),

$$-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{4k_B T} \frac{1}{\cosh^2[(\varepsilon - \mu)/2k_B T]}$$

($eV \rightarrow 0$ で $\mu_L = \mu_R = \mu$ とした) は中心 μ , 幅 $k_B T$ のピーク関数である。

式 (10) の右辺の被積分関数は、幅 Γ のローレンツ関数と、幅 $k_B T$ の関数 $[-\partial f(\varepsilon)/\partial \varepsilon]$ の積である。 $k_B T \ll \Gamma$ の場合、後者をデルタ関数 $\delta(\varepsilon - \mu)$ に置き換えることができ、したがって

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(\mu - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2}. \quad (11)$$

これは Breit-Wigner 型の共鳴を示し、 $\varepsilon_0 - \mu = 0$ で最大値

$$G(\mu = \varepsilon_0) = \frac{2e^2}{h} \cdot \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \quad (12)$$

をとる。2つのトンネル障壁が対称な場合 ($\Gamma_L = \Gamma_R$), 非対称パラメーターは $4\Gamma_L \Gamma_R / (\Gamma_L + \Gamma_R)^2 = 1$ となるので $G = 2e^2/h$, これは Landauer の公式より透過率 $T = 1$ であることを意味する。一方、クーロン振動のピーク幅は Γ で与えられる。この電気伝導を「共鳴トンネル (resonant tunneling)」と呼ぶ。

$k_B T \gg \Gamma$ の場合は、式 (10) の右辺で

$$\frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2} \rightarrow \frac{4\pi\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$$

の置き換えをおこない、

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma} \frac{1}{2k_B T} \frac{1}{\cosh^2[(\mu - \varepsilon_0)/2k_B T]} \quad (13)$$

このときは電流ピークの幅は温度で決定する。ピークの中心 $\mu = \varepsilon_0$ から $k_B T$ 程度離れると、電気伝導度は指数関数で急激に減少する。この電気伝導は、電気抵抗が $R = 1/G \propto (1/\Gamma_L) + (1/\Gamma_R)$ と2つの抵抗の直列で書くことができることから、リード L から量子ドット、量子ドットからリード R へと incoherent に伝導する “sequential tunneling” として理解することができる⁸。

3 量子ドットにおける近藤効果

3.1 Cotunneling

図4(a)の実線は、電気伝導度のゲート電圧依存性(クーロン振動)を示す。前章で見たように、ピークとピークの間のカールブロッケード領域では、電子数 N が良い量子数となり、それが V_g とともに1つずつ増加する。Constant interaction model が適用できる場合、基底状態のスピンは $S = 1/2$ (N が奇数) または $S = 0$ (N が偶数) である。

本章ではクーロンブロッケード領域での伝導特性に着目する。この領域ではリードから量子ドット、量子ドットからリードへの sequential な電気伝導は生じないため、量子力学の「仮想状態」を介した輸送過程が電気伝導への主な寄与をする。これを式(2)の Impurity Anderson model ($U \neq 0$), $N = 1$ の領域で考察する。

$E_0 = 0$, $E_1 = \varepsilon_0$, $E_2 = 2\varepsilon_0 + U$ より electro-chemical potential は $\mu_1 = \varepsilon_0$, $\mu_2 = \varepsilon_0 + U$. $N = 1$ のクーロンブロッケードの条件は、リードから量子ドットに1電子を加えるエネルギーを E^+ , 量子ドットから1電子を取り去るエネルギーを E^- ,

$$E^+ = \mu_2 - \mu = \varepsilon_0 + U - \mu, \quad E^- = \mu - \mu_1 = \mu - \varepsilon_0,$$

として $E^\pm \gg \Gamma, k_B T$ である。

このブロッケード領域において、ドット中の電子がリード R にトンネルすると系のエネルギーは E^- 高くなるが、量子力学ではこの状態は \hbar/E^- の時間の間許される。その間にリード L から電子がドットに入れば、系のエネルギーは元に戻り、電子1個がリード L から R に移ったことになる。または、最初にリード L から電子がドットに入ってエネルギーが E^+ だけ上昇し、その直後に電子が1つドットからリード R にトンネルしても良い。それぞれの過程のトンネル振幅は、 H_T の2次摂動で

$$-V_L^* V_R / E^-, \quad V_L^* V_R / E^+$$

で与えられる。このような過程は2つ以上の電子が関与するために “cotunneling” と呼ばれる。

3.2 sd Hamiltonian と近藤効果

この cotunneling による電気伝導度が、近藤効果によって低温で異常に増大する [図4(a), 破線]。近藤効果はドットの電子数 N が奇数の場合 ($S = 1/2$) に生じ、通常 N が偶数の場合 ($S = 0$) には見られない。

⁸この電気伝導度は、 H_T の最低次の近似で master 方程式を立てて求めた結果と一致する。Master 方程式の方法を用いると、量子ドット内の電子間相互作用を厳密に取り入れることができる: C. W. Beenakker, Phys. Rev. B 44, 1646 (1991); 文献 [4].

講義ノート

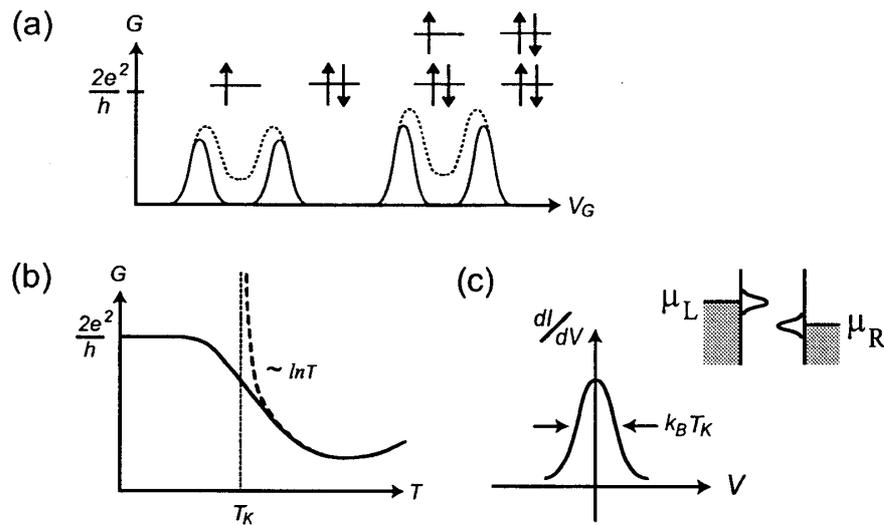


図 4: 量子ドットにおける近藤効果による諸現象の概念図。(a) 電気伝導度 G のゲート電圧依存性 (クーロン振動)。実線は $T > T_K$, 点線は $T < T_K$ 。後者では、奇数電子の谷でのみ近藤効果によって G が増大する。(b) 近藤効果による G の温度依存性。弱結合領域での摂動計算の結果を破線で示す。(c) $T < T_K$ における微分伝導度 dI/dV のバイアス電圧 V 依存性。挿入図は、有限バイアス下で 2 つの近藤共鳴準位が互いに離れる様子を示す。

前節の $N = 1$ の場合、ドット中のスピンは \uparrow か \downarrow かの 2 つの内部自由度を持つ。最初ドットの状態がスピン \uparrow だったとしよう。Cotunneling によってドット中の \uparrow の電子が出て、リードから \downarrow の電子が入ると、ドットの状態はスピン \downarrow に変化する。この内部自由度と spin-flip 過程が近藤効果にとって重要であるが、それを記述する有効 Hamiltonian (Kondo Hamiltonian, sd Hamiltonian などと呼ばれる) を導出する。

まず式 (2) において、2 つのリードの自由度を消去する。 $c_{L,k\sigma}$ と $c_{R,k\sigma}$ に対してユニタリ変換

$$c_{k\sigma} = (V_L^* c_{L,k\sigma} + V_R^* c_{R,k\sigma})/V, \quad \bar{c}_{k\sigma} = (-V_{R,i} c_{L,k\sigma} + V_{L,i} c_{R,k\sigma})/V,$$

($V = \sqrt{|V_L|^2 + |V_R|^2}$) を行くと、モード $c_{k\sigma}$ は量子ドットとトンネル振幅 V で結合するが、 $\bar{c}_{k\sigma}^{(i)}$ はドットと全く結合しないので後者を無視することができる⁹。次に H_T の 2 次摂動の範囲で、次の有効 Hamiltonian を導くことができる¹⁰。

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \sum_{kk'} \left[\hat{S}_+ c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \hat{S}_- c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + \hat{S}_z (c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \right]. \quad (14)$$

ここで \hat{S} はドット中のスピン演算子

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

結合定数は $J = V^2(1/E^+ + 1/E^-)$ 。この Hamiltonian はドット中の電子数は $N = 1$ に固定され、スピン自由度のみが存在する低エネルギー (ε を伝導電子のエネルギーとして $|\varepsilon - \mu| \ll E^\pm$) の現象の記述に有効なものである¹¹。

⁹ $H_T = \sum_{k\sigma} [(V_L c_{L,k\sigma}^\dagger + V_R c_{R,k\sigma}^\dagger) d_\sigma + \text{h.c.}] = \sum_{k\sigma} (V c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{h.c.})$ 。もう一つのモード $\bar{c}_{k\sigma}$ は、 $c_{k\sigma}$ に直交するように選ばれよい。量子ドット中の準位が 1 つでリードが 3 本以上ある場合も同様で、1 つのモードのみがトンネル結合する問題に帰着する。

¹⁰ Schrieffer-Wolff 変換と呼ばれるユニタリ変換と等価; 文献 [5] 参照。

¹¹ H_{eff} には spin-flip を伴わない potential 散乱の項も存在する。その項は近藤効果には効かないので省略した。

H_{eff} は、量子ドット中の局在スピン S とリード中のフェルミの海の電子が反強磁性的に結合することを示している。その基底状態はスピン一重項 ($S = 0$) の多体状態であり、「近藤 1 重項状態」と呼ばれる。その束縛エネルギーが近藤温度であり、

$$k_B T_K = D e^{-1/2J\nu} \quad (15)$$

で与えられる (D はリードの伝導電子のバンド幅)¹²。温度が $T \ll T_K$ のとき、この近藤状態が量子ドットの周りに局所的に形成され、ドット中のスピンは完全に遮蔽される。一方、伝導電子は近藤状態を共鳴的に通って伝導できるようになり、電気伝導度は式 (12) まで増大する (ユニタリー極限)。(共鳴幅が $k_B T_K$, 共鳴準位が常にフェルミ準位 μ に一致した共鳴トンネルとして理解される: 3.5 節を参照。)

量子ドットの実験では、様々な形で近藤効果が観測される¹³。(i) クーロン振動では電子数が偶数の谷と奇数の谷が交互に現れる。近藤効果は普通、奇数電子の谷でのみ働き、低温で電気伝導度 G を増加させる [図 4(a), 破線]。(ii) 奇数電子の谷での G の温度依存性は、 $T \sim T_K$ で対数依存性を示す [図 4(b)]。 T の減少とともに G は増加し、 $T \ll T_K$ で $2e^2/h \times (\text{asymmetric factor})$ に収束する¹⁴。(iii) 近藤共鳴準位は $k_B T_K$ 程度の共鳴幅を持つ。2 つの電極間に有限バイアス V をかけると、それぞれのフェルミ準位で形成された共鳴準位が互いに離れるために、微分伝導度 dI/dV は V とともに減少する。その結果、 dI/dV はゼロバイアスを中心とし、幅 $e\Delta V \sim k_B T_K$ を持ったピークを示す [図 4(c)]。(iv) 大きな磁場 B をかけると、Zeeman 効果によってスピン \uparrow, \downarrow のエネルギーが分裂する ($\epsilon_0 \pm E_Z$)。そのためにゼロバイアスでの近藤効果は弱められるが、バイアス電圧が共鳴条件、 $|eV| = 2E_Z$, を満たすと近藤効果が強められる。その結果、 dI/dV のゼロバイアス・ピークは $eV = \pm 2E_Z$ の 2 つのピークに分裂する¹⁵。[ただし、(iii), (iv) は有限バイアス下の非平衡電気伝導特性であり、そのときの近藤効果は理論的にまだ十分解明されていない。]

ここで、量子ドットにおける近藤効果と、金属中の希薄磁性不純物による従来の近藤効果との違いを述べておく。後者の場合、伝導電子は不純物のスピンによって散乱を受け、電気抵抗の原因になる。 T_K より低い温度になると、磁性不純物の周りで近藤状態が形成され、それによって伝導電子は共鳴的に散乱を受ける。その結果、散乱確率が増して電気抵抗が増加する。高温でのフォノンによる電気抵抗と合わせると、抵抗は温度の関数として T_K 付近で極小を示す。量子ドットの場合、高温ではクーロンブロックードによって伝導電子の透過が抑制される。 T_K 以下では近藤状態が形成され、伝導電子はその多体状態を共鳴的に通ってドットを透過するために伝導度が増大する。その結果、電気伝導度が温度の関数として T_K 付近で極小を示す。

3.3 電気伝導度の計算

この節では、sd Hamiltonian (14) を用いて、電気伝導度の計算をおこなう。

弱結合領域 ($T \gg T_K$): 近藤 1 重項状態が形成されていない領域では、 H_{eff} 中の J の項 (H_J で表す) を摂動として扱うことができる。T 行列の表式 (7) で、 H_T を H_J に、 H_0 を $\sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ に置き換える。今度は厳密解を得ることができないので、 H_J での摂動展開を考える。これは量子力

¹² H_{eff} による記述が正当化される条件から $D = \sqrt{E^+ E^-}$. cf. F. D. M. Haldane, J. Phys. C 11, 5015 (1978).

¹³ 量子ドットにおける近藤効果の最初の観測は D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav and M. A. Kastner, Nature (London) 391, 156 (1998).

¹⁴ W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha and L. P. Kouwenhoven, Science 289, 2105 (2000).

¹⁵ T. Inoshita, Science 281, 526 (1998). 3.5 節、5 章も参照。

講義ノート

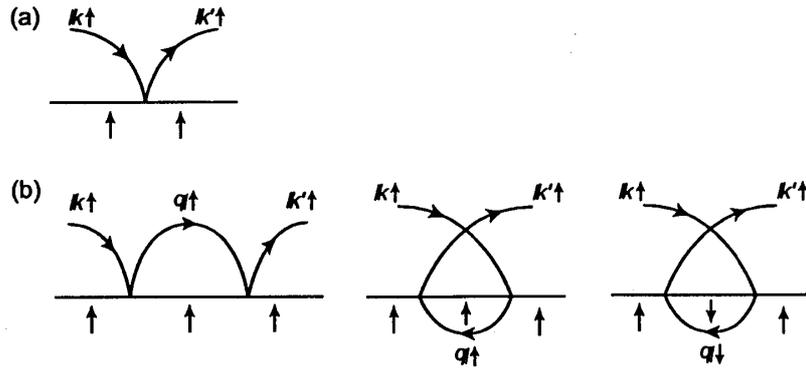


図 5: T 行列 $\langle \uparrow; k' \uparrow | \hat{T} | \uparrow; k \uparrow \rangle$ のダイアグラム: (a) H_J の 1 次、(b) H_J の 2 次。水平の直線は量子ドットのスピン状態を表す。右向きの曲線は電子の伝導を、左向きのそれはホール伝導に相当する。

学の教科書にある散乱問題の Born 近似と同様であるが (T 行列の ε は入射電子のエネルギー)、今の問題ではフェルミの海が存在する点が真空での散乱問題と異なる。

以下では、伝導電子 $|k \uparrow\rangle$ が $|k' \uparrow\rangle$ に散乱される確率を考える。量子ドット中のスピンの初期状態、終状態はともに \uparrow とする。 H_J の 1 次の寄与は

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

これは 3.1 節の cotunneling に対応する (J は H_T の 2 次であることに注意)。この過程を図 5(a) のダイアグラムで表す。

H_J の 2 次、 $\langle \uparrow; k' \uparrow | \hat{T}^{(2)} | \uparrow; k \uparrow \rangle$, には 3 つの過程が寄与する [図 5(b)]。最初の 2 つのダイアグラムはスピン反転を伴わない: 中間状態で電子が伝播するか、電子ホール対が生成されてホールが伝播した後に入射電子と対消滅する。両者を加えると

$$\begin{aligned} & \sum_q (J/2)^2 \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_q + i\delta} [1 - f(\varepsilon_q)] + \sum_q (J/2)^2 \frac{-1}{\varepsilon - (2\varepsilon - \varepsilon_q) + i\delta} f(\varepsilon_q) \\ &= \sum_q (J/2)^2 \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_q + i\delta} = (J/2)^2 \int_{-D}^D d\varepsilon' \nu \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon' + i\delta} = (J/2)^2 \nu \left[\ln \left| \frac{D + \varepsilon}{D - \varepsilon} \right| - i\pi \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

ここで、リード中の状態密度はバンド $[-D, D]$ で一定値 ν であると仮定した。フェルミ分布関数 $f(\varepsilon_q)$ が互いに cancel され、得られた結果に異常 (発散) は生じない¹⁶。

図 5(b) の 3 つ目のダイアグラムでは、中間状態でスピン反転が生じている。これに対応する電子伝播のダイアグラムは存在しないことに注意されたい [図 5(b) の最初のダイアグラムで q, \uparrow を q, \downarrow にすると、量子ドットのスピンは $S_z = 3/2$ にしなければならない!]。計算結果は

$$\begin{aligned} \sum_q J^2 \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_q + i\delta} f(\varepsilon_q) &= J^2 \nu \int_{-D}^D \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon' + i\delta} f(\varepsilon') d\varepsilon \\ &\approx \begin{cases} -J^2 \nu \ln |\varepsilon|/D & \text{for } |\varepsilon| \gg k_B T \\ -J^2 \nu \ln k_B T/D & \text{for } |\varepsilon| \ll k_B T. \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

この対数発散は、フェルミ分布関数のフェルミ端異常に起因するものである (J. Kondo, 1964)¹⁷。

¹⁶ここで示したように、量子ドット中のスピンの $S = 0$ で内部自由度がない場合、フェルミの海があっても発散は起きず、近藤効果は見られない。

¹⁷J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).

H_J の2次の計算で対数発散が現れることがわかった。この発散はすべての次数で現れるが、各次数での最強発散項を足し合わせると

$$\langle \uparrow; k' \uparrow | \hat{T} | \uparrow; k \uparrow \rangle = \frac{J/2}{1 + 2J\nu \ln k_B T/D} = \frac{J/2}{2J\nu \ln(T/T_K)}$$

ただし $|\varepsilon| \ll k_B T$ のとき (A. A. Abrikosov, 1965)。この結果は $T = T_K$ で発散することから、この摂動計算は $T \gg T_K$ で有効であることがわかる。

この T 行列を使い、また $|k \downarrow\rangle$ の散乱や始状態と終状態でスピンの異なる過程をすべて合わせると、2.4 節と同様にして電気伝導度を計算することができる。結果は

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \frac{3\pi^2}{16} \frac{1}{[\ln(T/T_K)]^2}. \quad (18)$$

強結合領域 ($T \ll T_K$): T_K よりも十分低温では、量子ドット中の局在スピンは完全に遮蔽され、フェルミ流体論が成立することが知られている。それによると、電気伝導度は

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} [1 - \pi^2(T/T_K)^2]. \quad (19)$$

2つの極限での電気伝導度、式 (18), (19), から、すべての温度領域で

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \mathcal{F}(T/T_K) \quad (20)$$

と書かれることが示唆される。ここで $\mathcal{F}(x)$ はある universal な関数で、 $\mathcal{F}(x) \approx 1 - \pi^2 x^2$ ($x \ll 1$), $\mathcal{F}(x) \approx (3\pi^2/16)(\ln x)^{-2}$ ($x \gg 1$)。式 (20) は厳密に導出された式ではないが、数値繰り込み群などの計算からよく成り立つことがわかっている。すなわち、近藤効果の顕著な特徴として、「1つの relevant なエネルギースケール $k_B T_K$ が存在し、物理量は $\max(T, E_Z)/k_B T_K$ で決定する」¹⁸、という普遍性を挙げるができる。近藤温度 T_K の値は、 J, D などを通じて系のミクロな詳細に依存して決定される。

3.4 スケーリング理論

近藤効果の特徴付ける唯一のエネルギースケール、近藤温度、はスケーリング法 (P. W. Anderson による “Poor man’s scaling”) によって求めることができる。

弱結合領域での摂動計算 (H_J の2次) に戻る。式 (17) のバンド幅 D を含んだ対数発散は、高エネルギーの励起状態からの寄与の重要性、およびエネルギーについてのスケール不変性を示唆する。そこで、エネルギー・スケール (バンド幅 D) を $D \rightarrow D - |\delta D|$ に変化させ [図 6(a)]、低エネルギーの物理現象が不変になるように J の大きさを $J + \delta J$ に renormalize する、スケール変換を考える。

H_J の2次までの計算式

$$\langle \uparrow; k' \uparrow | \hat{T}^{(1)} + \hat{T}^{(2)} | \uparrow; k \uparrow \rangle = \frac{J}{2} + \sum_q J^2 \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_q + i\delta} f(\varepsilon_q)$$

¹⁸Zeeman 効果 E_Z がある場合も含めた。さらに有限バイアスの場合も含めて、「物理量は $\max(T, eV, E_Z)/k_B T_K$ で決定する」という議論もある: A. Kaminski, Yu. V. Nazarov and L. I. Glazman, Phys. Rev. B **62**, 8154 (2000).

講義ノート

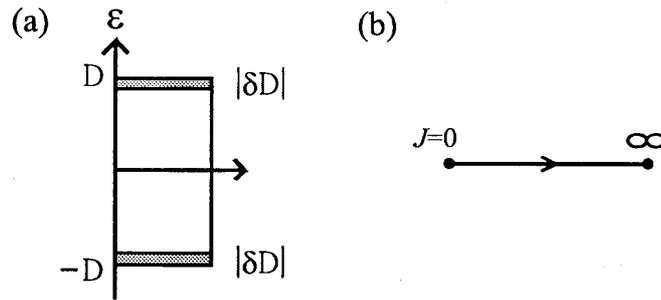


図 6: (a) 近藤効果のスケーリング理論において、バンド幅を D を $D - |\delta D|$ に変化させる。リード中の状態密度は、本図で示したように一定値 ν と仮定する。(b) スケール変換による結合定数 J の renormalization flow. エネルギースケール D を小さくするにつれて、強結合極限 $J = \infty$ (近藤 1 重項状態の形成に対応) の fixed point に向かって系は発展する。

の第 2 項の和において¹⁹、バンド幅を $|\delta D|$ だけ減少すると $-D \leq \varepsilon_q \leq -D - |\delta D|$ からの寄与がなくなる。そこで

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\delta J &= \sum_{-D \leq \varepsilon_q \leq -D - |\delta D|} J^2 \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_q + i\delta} f(\varepsilon_q) \\ &= \sum_{-D \leq \varepsilon_q \leq -D - |\delta D|} J^2 \frac{1}{\varepsilon - (-D) + i\delta} f(-D) \\ &= \nu |\delta D| \frac{J^2}{D}, \end{aligned}$$

($k_B T \ll D$ を仮定) とすれば $|\varepsilon| \ll D$ の電子の散乱確率は変わらない。 $\delta D = -|\delta D|$ であるから、スケーリング方程式

$$\frac{dJ}{dD} = -2\nu \frac{J^2}{D} \quad (21)$$

が得られる。

(D, J) から (\tilde{D}, \tilde{J}) へ有限量変化させた結果は、式 (21) を積分して

$$-\int \frac{dJ}{J^2} = 2\nu \int \frac{dD}{D},$$

したがって

$$\frac{1}{\tilde{J}} - \frac{1}{J} = 2\nu \ln \frac{\tilde{D}}{D}.$$

ゆえに $\tilde{D}e^{-1/2\nu\tilde{J}} = De^{-1/2\nu J} \equiv k_B T_K$ と T_K がスケール不変量になることがわかる。 D を小さくするにつれて、 T_K が不変になるよう J は増大する。図 6(b) にこの renormalization flow を示す。 $D = k_B T_K$ のとき、 $J = \infty$ の fixed point に到達する。

実際には、式 (21) は H_J の 2 次摂動で得られたものであり、 $D \gg T_K$ のときのみ成立する。が、この簡便なスケーリング法によって、近藤温度の指数部分は正確に求められる。スケーリング変換を厳密に実行する計算方法が、Wilson による数値繰り込み群 [Numerical renormalization Group (NRG)] の方法であり [8]、それは近藤効果を計算する最も信頼度の高い計算方法である。

¹⁹この $\hat{T}^{(2)}$ の表式では対数発散しない項、式 (16)、を省略している。そのような項はスケール変換で影響されないことを確かめて欲しい。

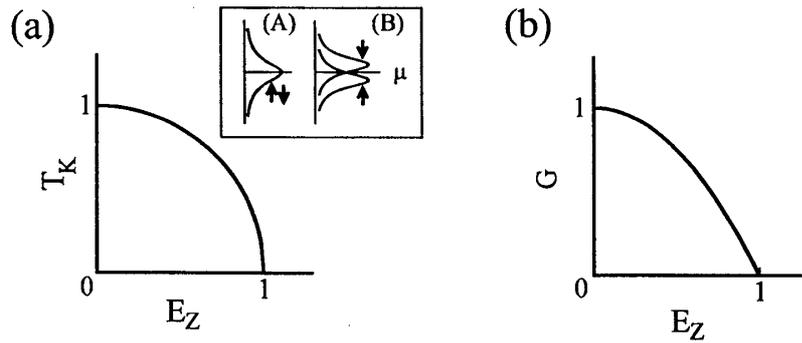


図 7: 近藤効果の平均場理論による計算結果。(a) 近藤温度 T_K , (b) 電気伝導度 G ($T = 0$) の Zeeman energy E_Z 依存性。 T_K と E_Z の単位は $T_K(0) = D \exp(-1/2\nu J)$, G の単位は $(2e^2/h) \cdot 4\Gamma_L\Gamma_R/(\Gamma_L + \Gamma_R)^2$. (a) の挿入図: リードのフェルミ準位 μ の近傍に形成される近藤共鳴状態: (A) 磁場がない場合、(B) ある場合。共鳴幅は T_K となる。

3.5 近藤効果の平均場近似

近藤効果は多体問題の一つであり、文献ではいろいろな計算方法が使われる。ここで述べたもの以外に、Impurity Anderson model の U についての摂動計算、slave boson 法の平均場理論、Non-Crossing Approximation (NCA)²⁰、グリーン関数の decoupling 近似や self-energy の extrapolation での近似、などがある。本節では、Yoshimori らによる pseudofermion の平均場理論を紹介する²¹。この方法によって、近藤共鳴状態の直感的な理解が得られる。

sd Hamiltonian (14) において、量子ドット中のスピン状態 $|\sigma\rangle$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) を生成 (消滅) する pseudofermion 演算子 f_σ^\dagger (f_σ) を導入する。スピン演算子 \hat{S} は $\hat{S}_+ = f_\uparrow^\dagger f_\downarrow$, $\hat{S}_- = f_\downarrow^\dagger f_\uparrow$, $\hat{S}_z = (f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - f_\downarrow^\dagger f_\downarrow)/2$, 式 (14) は

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + J \sum_{kk'} \sum_{\sigma, \sigma'} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma'} c_{k'\sigma'}^{\dagger} c_{k\sigma}, \quad (22)$$

と書き換えられる。ただし

$$f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} + f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} = 1 \quad (23)$$

という条件がつく。式 (22) では Zeeman 効果も取り入れて $E_{\uparrow, \downarrow} = \varepsilon_0 \pm E_Z$ とした。

ここで、近藤 1 重項状態が形成されている場合 ($T \ll T_K$) を考える。量子ドット中のスピン $|\sigma\rangle = f_{\sigma}^{\dagger}|0\rangle$ とフェルミの海 $\Pi c_{k\sigma}^{\dagger}|0\rangle$ の spin-singlet の結合を平均場 $\langle f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle$ で表し、そのまわりの揺らぎを無視する近似をする²²:

$$f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma'} c_{k'\sigma'}^{\dagger} c_{k\sigma} \rightarrow \langle f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle f_{\sigma'} c_{k'\sigma'}^{\dagger} + \langle f_{\sigma'} c_{k'\sigma'}^{\dagger} \rangle f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}$$

²⁰N. E. Bickers, Rev. Mod. Phys. **59**, 845 (1987).

²¹A. Yoshimori and A. Sakurai, Suppl. Prog. Theor. Phys. **46**, 162 (1970). この方法は Kondo lattice 系にも応用されている: C. Lacroix and M. Cyrot, Phys. Rev. B **20**, 1969 (1979).

²²この平均場近似は、 $U = \infty$ の Anderson モデルでの slave boson 法による平均場近似と等価である。Slave boson 法では、量子ドット中にホールがある状態を生成・消滅演算子 b^\dagger, b で記述する。条件 (23) に相当する式は $f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} + f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} + b^\dagger b = 1$, 量子ドット中の電子の生成・消滅演算子はそれぞれ $d_{\sigma}^{\dagger} = f_{\sigma}^{\dagger} b$, $d_{\sigma} = f_{\sigma} b^\dagger$ と書かれる。平均場近似では、tunnel Hamiltonian $H_T = V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.}) = V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} b^\dagger + \text{h.c.})$ において、 $b^\dagger, b \rightarrow \langle b \rangle$ と平均値で置き換える (boson 場の coherent state に相当)。cf. N. Read and D. M. Newns, J. Phys. C **16**, 3273 (1983); *ibid.*, **16**, L1055 (1983).

講義ノート

スピン 1 重項の “order parameter,”

$$\langle \Xi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k (\langle f_{\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} \rangle + \langle f_{\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow} \rangle) \quad (24)$$

を用いると、平均場近似の Hamiltonian は

$$H_{MF} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} - \sum_{k,\sigma} (\sqrt{2}J \langle \Xi \rangle c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \text{h.c.}) + 2J |\langle \Xi \rangle|^2 + \lambda \left(\sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} - 1 \right). \quad (25)$$

ここで条件式 (23) を Lagrange の未定乗数 λ で取り入れた。 H_{MF} の期待値が最小になるように $\langle \Xi \rangle$ を求める (補遺 B)。以下では $T = 0$ とする。

まず Zeeman 効果がない場合を考える: $E_{\uparrow} = E_{\downarrow} = \varepsilon_0$. 2.4 節の H ($U = 0$) と比較すると、 H_{MF} は「エネルギー準位」が $\tilde{E}_0 = \varepsilon_0 + \lambda$, 「トンネル結合」が $\tilde{V} = -\sqrt{2}J \langle \Xi \rangle$, の共鳴トンネルを表すことがわかる。したがって、近藤共鳴の中心は \tilde{E}_0 , 共鳴幅は $\tilde{\Delta}_0 = \pi\nu |\tilde{V}|^2$ である。また、条件 (23) は pseudofermion の数が 1 で half-filling, すなわち $\tilde{E}_0 = \mu$ を意味する。補遺 B の計算から

$$\tilde{\Delta}_0 = \pi\nu \left| \sqrt{2}J \langle \Xi \rangle \right|^2 = D \exp[-1/2\nu J]. \quad (26)$$

これは式 (15) の $k_B T_K$ に一致する²³。したがって、近藤共鳴状態はフェルミ準位 μ を中心とし、近藤温度を共鳴幅に持つことが導かれる。

Zeeman 効果がある場合 ($E_{\uparrow,\downarrow} = \varepsilon_0 \pm E_Z$) は、spin-up の電子と spin-down の電子の共鳴準位が分裂する: $\tilde{E}_{\uparrow,\downarrow} = E_{\uparrow,\downarrow} + \lambda$ [図 7(a) の挿入図 B]。条件 (23) より $\varepsilon_0 + \lambda = \mu$. 共鳴幅 $\tilde{\Delta}$ は

$$\tilde{\Delta}^2 + E_Z^2 = \tilde{\Delta}_0^2, \quad (27)$$

ここで $\tilde{\Delta}_0$ は Zeeman 効果がない場合の共鳴幅、式 (26), である。近藤温度 T_K をこの共鳴幅 $\tilde{\Delta}$ で定義すると、 T_K は E_Z の増加とともに減少し、 $E_Z = T_K(0)$ でゼロになることがわかる [図 7(a)]。

量子ドットを流れる電気伝導度は、2.4 節と同様に求めることができ

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \left[1 - \left(\frac{E_Z}{T_K(0)} \right)^2 \right]. \quad (28)$$

$E_Z = 0$ のときのユニタリ極限、 $G = (2e^2/h) \times (\text{asymmetric factor})$, は近藤状態を通る共鳴トンネルとして理解される。 $E_Z = 0$ では共鳴の中心が常にフェルミ準位に一致するが、 $E_Z \neq 0$ では共鳴がスピン分裂し、 G が小さくなる。

近藤効果の平均場理論では、量子ドット中のスピンと伝導電子間の coherent な結合を平均場 $\langle \Xi \rangle$ で取り入れた。その結果、条件式 (23) が正確には満たされない (演算子として満たされるべき式であるが、平均値が満たされているに過ぎない)。これは超伝導における平均場理論 (BCS 理論) と類似する。Order parameter は $\langle c^{\dagger} c^{\dagger} \rangle$, $\langle cc \rangle$, を含み、電子数 $N = \sum c^{\dagger} c$ 一定の条件を破ることで、多体の波動関数を表現している。

4 最近の話題から

4.1 軌道準位の縮退と近藤効果

2.3 節で見たように、量子ドットでは軌道準位のエネルギー間隔を磁場をかけることで制御できる。最近の研究で、軌道準位の縮退近傍で近藤効果が増大する現象が見つかった。

²³このモデルでは偶然 $\tilde{\Delta}_0 = k_B T_K$ となったが、一般には数因子だけ異なる。量子ドット中の準位がスピン自由度を含めて N 重に縮退しているとき、平均場近似は $N \rightarrow \infty$ の極限で厳密な結果を与える。

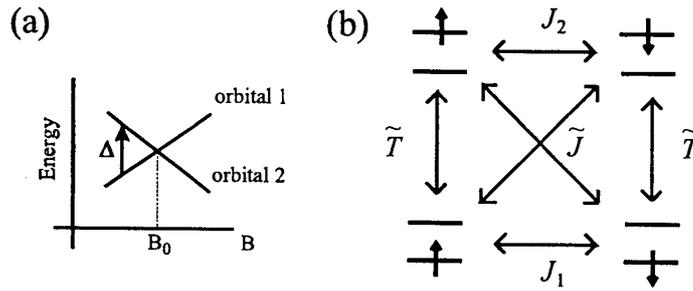


図 8: (a) 量子ドット中の 2 つの軌道のエネルギー準位。準位間隔 Δ は磁場によって制御することができる。(b) 2 つの準位に 1 個の電子が占有した量子ドットの状態、およびそれらの間のフリップ過程。結合定数 $J_1, J_2, \tilde{J}, \tilde{T}$ はいずれも、リード中の伝導電子との 2 次のトンネル過程による。

- (I) ほとんど縮退した 2 つの準位 ($i = 1, 2$) を 1 個の電子が占有する場合: 磁場によってエネルギー間隔 $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ を調整すると [図 8(a)], 縮退点 ($\Delta = 0$) の近傍で大きな近藤効果が見られる²⁴。
- (II) 2 つの準位を 2 個の電子が占有する場合: 基底状態は、準位の縮退点でスピン 3 重項、準位間隔が十分大きいとスピン 1 重項になる。磁場によってそれらの状態のエネルギー差、 $\Delta = E_{S=0} - E_{S=1}$, を制御すると [図 9(a)], $\Delta = 0$ で近藤効果が増大する²⁵。

いずれの場合も、Zeeman 効果は近藤温度よりも十分小さく ($E_Z \ll k_B T_K$)、無視することができる。

まず (I) について、2.2 節と同様に有効 Hamiltonian を作る。量子ドット中の状態は、軌道とスピンの 2 つの index で表される: $\mu = (i, S_z)$ 。Tunnel Hamiltonian²⁶

$$H_T = \sum_k \sum_{\mu} V_i (c_{k\mu}^{\dagger} d_{\mu} + \text{h.c.})$$

の 2 次の摂動で、量子ドットの状態のフリップ過程を計算する。図 8(b) に示した結合定数は²⁷

$$J_1 = V_1^2 / \tilde{E}_C, \quad J_2 = V_2^2 / \tilde{E}_C, \quad \tilde{J} = \tilde{T} = V_1 V_2 / \tilde{E}_C, \quad T = (V_1^2 + V_2^2) / (2\tilde{E}_C),$$

ここで $1/\tilde{E}_C = 1/E^+ + 1/E^-$, また $E^{\pm} \gg |\Delta|$ を仮定している。

2 つの軌道のトンネル結合が等価な場合 ($V_1 = V_2$)、 $J_1 = J_2 = \tilde{J} = \tilde{T} = T \equiv J$ 。このとき、2 つの軌道 $i = 1, 2$ を pseudospin $T_z = \pm 1/2$ で表すと、有効 Hamiltonian は

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k,\mu} \varepsilon_k c_{k,\mu}^{\dagger} c_{k,\mu} + JS \cdot s - \tilde{B} \cdot S. \quad (29)$$

ここで

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} f_{\mu}^{\dagger} \hat{\Sigma}_{\mu\nu} f_{\nu}, \quad s = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \sum_{\mu\nu} c_{k',\mu}^{\dagger} \hat{\Sigma}_{\mu\nu} c_{k,\nu}.$$

²⁴S. Sasaki, S. Amaha, N. Asakawa, M. Eto and S. Tarucha, Phys. Rev. Lett. **93**, 17205 (2004).

²⁵S. Sasaki, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, W. G. van der Wiel, M. Eto, S. Tarucha and L. P. Kouwenhoven, Nature (London) **405**, 764 (2000).

²⁶リード中には 2 つのチャンネルがあり、チャンネル 1 が量子ドット中の軌道 1 と、チャンネル 2 が量子ドット中の軌道 2 と、トンネル結合すると仮定する。これは縦型量子ドットの実験において、電子の横方向の運動の量子数 (円盤状のドットでは角運動量) がトンネル過程で保存することに対応する。また、2.2 節と同様に、2 つのリードに対してチャンネルごとにユニタリー変換をおこない、結合するモードのみを考える。

²⁷この近藤効果には、量子ドットの状態を変えない potential 散乱の一部の項も寄与する。その結合定数を T とした。

講義ノート

$\hat{\Sigma}$ は 15 の成分をもつ、Lie 代数 $su(4)$ の generator である: $\{(\tau_x, \tau_y, \tau_z, I) \otimes (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, I)\} - \{I \otimes I\}$, σ_i (τ_i) はスピン (pseudospin) 空間での Pauli 行列、 I は 2×2 の単位行列。準位間隔 Δ は「磁場」 $\tilde{\mathbf{B}}$ ($\tau_z \otimes I$ 成分が Δ 、他の成分は 0) で表現されている:

$$\tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{S} = \frac{\Delta}{2} \sum_s (f_{1,s}^\dagger f_{1,s} - f_{2,s}^\dagger f_{2,s}).$$

$\tilde{\mathbf{B}} = 0$ のとき (準位の縮退点)、この Hamiltonian はスピンと pseudospin の直積空間における回転に対して不変である [SU(4) 対称性]. $\tilde{\mathbf{B}} \neq 0$ のときは、スピン空間の回転に対してのみ不変で、通常の sd Hamiltonian と同様の SU(2) 対称性をもつ。

Hamiltonian (29) にスケーリング理論を適用してみよう。(i) エネルギースケール D が準位間隔 $|\Delta|$ よりも十分大きい場合 ($D \gg |\Delta|$), 2 つの軌道準位は縮退していると見なせる。スケーリング方程式は

$$dJ/d \ln D = -4\nu J^2. \quad (30)$$

4 つの状態の縮退を反映して、 D の減少とともに J は速いスピードで増加する。(ii) $D \ll |\Delta|$ の場合は、下の準位のみが近藤状態の形成に寄与し、上の準位は無視できる。スケーリング方程式は

$$dJ/d \ln D = -2\nu J^2. \quad (31)$$

これらの方程式から近藤温度を評価する。(i) 縮退点の近傍 [$|\Delta| \ll T_K(\Delta = 0)$] では、式 (30) にしたがって J が増加し、 $J = \infty$ の fixed point まで到達する。このときの近藤温度は

$$T_K(\Delta = 0) = D_0 \exp[-1/4\nu J],$$

ここで D_0 はバンド幅の初期値 (元のバンド幅)。(ii) $|\Delta| \gg D_0$ のときは、式 (31) にしたがうため、近藤温度は

$$T_K(\Delta = \infty) = D_0 \exp[-1/2\nu J].$$

(iii) 中間領域 $T_K(0) \ll |\Delta| \ll D_0$ の場合、まず $D \gg |\Delta|$ の領域では式 (30) にしたがって J が増加する。 D が $|\Delta|$ より十分小さくなると、今度は式 (31) にしたがう。Renormalization flow は、最初 SU(4) Kondo effect の fixed point に向かうが、途中から SU(2) Kondo effect の fixed point に向かい (クロスオーバー)、 $D = T_K(\Delta)$ にてそこに到達する。2 つのスケーリング方程式の解を $D \approx |\Delta|$ でつなげることで次式が得られる。

$$T_K(\Delta) = T_K(0) \cdot (T_K(0)/|\Delta|)^\gamma,$$

ここで指数は $\gamma = 1.28$ 。この計算結果は近藤温度が軌道縮退の近傍で増大することを示し、実験結果と一致する。

SU(4) 近藤効果は、2 重量子ドット系に対しても理論研究がある (2 つの量子ドットに 1 個の電子がいる場合で、次節の近藤効果とは異なる)²⁹。また、Bethe 仮説を用いた厳密解による研究も報告されている³⁰。

(II) の状況は、偶数電子系の示す近藤効果として注目された。(電子数 N が偶数であっても、フロント則によって $S = 1$ が実現されれば近藤効果が期待される。が、その近藤温度は $S = 1/2$ のそれに比べてずっと小さく、量子ドットの実験での測定は困難である。) $S = 1$ の 3 つの状態

$$|SM\rangle = |00\rangle = d_{1\uparrow}^\dagger d_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad |11\rangle = d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\downarrow}^\dagger + d_{1\downarrow}^\dagger d_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle,$$

²⁸ このべき乗則は、最初山田らによって示された: K. Yamada, K. Yosida and K. Hanzawa, Prog. Theor. Phys. 71, 450 (1984). 一般の $V_1 \neq V_2$ の場合、指数は $\gamma \approx \Gamma_2/\Gamma_1$ で与えられる [10].

²⁹ L. Borda, G. Zaránd, W. Hofstetter, B. I. Halperin and J. von Delft, Phys. Rev. Lett. 90, 26602 (2003).

³⁰ R. Sakano and N. Kawakami, Phys. Rev. B 72, 085303 (2005).

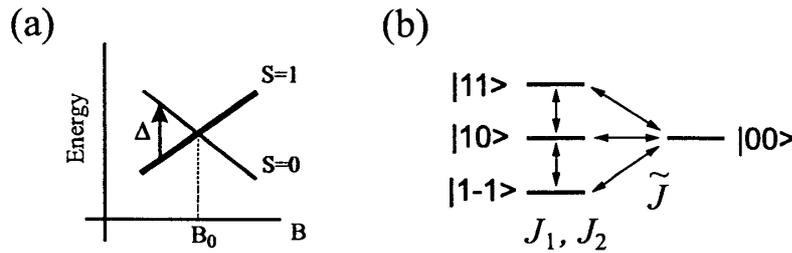


図 9: (a) 量子ドット中、ほとんど縮退した 2 つのエネルギー準位に 2 個の電子が占有した場合。スピン 1 重項と 3 重項状態のエネルギー差, $\Delta = E_{S=0} - E_{S=1}$, を磁場によって制御することができる。(b) 量子ドット中の 4 つの状態 $|SM\rangle$, およびそれらの間のフリップ過程。結合定数 J_1, J_2, \tilde{J}, T はいずれも、リード中の伝導電子との 2 次のトンネル過程による。

と $S = 0$ の状態 $|00\rangle = d_{1\uparrow}^\dagger d_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle$ が絡んで近藤状態を形成するとき、 $S = 1/2$ の近藤温度よりも大きな近藤温度が得られる。

(I) と同様に有効 Hamiltonian を作ると、今度は図 9(b) に示した 3 種類の結合定数 (+ potential 散乱の項) が現れる。スケーリング方程式を作って解析すると、次の結論が得られる。(詳細は文献 [10] を参照。) 近藤温度を Δ の関数として求めると、(i) $T_K(\Delta)$ は $\Delta = E_{S=0} - E_{S=1} = 0$ の近傍で最大値をとり、(ii) $T_K(0) \ll \Delta \ll D_0$ でべき乗則にしたがって Δ とともに減少する。べきの指数は $\gamma = 2 + \sqrt{5}$.³¹ (iii) 基底状態が $S = 0$ のとき ($\Delta < 0$) は、 $-\Delta \sim T_K(0)$ で T_K が急激に減少し、近藤効果が消失する。

最後に「多チャンネル近藤効果」についてコメントする [11]。リード中のチャンネル数を M , 量子ドット中の局在スピンの大きさを S とする。 $S = 2M$ のときは局在スピンの大きさが完全に遮蔽され、スピン 1 重項が形成される (full screening; 通常の $S = 1/2, M = 1$ の近藤効果はこの場合)。 $S > 2M$ のときは局在スピンの大きさが完全に遮蔽されず、基底状態ではスピン $S - M/2$ が残る (underscreening)。 $S < 2M$ の場合は、局在スピンの大きさが遮蔽され過ぎてスピン $2M - S$ が発生し、それを遮蔽しようとしてまた局在スピンの大きさが発生し、… の繰り返しの結果、局所的な非フェルミ流体になる (overscreening)³²。

(II) のケースでは、チャンネル数 $M = 2$ が量子ドット中の局在スピン $S = 1$ を遮蔽するので、スピン 1 重項の基底状態が出現する full screening に対応する ($S = 0$ の状態は、この遮蔽を強める働きをする)。(I) の近藤効果では $M = 2, S = 1/2$ であるが、量子ドット中の軌道自由度も遮蔽されるため、やはり full screening のケースに相当する。

4.2 2 重量子ドットにおける近藤効果

量子ドットが人工原子と呼ばれることを 2 章で述べたが、量子ドットを複数結合すると「人工分子」を作ることができる。2 つの等価な量子ドットを直列につなげた系を考える [図 10(a)]。それぞれ量子ドットの最低準位 (ϵ_0) のみを考え、それらの間のトンネル結合を $-t$ とする。リードとのトンネル結合を無視すると、2 つのドットの量子準位は $E_{\mp} = \epsilon_0 \mp t$ に分裂し、それぞれ結合

³¹ スケーリング方程式の fixed point のまわりの展開から、べきの値が求められる。

³² 量子ドット系で overscreening の近藤効果を実現する提案がされている: Y. Oreg and D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. Lett. 90, 136602 (2003); M. Pustilnik, L. Borda, L. I. Glazman and J. von Delft, Phys. Rev. B 69, 115316 (2004).

講義ノート

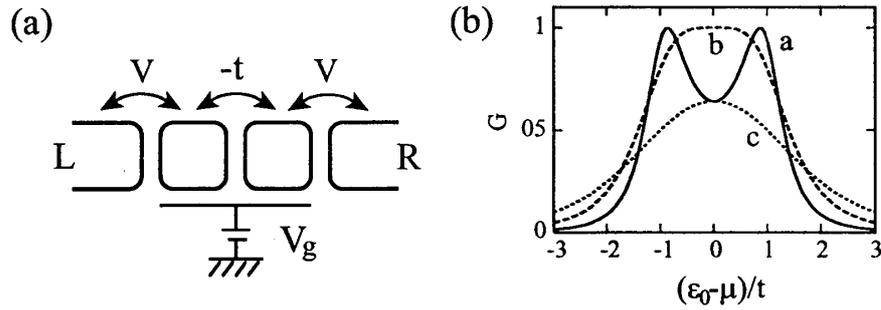


図 10: (a) 2つの等価な量子ドットを直列につなげた系の模式図。各量子ドット中の最低エネルギー準位 ε_0 のみを考える。ドット間のトンネル結合を $-t$ 、ドットとリード間のそれを V とする。(b) 2重量子ドットを流れる電気伝導度 G の ε_0 依存性。 $T = 0$ で電子間相互作用がない場合。 a , $\Gamma/t = 0.5$; b , 1 ; c , 2 , ただし $\Gamma = \pi\nu|V|^2$ 。 G の単位は $2e^2/h$ 。

軌道、反結合軌道

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|L\rangle \pm |R\rangle]$$

に相当する。ここで $|L, R\rangle$ は左 (右) の量子ドットの状態を表す。

まず量子ドット中の電子間相互作用を無視し ($U = 0$)、近藤効果を考えない。左右のリードとのトンネル結合が等価だとすると、Hamiltonian は

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{leads}} + H_{\text{dot}} + H_T, \\ H_{\text{dot}} &= \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\sigma} \varepsilon_0 d_{\alpha\sigma}^{\dagger} d_{\alpha\sigma} - t \sum_{\sigma} (d_{L\sigma}^{\dagger} d_{R\sigma} + \text{h.c.}), \\ H_{\text{leads}} &= \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{\alpha,k\sigma}^{\dagger} c_{\alpha,k\sigma}, \\ H_T &= \sum_{\alpha=L,R} \sum_{k\sigma} (V c_{\alpha,k\sigma}^{\dagger} d_{\alpha\sigma} + \text{h.c.}). \end{aligned}$$

この系の $T = 0$ での電気伝導度 G を、2.4 節と同様の方法で計算すると³³

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{4(\Gamma t)^2}{|(\mu - \varepsilon_0 + i\Gamma)^2 - t^2|},$$

$\Gamma = \pi\nu|V|^2$ は線幅である。この G を ε_0 の関数として図 10(b) に示す。 $t > \Gamma$ のとき、 G は 2 重ピーク構造を示す。ピークの位置は $\mu \approx E_{\mp}$ に対応し、 G の最大値は $2e^2/h$ 。これは、人工分子の結合・反結合軌道を通して共鳴トンネルが生じることを意味している。 $t < \Gamma$ のとき、 G は $\mu = \varepsilon_0$ に 1 つのピークを持つ。 G の値は $2e^2/h$ より小さい。この場合、量子ドットとリード間のトンネル結合が強いために、ドット間の分子軌道は形成されない。リードからドット、ドットからドット、ドットからリードへと sequential に伝導が生じると理解される。

このときの近藤効果はどうなるであろうか。 Aono らは、上述の 2 重量子ドットの Hamiltonian に量子ドット内の相互作用 $U = \infty$ を加えたモデルを考え、各量子ドットに 1 個の電子があるクーロンブロッケード領域での近藤効果を研究した³⁴。 Slave boson 法の平均場近似の計算 (3.5 節の脚注を参照) によって、次の結論を得た。(i) 量子ドット間のトンネル結合が弱い場合 ($t < \Gamma$)、左の

³³K. Kawamura and T. Aono, Jpn. J. Appl. Phys. **36**, 3951 (1997). この計算はグリーン関数のよい練習問題になるので、自分で導出することを薦めます。

³⁴T. Aono, M. Eto and K. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1860 (1998).

量子ドットは左のリードと、右の量子ドットは右のリードと、それぞれ近藤共鳴状態を形成する(近藤共鳴は μ を中心とする single peak)。電気伝導は、近藤共鳴間の tunneling ($\sim -t$) で決定する。(ii) 量子ドット間のトンネル結合が強い場合 ($t > \Gamma$)、2つの近藤状態の結合・反結合軌道が作られる(近藤共鳴は μ を挟んで double peak をもつ)³⁵。

この近藤共鳴の single peak / double peak 構造は有限バイアスの実験で観測され、Aonoらの理論の予言が確かめられている³⁶。

2重量子ドットの研究は、量子情報処理への応用の観点からも重要である。量子計算機の基本単位「量子ビット (qubit)」の作製には2つのアイデアがある: (i) 量子ドット中に電子を1個入れて、そのスピン $S_z = \pm 1/2$ を qubit に用いる「スピン qubit」、(ii) 2重量子ドットに1個の電子を入れたものを1 qubit に用いる「電荷 qubit」(電子の位置が |L> or |R>)³⁷。(i) の場合、2重量子ドットのスピン状態を制御することで2 qubit 間の演算が実現する [2]。

最近、空間的に離れた2つの量子ドットのスピン間に、RKKY相互作用がはたらくことが実験で確かめられた³⁸。(RKKY相互作用の制御によってスピン qubit 間の演算が可能かも知れない。) この実験では、RKKYが(反強磁性的に)はたらくことを、片側の量子ドットにおける近藤効果の消失として観測している。RKKY相互作用をする2つの局在スピン系の近藤効果そのものも興味深い問題であるが³⁹、近藤効果が電子スピンの感度のよいプローブとして利用できることを示している。

5 おわりに

量子ドットにおける近藤効果の実験では、(i) 1つの「磁性不純物」の近藤効果が観測可能、(ii) 近藤状態を流れるトンネル電流の観測によって、近藤共鳴スペクトルを直接見ることができる、(iii) 電子数、軌道準位などのさまざまなパラメーターを変えることが可能、である。従来の金属中の磁性不純物系では実現が困難な状況において、近藤効果の研究が進んでいる。本章では、その研究の一端を垣間見ることにして、本テキストの結びに代えたい。

量子ドットに超伝導のリードをつけた系での近藤効果(近藤1重項状態とクーパ対の1重項の競合)、強磁性体のリードでの近藤効果。どちらも理論研究が先行していたが、最近実験がおこなわれた⁴⁰。

カーボンナノチューブに2つのリードを接合した系での近藤効果。スピン1重項・3重項の近藤効果⁴¹や、SU(4)近藤効果⁴²も報告されている。その他の分子でも近藤効果が観測されている。

³⁵ $U = \infty$ のモデルは十分でなく、量子ドット間のスピンの反強磁性結合 ($J = 4t^2/U$) を取り入れる必要がある。それでも、多くの場合ここに示した描像は有効である: T. Aono and M. Eto, Phys. Rev. B **63**, 125327 (2001); *ibid.* **64**, 73307 (2001).

³⁶H. Jeong, A. M. Chang and M. R. Melloch, Science **293**, 2221 (2001).

³⁷T. Hayashi, T. Fujisawa, H. D. Cheong, Y. H. Jeong and Y. Hirayama, Phys. Rev. Lett. **91**, 226804 (2003).

³⁸N. J. Craig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. P. Hanson and A. C. Gossard, Science **304**, 565 (2004).

³⁹P. Simon, R. Lopez and Y. Oreg, Phys. Rev. Lett. **94**, 086602 (2005); M. G. Vavilov and L. I. Glazman, Phys. Rev. Lett. **94**, 086805 (2005).

⁴⁰M. R. Buitelaar, T. Nussbaumer and C. Schönenberger, Phys. Rev. Lett. **89**, 256801 (2002). A. N. Pasupathy, R. C. Bialczak, J. Martinek, J. E. Grose, L. A. K. Donev, P. L. McEuen and D. C. Ralph, Science **306**, 86 (2004).

⁴¹J. Nygård, D. H. Cobden and P. E. Lindelof, Nature **408**, 342 (2000). (3重項がZeeman分裂した状況で、4.2節の機構とは異なる。)

⁴²P. Jarillo-Herrero, J. Kong, H. S. J. van der Zant, C. Dekker, L. P. Kouwenhoven and S. De Franceschi, Nature **434**, 484 (2005).

講義ノート

散乱問題の「位相差 (phase shift)」 δ が、近藤効果の議論でしばしば登場する。量子ドットを流れる電気伝導度は、対称なバリアのとき、 $G = (2e^2/h) \sin^2 \delta$ で与えられる。 $T \ll T_K$ の低温ではフェルミ流体論が適用でき、Friedel sum rule が成立する: $\delta = (\pi/2)N$ (N は電子数)。したがって $N = 1$ (スピン $1/2$) のとき $\delta = \pi/2$ (ユニタリー極限) となり、 $G = 2e^2/h$ が導かれる。位相差 δ を測定するため、Aharonov-Bohm (AB) リングに量子ドットを埋め込んだ実験が試みられているが⁴³、まだ課題は多い。

AB リングに量子ドットを埋め込んだ系では、近藤温度以上で、通常の AB 効果とは異なる Fano 共鳴 (リングの連続準位と、量子ドット中の離散準位の干渉に起因する非対称な共鳴スペクトル) が観測される⁴⁴。近藤温度以下では、“Kondo-Fano effect” が理論的に予言されている⁴⁵。量子細線の側面に量子ドットを結合させた系で、近藤効果による電気伝導の抑制 (anti-resonance) が観測されたが、これは “Kondo-Fano effect” の一つと考えられている⁴⁶。

近藤 1 重項状態は、局在スピンのまわり $\xi_K \sim v_F \cdot \hbar / (k_B T_K)$ の広がりをもつ。これを “Kondo cloud” とよぶ。孤立したリングに量子ドットを埋め込んだ系での永久電流 [1] 等において、 ξ_K の影響が理論的に研究されている⁴⁷。

有限バイアスや交流電場中の非平衡近藤効果は、研究が進行中⁴⁸。3.2 節で述べたように、Zeeman 効果がある場合、共鳴条件 $|eV| = 2E_Z$ が満たされると近藤効果が強められる。が、電子がスピンの向きを変えずに一方のリードから他方へトンネルすると、終状態は励起状態になるから、この過程は位相緩和として近藤効果を壊す。この緩和過程を多体効果と同時に取り入れなければならない。数値繰り込み群の方法は非平衡状態には適用できない。代わりにの計算方法が模索されている。

A 2.4 節の計算

遅延グリーン関数 \hat{G} (非摂動のそれを \hat{G}_0 とする) を次式で導入する⁴⁹。

$$(\varepsilon - H + i\delta)\hat{G} = 1, \quad (32)$$

$$(\varepsilon - H_0 + i\delta)\hat{G}_0 = 1. \quad (33)$$

$H = H_0 + H_T$ であるから

$$(\varepsilon - H_0 + i\delta)\hat{G} = 1 + H_T\hat{G}, \quad (34)$$

したがって、Dyson 方程式

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 H_T \hat{G}, \quad (35)$$

⁴³Y. Ji, M. Heiblum, D. Sprinzak, D. Mahalu and H. Shtrikman, Science **290**, 779 (2000); Y. Ji, M. Heiblum and H. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **88**, 076601 (2002).

⁴⁴K. Kobayashi, H. Aikawa, S. Katsumoto and Y. Iye, Phys. Rev. Lett. **88**, 256806 (2002); 相川恒、小林研介、中西毅、日本物理学会誌 **59**, 682 (2004).

⁴⁵W. Hofstetter, J. König and H. Schoeller, Phys. Rev. Lett. **87**, 156803 (2001).

⁴⁶M. Sato, H. Aikawa, K. Kobayashi, S. Katsumoto and Y. Iye, Phys. Rev. Lett. **95**, 066801 (2005).

⁴⁷I. Affleck and P. Simon, Phys. Rev. Lett. **86**, 2854 (2001); P. Simon and I. Affleck, Phys. Rev. B **68**, 115304 (2003).

⁴⁸脚注 18 の文献や、文献 [7] 中、A. Rosch, J. Paaske, J. Kroha and P. Wölfle, p. 118; T. Fujii and K. Ueda, p. 127.

⁴⁹正確にはグリーン演算子。グリーン関数を $\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{G} | \mathbf{r}' \rangle$ とする。 $H = \mathbf{p}^2 / (2m)$ のとき、これは量子力学の散乱問題で出てくる Helmholtz 方程式のグリーン関数に一致する。また、多体問題の教科書に登場するグリーン関数 $\hat{G}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = (i\hbar)^{-1} \langle \Psi_0 | \{ \psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \} | \Psi_0 \rangle \theta(t - t')$ (ψ, ψ^\dagger は場の演算子、 Ψ_0 は基底状態) を $(t - t') \rightarrow \omega$ に Fourier 変換し、 $\hbar\omega = \varepsilon$ とおいたものと (電子間相互作用がない場合に) 等価になる。本補遺中の $\hat{G}_{dd}(\omega)$ も、 $\hat{G}_{dd}(t) = (i\hbar)^{-1} \langle \Psi_0 | \{ d(t), d^\dagger \} | \Psi_0 \rangle \theta(t)$ に対して運動方程式を立て、Fourier 変換して求めることもできる。

が得られる。式 (35) の右辺の \hat{G} に、左辺の \hat{G} を逐次代入をすると

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 H_T \hat{G}_0 + \hat{G}_0 H_T \hat{G}_0 H_T \hat{G}_0 + \dots$$

T 行列の定義式 (7) と比較すると

$$\begin{aligned} \hat{T} &= H_T + H_T \hat{G}_0 H_T + H_T \hat{G}_0 H_T \hat{G}_0 H_T + \dots \\ &= H_T + H_T \hat{G} H_T. \end{aligned}$$

したがって \hat{G} を計算すれば \hat{T} が求められる。

\hat{G} は次のように計算される。式 (34) の両辺を $\langle d | \dots | d \rangle$ (量子ドットの準位) で挟むと

$$(\varepsilon - \varepsilon_0 + i\delta) \hat{G}_{d,d} = 1 + \sum_{\alpha k} \langle d | V | \alpha k \rangle \hat{G}_{\alpha k, d} = 1 + \sum_{\alpha k} V_{\alpha}^* \hat{G}_{\alpha k, d}, \quad (36)$$

ここで $\hat{G}_{d,d} \rightarrow \langle d | \hat{G} | d \rangle$ などの表記を用いている。同様に式 (34) の両辺を $\langle \alpha k | \dots | d \rangle$ で挟んで

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha k} + i\delta) \hat{G}_{\alpha k, d} = 0 + \langle \alpha k | V | d \rangle \hat{G}_{d,d} = V_{\alpha} \hat{G}_{d,d}. \quad (37)$$

式 (36), (37) から $\hat{G}_{\alpha k, d}$ を消去すると

$$(\varepsilon - \varepsilon_0 + i\delta) \hat{G}_{d,d} = 1 + \sum_{\alpha k} \frac{|V_{\alpha}|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\alpha k} + i\delta} \hat{G}_{d,d}, \quad \text{したがって} \quad \hat{G}_{d,d} = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 - \Sigma_d}.$$

Σ_d は self-energy と呼ばれ、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \Sigma_d &= \sum_{\alpha k} \frac{|V_{\alpha}|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\alpha k} + i\delta} \\ &= \sum_{\alpha=L,R} \int d\varepsilon' \nu(\varepsilon') \frac{|V_{\alpha}|^2}{\varepsilon - \varepsilon' + i\delta} \\ &= \sum_{\alpha=L,R} \int d\varepsilon' \nu |V_{\alpha}|^2 \left[P \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon'} - i\pi \delta(\varepsilon - \varepsilon') \right] \\ &= -i\Gamma. \end{aligned}$$

ここで、 Γ は式 (1) で与えられる線幅、実部は ε_0 をシフトするだけなので無視した (ε_0 に繰り込んだと考える)。孤立した量子ドットのグリーン関数と比べると

$$\langle d | \hat{G}_0 | d \rangle = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 + i\delta} \Rightarrow \langle d | \hat{G} | d \rangle = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_0 + i\Gamma}$$

のように、有限寿命 τ が self-energy の虚部 $-\Gamma = -\hbar/(2\tau)$ に現れる。

量子ドット中の状態密度を計算すると、

$$\rho_d \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im} \hat{G}_{d,d} = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma^2}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2},$$

中心 ε_0 , 半値幅 Γ のローレンツ型になることがわかる⁵⁰。

⁵⁰ Hamiltonian H の固有状態、固有値を $|n\rangle, \varepsilon_n$ とすると、式 (32) より $\langle n | \hat{G} | n \rangle = (\varepsilon - \varepsilon_n + i\delta)$, したがって、一般に状態密度は $\rho(\varepsilon) \equiv \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \hat{G}$ で与えられる。今の場合 $\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \hat{G}_{d,d} - \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha k} \text{Im} \hat{G}_{\alpha k, \alpha k}$ で第1項を ρ_d と定義した。

B 3.5 節の平均場近似の計算

平均場近似の Hamiltonian (25) の期待値を、 $T = 0$ でのフェルミ分布関数を使って計算すると

$$E_{\text{MF}} = \sum_{\sigma} \left[-\frac{\tilde{\Delta}}{\pi} + \frac{\tilde{E}_{\sigma}}{\pi} \tan^{-1} \frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{E}_{\sigma}} + \frac{\tilde{\Delta}}{2\pi} \ln \frac{\tilde{E}_{\sigma}^2 + \tilde{\Delta}^2}{D^2} \right] - \lambda + \frac{\tilde{\Delta}}{\pi\nu J},$$

ここで D はリードのバンド幅、フェルミ準位を $\mu = 0$ とした [9]。条件式 (23) より

$$\frac{\partial E_{\text{MF}}}{\partial \lambda} = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \tan^{-1} \frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{E}_{\sigma}} - 1 = 0,$$

したがって $\varepsilon_0 + \lambda = 0$ 。 E_{MF} を $\tilde{\Delta}$ (または $|\langle \Xi \rangle|^2$) に対して最小にすると

$$\frac{\partial E_{\text{MF}}}{\partial \tilde{\Delta}} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} \ln \frac{\tilde{E}_{\sigma}^2 + \tilde{\Delta}^2}{D^2} + \frac{1}{\pi\nu J} = 0.$$

この式より $\tilde{\Delta}$ が決定する。 $E_Z = 0$ のとき、

$$\tilde{\Delta} = D \exp[-1/2\nu J] \equiv \tilde{\Delta}_0.$$

これは近藤温度 $k_B T_K$, 式 (15), に一致する。 $E_Z \neq 0$ のときは、

$$\tilde{\Delta}^2 + E_Z^2 = \tilde{\Delta}_0^2$$

を得る。

Hamiltonian (25) は、「エネルギー準位」が $\tilde{E}_{\sigma} = \varepsilon_{\sigma} + \lambda$, 「トンネル結合」が $\tilde{V} = -\sqrt{2}J\langle \Xi \rangle$, の問題と同じなので、pseudofermion のグリーン関数は

$$G_{\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \tilde{E}_{\sigma} + i\tilde{\Delta}},$$

ここで $\tilde{\Delta} = \pi\nu|\tilde{V}|^2$. 2.4 節と同様に、このグリーン関数と T 行列を用いて電気伝導度を求めると

$$\begin{aligned} G &= \frac{e^2}{h} (2\pi\nu)^2 \sum_{\sigma} |\langle R, k'\sigma | \hat{T} | L, k\sigma \rangle|^2 \Big|_{\varepsilon_k = \varepsilon_{k'} = \mu} \\ &= \frac{e^2}{h} (2\pi\nu)^2 \frac{|V_L|^2 |V_R|^2}{(|V_L|^2 + |V_R|^2)^2} \sum_{\sigma} |\langle \psi_{k'\sigma} | \hat{T} | \psi_{k\sigma} \rangle|^2 \Big|_{\varepsilon_k = \varepsilon_{k'} = \mu} \\ &= \frac{e^2}{h} \frac{4\Gamma_L \Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)^2} \sum_{\sigma} \frac{\tilde{\Delta}^2}{(\varepsilon - \tilde{E}_{\sigma})^2 + \tilde{\Delta}^2} \Big|_{\varepsilon = \mu}. \end{aligned}$$

2 行目の式変形で、 $|\psi_{k\sigma}\rangle = c_{k\sigma}^{\dagger} |0\rangle = (V_L |L, k\sigma\rangle + V_R |R, k\sigma\rangle) / V$ を用いた。

参考文献

- [1] メゾスコピック系物理学の全般に関する最近の解説:
勝本信吾「メゾスコピック系」(朝倉書店、2003).
- [2] 量子ドットの量子情報処理への応用について:
固体物理 **38**, No. 11 (2003), 「固体中の量子コヒーレンス制御」特集号, その中の川畑史郎氏の解説 (p. 733) など。

- [3] 量子ドットの研究 (近藤効果の観測以前) の詳しいレビュー:
Mesoscopic Electron Transport, NATO ASI Series E **345**, eds. L. Y. Sohn, L. P. Kouwenhoven and G. Schön (Kluwer, 1997).
- [4] 量子ドット中の少数電子系の電子状態、電気伝導特性の理論計算:
M. Eto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, 1929 (2001).
- [5] 近藤効果と heavy fermion についての詳細な教科書:
A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge, Cambridge, England, 1993).
- [6] 近藤効果についての日本語の教科書:
近藤 淳「金属電子論」(裳華房, 1983); 芳田 奎「磁性」(岩波書店, 1991) [英訳は K. Yosida, *Theory of Magnetism* (Springer, New York, 1996)]; 斯波 弘行「固体の電子論」(丸善, 1996).
- [7] 最近の近藤効果の研究のレビュー:
J. Phys. Soc. Jpn. **74**, No. 1 (2005), special topics section “Kondo Effect—40 Years After the Discovery.”
- [8] 数値繰り込み群を用いた量子ドットの近藤効果の研究:
W. Izumida, O. Sakai and Y. Shimizu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 2444 (1998); W. Izumida and O. Sakai, 文献 [7] の p. 103.
- [9] 量子ドット中の近藤効果の平均場近似:
M. Eto and Yu. V. Nazarov, *Phys. Rev. B* **64**, 85322 (2001) 中の appendix.
- [10] 軌道自由度を含めた近藤効果の理論計算:
M. Eto, 文献 [7] の p. 95.
- [11] 多チャンネル近藤効果について:
P. Nozières and A. Blandin, *J. Phys. (Paris)* **41**, 193 (1980); D. L. Cox and A. Zawadowski, *Adv. Phys.* **47**, 599 (1998); 永長直人「電子相関における場の量子論」(岩波書店, 1998).