

非平衡電流ゆらぎでみる量子ドットの電子多体効果

阪野 壘 東京大学物性研究所

概要

ナノスケール程度の小さな導体に発生する電流や電流揺らぎ (電流ノイズ) は、量子多体効果により興味深い性質を示す。このような系の輸送の計算手法や散乱状態の解析手法として、ケルディッシュ-グリーン関数、完全計数統計を導入し、量子ドット系の電流、電流ノイズ特性について実際に計算、解説する。さらに、電子相関を導入し、典型的な量子多体効果である近藤効果によって量子ドットの電流中に倍電荷状態が形成され、この状態がショットノイズの増幅として観測される現象について解説する。

1 序

1909年にミリカンは有名な油滴実験で電子の素電荷の測定に成功した [1]。その9年後にはショットキーによって、次のような電流生成の統計性を利用した電荷測定が提案されている [2]。真空管中の2つの電極の間に電圧を印加すると、電極の間を小さな確率で電子が飛び出し、電流が発生する。その電荷数の計数はポアソン分布に従うため、発生した電流と電流ノイズは比例し、その比例係数から電子の電荷の大きさが得られる。物性物理学ではこの特性を利用し、導体中に形成された電子状態の有効電荷を検出することが行われてきた [3]。特に多体状態が形成されると、非自明な有効電荷が検出され興味深い。例えば、分数量子ホール系でラフリン準粒子の分数電荷が観測されたり、超伝導-常伝導接合系でクーパー対の倍電荷が検出されてきた [4-6]。

本稿では、典型的な量子多体効果である近藤効果が起こった量子ドットの非線形電流と電流ノイズについて議論し、局所フェルミ流体状態による有効電荷状態の形成機構について理解することを目標とする。量子ドットに2つ電極を取り付け電位差を与え、近藤温度 (数 K 程度) と呼ばれる多体効果のエネルギースケールより低温まで冷やすと、電極中の伝導電子と量子ドットに局在した電子のスピンの一重項状態を形成し、電流が発生する。これが量子ドットにおける、スピン近藤効果である。このとき、後方散乱電流の平均電流と電流ノイズの比が $\frac{S_b}{2I_b} = \frac{5}{3}e$ となることが、理論的に予言された [7-9]。そして、最近、カーボンナノチューブの量子ドットを利用した実験で、この平均電流-電流ノイズ比が実際に観測された [10]。この近藤効果による非線形電流や電流ノイズは、局所フェルミ流体特性を反映した興味深い性質を持っているが、ラフリン準粒子やクーパー対の電荷に比べるとややわかりにくい。まず、近藤効果を起こすクーロン斥力がない、単純な系の有効電荷や電流ノイズの簡単な性質を見る。そのうえで、完全計数統計を導入し、近藤効果による電流揺らぎと有効電荷状態の形成機構について解説する。

2 ショットノイズ

まず、ここでは微小確率によって生成された電流では、平均電流と、電流の分散である電流ノイズの比をとることで、電流が運ぶ状態の有効電荷を得ることができることを説明する。

2.1 ポアソン過程の確率分布

電荷 e^* を持った状態が単位時間あたりに確率 p で生成されることによって、電流が形成される現象について考える。このとき、時間 \mathcal{T} の間にこの状態が検出される回数 k の確率分布 $P(k)$ について考える。まず、時間 \mathcal{T} を微小時間 Δt で分割する。この微小時間 Δt の間に状態が生成される確率は $p \cdot \Delta t$ で、この試行を $N = \frac{\mathcal{T}}{\Delta t}$ 回行ううちに k 回状態が生成される確率は、

$$P(k) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} {}_N C_k (p \cdot \Delta t)^k (1 - p \cdot \Delta t)^{N-k} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{N \rightarrow \infty} {}_N C_k \left(\frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^k \left(1 - \frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^{N-k} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(N-1)(N-2)\cdots(N-k+1)}{k!} \left(\frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^k \left(1 - \frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^{N-k} \end{aligned} \quad (2)$$

である。ここで分布関数 (2) の各部分は、 k は有限で止めた正の整数で、極限 $N \rightarrow \infty$ をとることに注意すれば、

$$\begin{aligned} &N(N-1)(N-2)\cdots(N-k+1) \left(\frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^k \\ &= 1 \cdot \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(1 - \frac{2}{N} \right) \cdots \left(1 - \frac{k+1}{N} \right) (p \cdot \mathcal{T})^k \\ &= (p \cdot \mathcal{T})^k, \end{aligned} \quad (3)$$

と

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^{N-k} &= \left(1 - \frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^N \cdot \left(1 - \frac{p \cdot \mathcal{T}}{N} \right)^{-k} \\ &= e^{-p \cdot \mathcal{T}} \cdot 1 \end{aligned} \quad (4)$$

となる。これにより、分布関数は

$$P(k) = \frac{a^k}{k!} e^{-a} \quad (5)$$

と得られ、これはポアソン過程の確率分布である。ここで、 $a = \mathcal{T} \cdot p$ は電荷 e^* の状態が、時間 \mathcal{T} 内に観測される平均回数である。この確率分布のキュムラント生成関数は

$$\ln \chi(\lambda) = \ln \sum_{k=0}^{\infty} e^{i\lambda k} P(k) = a (e^{i\lambda} - 1) \quad (6)$$

となる。この結果より、任意の m 次のキュムラント ($m \geq 1$) は生成関数を微分することにより

$$C_m = (-i)^m \left. \frac{\partial^m}{\partial \lambda^m} \ln \chi(\lambda) \right|_{\lambda=0} = a \quad (7)$$

と得られる。顕著なことは、すべての次数でキュムラントは同じ値 a をとることである。これを電流の観測と関連付けることで、興味深い特性を導くことができる。

2.2 平均電流と電流ノイズ

時間 $[-\frac{\mathcal{T}}{2}, \frac{\mathcal{T}}{2}]$ の間に電荷 e^* を持った状態が検出される回数の演算子は、生成された電流の演算子 \hat{I} を用いて

$$\hat{k} = \frac{1}{e^*} \int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{\frac{\mathcal{T}}{2}} dt \hat{I}(t) \quad (8)$$

と与えられる。特にここでは、定常状態で時間並進対称性がある場合を考える。このとき、検出される回数 k の確率分布についてのキュムラントの1次は

$$\begin{aligned} C_1 = \langle \hat{k} \rangle &= \frac{1}{e^*} \int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{\frac{\mathcal{T}}{2}} dt \langle \hat{I}(t) \rangle \\ &= \frac{1}{e^*} \int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{\frac{\mathcal{T}}{2}} dt \langle \hat{I}(0) \rangle \\ &= \frac{1}{e^*} \mathcal{T} \cdot I \end{aligned} \quad (9)$$

と、電流の平均に関連付けることができる。ただし、平均電流は、時間並進対称性があるので、 $I := \langle \hat{I}(0) \rangle$ と定義した。同様に2次のキュムラントについても考える。長時間極限 $\mathcal{T} \rightarrow \infty$ を考えると、2次のキュムラントは

$$\begin{aligned} C_2 &= \langle \hat{k}^2 \rangle - \langle \hat{k} \rangle^2 \\ &= \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{(e^*)^2} \left[\int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{\frac{\mathcal{T}}{2}} dt \int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{\frac{\mathcal{T}}{2}} dt' \langle \hat{I}(t) \hat{I}(t') \rangle - \mathcal{T}^2 I^2 \right] \\ &= \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{(e^*)^2} \left[\mathcal{T} \int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{\frac{\mathcal{T}}{2}} dt \langle \hat{I}(t) \hat{I}(0) \rangle - \mathcal{T}^2 I^2 \right] \end{aligned} \quad (10)$$

と電流の相関関数で与えられる。一方、電流ノイズは電流揺らぎ $\delta \hat{I}(t) = \hat{I}(t) - I$ の自己相関関数として

$$S := \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \delta \hat{I}(t) \delta \hat{I}(0) + \delta \hat{I}(0) \delta \hat{I}(t) \rangle \quad (11)$$

と定義される*1。また特に、ポアソン過程で生成された電流ノイズは、熱揺らぎの抑えられる低温では電荷状態の離散性のみに起因するため、ショットノイズと呼ばれる。定常状態で時間並進対称がある場合はもう少し簡単に書くことができ、

$$S = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \hat{I}(t) \hat{I}(0) \rangle - 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt I^2 \quad (12)$$

となる。したがって、2次のキュムラントと電流ノイズの関係は

$$C_2 = \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{(e^*)^2} \mathcal{T} \cdot S \quad (13)$$

*1 この定義が順序を入れ替えた二項で構成されているのは、一般に非可換な2つの異なる電流の揺らぎに対する相関関数を考えた場合に、揺らぎの相関をエルミート対称化するためである。また、2つの項で構成されることから、係数として $\frac{1}{2}$ を付ける定義もあるので、議論を進める前にそれぞれの論文、テキストではこの定義を注意することをおすすめする。

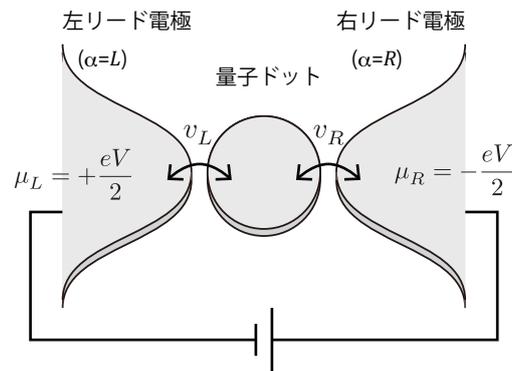


図1 量子ドットに2つのリード電極が繋がれて、電極間にはバイアス電圧 eV が印加されている。これにより電流が発生し、この特性を調べることで系での電子状態を調べることができる。

となる。さて、前節で見たように、ポアソン過程に対しては $C_1 = C_2$ であることを利用すれば、(9)、(13) 式より、

$$e^* = \frac{S}{2I} \quad (14)$$

が得られる。つまり、ポアソン過程により生成された電流では、平均とノイズの比をとることで、電流中に形成された状態の有効電荷が得られるということである。単に電子の素電荷が観測できるだけでは、それほどおもしろくないかもしれない。しかし、顕著なことは多体状態によって形成された非自明な電荷状態が、電流揺らぎの観測により、直接的に観測できるということである。例えば、分数量子ホール系の分数電荷状態や、超伝導-常伝導接合系のクーパ対の倍電荷などの実験観測は、すでに十数年以上前に報告されている [4-6]。さらにごく最近では、カーボンナノチューブ量子ドット中の、スピン近藤効果や軌道近藤効果によって増幅されたショットノイズと有効電荷の実験観測も報告されている [10]。

3 量子ドット系と電流, 電流ノイズ

本節では、具体的に量子ドットを例に、微小導体に発生する電流, 電流ノイズの特性について解説する。まず、実際の計算には、ケルディッシュ-グリーン関数の導入し、具体的な電流, 電流ノイズの表式を導出する。得られた表式から、電子間相互作用がない場合の電流ノイズの特性について、解説する。

3.1 量子ドット系の模型: 不純物アンダーソン模型

本稿では、ここから図1のような、量子ドットに2つの電極が繋がっていて、電極間に電位差 eV を印加した場合に発生する電流について考える。この系は次の不純物アンダーソン模型で表される;

$$\mathcal{H}_A = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_R + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_T + \mathcal{H}_U, \quad (15)$$

$$\mathcal{H}_{L/R} = \sum_{\sigma} \int_{-D}^D d\varepsilon \varepsilon c_{\varepsilon L/R\sigma}^{\dagger} c_{\varepsilon L/R\sigma}, \quad (16)$$

$$\mathcal{H}_d = \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{n}_{d\sigma}, \quad (17)$$

$$\mathcal{H}_T = \sum_{\alpha\sigma} (v_{\alpha} d_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma} + v_{\alpha}^* \psi_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}), \quad (18)$$

$$\mathcal{H}_U = U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow}. \quad (19)$$

ここで、 d_{σ} はスピン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ の電子をドットの準位 ε_d から一つ消す演算子で、 $\hat{n}_{d\sigma} := d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$ はドットの中のスピン σ の電子の数演算子である。同様に、 $c_{\varepsilon\alpha\sigma}$ はエネルギーが ε でスピン σ の電子を左のリード電極 ($\alpha = L$) もしくは、右のリード電極 ($\alpha = R$) から消す演算子である。トンネル結合 v_{α} によりドットの電子とリード電極中の電子は、 $\psi_{\alpha\sigma} := \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{\rho_c} c_{\varepsilon\alpha\sigma}$ を介して、結合している。 $\rho_c = \frac{1}{2D}$ はリード電極内の電子の状態密度で、 D は伝導バンドの半幅で $D \rightarrow \infty$ の極限をとる。また、トンネル結合によりドットの準位は線幅 $\Gamma = \frac{1}{2}(\Gamma_L + \Gamma_R)$ を持つ。ここで、 $\Gamma_{\alpha} := 2\pi\rho_c |v_{\alpha}|^2$ は左右それぞれのリード電極との結合による寄与である。左右のリード電極の化学ポテンシャルは、それぞれ、 $\mu_L = +\frac{1}{2}eV$ と $\mu_R = -\frac{1}{2}eV$ として、電極間にはバイアス電圧 eV が印加され、非平衡状態が制御されている。 U はドットの内の電子間に働くクーロン相互作用で、低温で近藤効果を引き起こす。

量子ドットと微細加工された人工系 量子ドットとは、半導体や金属、もしくはグラフェンやカーボンナノチューブなどの高分子材料で作られた微小な電子の閉じ込め領域で、典型的には数ナノから数十ナノメートル程度の大きさである [11]。通常、量子ドットには、ゲート電極を取り付けるなどして、内部のポテンシャルエネルギーを調整することで、周りの電子浴 (本稿ではリード電極にあたる) から電子を引き込み、閉じ込めることができる。そして、量子ドットが閉じ込められた電子の波長程度に小さければ、電子のエネルギー状態は離散化する。また、閉じ込め領域の形状に対称性があれば、電子は軌道などの自由度を持つことができる。電子を狭い領域に閉じ込めるとここで様々な性質を発現し、原子と似た性質を持つため人工原子と呼ばれたりする。近藤効果は、もともとバルク金属中の磁性不純物原子によって引き起こされる現象として研究されてきたが、ここではこの人工原子に磁気モーメントが発現するように調整し、電子浴を取り付けることで近藤効果を起こすようにできる。そうすると、バルク金属と異なり人工系であるために様々なパラメータが調整可能であり、多体効果を制御し、詳しく現象の観察、検証が可能になる。更には、本稿で議論するように非平衡状態を制御し多体効果を調べることが可能なる。これは、これまでのバルク金属の近藤効果では難しかった、微細加工によって作られた人工系に特徴的な研究である。

これまで、興味深い特性を示すものの、机上の理論の産物としてしか考えられて来なかった様々な現象が、微細加工された人工系での実験をとおして観測が可能になっている。そして、輸送現象の観測などを通して、比較的容易に人工系の内部状態を詳しく調べることが可能である。今後、量子論、統計物理などの基礎論との交流がすすめば、様々な興味深い現象が現実に観測され、微細加工された人工系の研究は、大きく発展してゆくと期待している。

3.2 電流

リード電極 α から系の残りの部分へ流れ込む電流は、リード中の電子数の演算子 $\hat{N}_\alpha = \sum_\sigma \int_{-D}^D d\varepsilon c_{\varepsilon\alpha\sigma}^\dagger c_{\varepsilon\alpha\sigma}$ の時間変化により、

$$\hat{I}_\alpha(t) = -e \frac{d}{dt} \hat{N}_\alpha(t) \quad (20)$$

と書くことができる。演算子の時間微分は、ハイゼンベルグの運動方程式によって与えられて、電流は

$$\hat{I}_\alpha(t) = \frac{ie}{\hbar} [\hat{N}_\alpha(t), \mathcal{H}] = \frac{ie}{\hbar} \sum_\sigma [v_\alpha d_\sigma^\dagger(t) \psi_{\alpha\sigma}(t) - v_\alpha^* \psi_{\alpha\sigma}^\dagger(t) d_\sigma(t)] \quad (21)$$

となる。

この電流演算子についての統計平均をとり、平均電流や電流ノイズを計算したい。さらには、クーロン相互作用を取り込んで、電子相関効果を反映した輸送特性を解析したい。相互作用の取り扱いに強力な手法は、グリーン関数を用いた摂動法であるが、今考えている系では左右のリード電極間に電圧が印加されていて非平衡状態となっているため、よく知られた絶対零度グリーン関数や有限温度グリーン関数などの手法を適用できない。そこで、次節ではケルディッシュ-グリーン関数を導入し、非平衡系の期待値の計算を行う方法を解説する*2。

3.3 ケルディッシュ形式の導入

まず、ハミルトニアンを次のように与える；

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + e^{-\delta|t|} \mathcal{H}_1. \quad (22)$$

ここで、 δ は正の微小量とし、相互作用項 \mathcal{H}_1 は $t = 0$ で完全に導入される。 \mathcal{H}_0 は、相互作用項が消える時刻 $t = -\infty$ で、対角化可能な熱平衡状態にあるとする。

このとき、シュレディンガー表示の観測量 \mathcal{O}_S の期待値は、時刻 t の密度行列 $\rho(t)$ を用いて与えられ、

$$\langle \mathcal{O}_S \rangle = \text{Tr} [\rho(0) \mathcal{O}_S] \quad (23)$$

と書かれる。相互作用表示を $t = 0$ でシュレディンガー表示に一致するように導入すると、密度行列は

$$\rho_I(t) = \mathcal{U}(t, 0) \rho(0) \mathcal{U}(0, t) \quad (24)$$

となる。ここで、相互作用表示の時間発展演算子は

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \text{T exp} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right] \quad (25)$$

*2 ケルディッシュ形式についてまとめた資料について。メソスコピック系の電流などの計算にケルディッシュ形式を適用している典型的な教科書として [12] が挙げられるが、より詳しく素直に計算を迎えるものとして修士論文 [13] があり、非常に読みやすい。また日本語では、小栗章氏による若手夏の学校の講義ノート [14] が非常にわかりやすくまとまっている。同氏による英語のテキスト [15] は更に内容も充実していて、非常にわかりやすい。

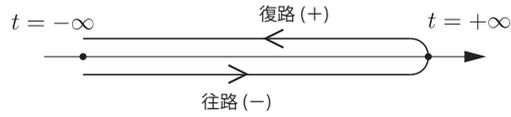


図2 ケルディッシュ経路 C. 往路, 復路にそれぞれ +, - とラベル付ける.

である. T は時間順序演算子で, $\mathcal{H}_{1,I}(t') = e^{i\mathcal{H}_0/\hbar} \mathcal{H}_1(t') e^{-i\mathcal{H}_0/\hbar}$. 相互作用表示の密度行列 $\rho_I(t)$ を導入すると観測量の期待値は

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_S \rangle &= \text{Tr} [\mathcal{U}(0, -\infty) \rho_I(-\infty) \mathcal{U}(-\infty, 0) \mathcal{O}_I(0)] \\ &= \text{Tr} [\rho_I(-\infty) \mathcal{U}(-\infty, 0) \mathcal{O}_I(0) \mathcal{U}(0, -\infty)] \\ &= \langle \mathcal{U}(-\infty, 0) \mathcal{O}_I(0) \mathcal{U}(0, -\infty) \rangle_0 \end{aligned} \quad (26)$$

と, 時刻 $t = -\infty$ での密度行列による平均 $\langle \cdots \rangle_0 = \text{Tr} [\rho_I(-\infty) \cdots]$ で書き換えることができる. このように変形する利点は, 時刻 $t = -\infty$ では相互作用部分がなく, 対角化可能なことである. 具体的に不純物アンダーソン模型 (15) で, 非摂動項と摂動項を

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_R + \mathcal{H}_d, \quad (27)$$

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_T + \mathcal{H}_U, \quad (28)$$

とすると, 時刻 $t = -\infty$ で2つのリード電極と量子ドット部分が分離するため, 密度行列は

$$\rho(-\infty) = \frac{e^{(\beta_L \mathcal{H}_L - \mu_L \hat{N}_L)} e^{(\beta_R \mathcal{H}_R - \mu_R \hat{N}_R)} e^{(\beta_d \mathcal{H}_d - \mu_d \hat{n}_d)}}{\text{Tr} \left[e^{(\beta_L \mathcal{H}_L - \mu_L \hat{N}_L)} e^{(\beta_R \mathcal{H}_R - \mu_R \hat{N}_R)} e^{(\beta_d \mathcal{H}_d - \mu_d \hat{n}_d)} \right]} \quad (29)$$

となる. ここで, $\beta_\alpha = \frac{1}{kT_\alpha}$, μ_α ($\alpha = L, R, d$) は, 電極 L, R とドット部の逆温度と化学ポテンシャルで, ドット部の全電子数は $\hat{n}_d := \sum_\sigma \hat{n}_{d\sigma}$ と定義している.

観測量 (26) をもう少し変形して

$$\langle \mathcal{O}_S \rangle = \langle \mathcal{U}(-\infty, \infty) \mathcal{U}(\infty, 0) \mathcal{O}_I(0) \mathcal{U}(0, -\infty) \rangle_0 \quad (30)$$

$$= \langle T_C \mathcal{U}_C \mathcal{O}_I(0^-) \rangle_0 \quad (31)$$

と書き換えることができる. ただし, C は図2に示したケルディッシュ経路で, T_C はケルディッシュ経路に沿って演算子を並べる経路順演算子である. さらに, このケルディッシュ経路に沿った時間発展の演算子は

$$\mathcal{U}_C = \mathcal{U}(-\infty, \infty) \mathcal{U}(\infty, -\infty) = T_C \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_C dt' \mathcal{H}_{1,I}(t') \right] \quad (32)$$

と与えることができる. つまり, 時刻 $t = -\infty$ から時刻 $t = \infty$ まで時間発展し, その後, 折り返して時刻 $t = -\infty$ まで戻るように時間発展し途中, “往路上”の時刻 $t = 0$ で観測量 \mathcal{O}_S を経由することで, この観測量の期待値が求まる. このとき, “往路上”の時刻 $t = 0$ を 0^- と書くように定義した. より一般には時間を t^μ とし, 往路にあれば $\mu = -$, 復路にあれば $\mu = +$ となるようにラベル付ける^{*3}. ただし, このラベルは演算子をケルディッシュ経路上の往路, 復路いずれに配置するかを決めるものであって, 実際の時間 t そのものがこのラベルの自由度を持つわけではない. 一旦, 配置が決

^{*3} 逆に往路に +, 復路に - とラベル付けする流儀も多くある. 本質は何も変わらないが, 読んでいる論文, 教科書の議論がどちらの流儀を採用しているには注意する.

まってしまうれば経路の自由度は時間から消してしまう。以上より、さらに時刻 t での物理量の期待値は

$$\langle \mathcal{O}_S(t) \rangle = \langle T_C \mathcal{U}_C \mathcal{O}_I(t^-) \rangle_0 \quad (33)$$

となる。

次節ではケルディッシュ形式の期待値を用いてグリーン関数を定義し、左右の電極にバイアス電圧が印加された非平衡状態での電流の計算を行う。

3.4 ケルディッシュ-グリーン関数を用いた電流の計算

電流を L, R について対称化した、対称化電流演算子

$$\hat{I}_{\text{sym}} := \frac{1}{\Gamma_L + \Gamma_R} \left(\Gamma_R \hat{I}_L - \Gamma_L \hat{I}_R \right) \quad (34)$$

を導入すると、計算が少し簡単になる。いま、電極が2つだけ ($\alpha = L, R$) の系を考えているため、電流保存より、 $\langle \hat{I}_{\text{sym}} \rangle = \langle \hat{I}_L \rangle = -\langle \hat{I}_R \rangle$ であることを利用して、平均電流を計算する。具体的に左右のリード電極の電流演算子 (21) 式を代入すると、平均電流は

$$\begin{aligned} I = \langle \hat{I}_{\text{sym}} \rangle &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{\sigma} \left[\langle d_{\sigma}^{\dagger} (v_L \Gamma_R \psi_{L\sigma} - v_R \Gamma_L \psi_{R\sigma}) \rangle - \left\langle \left(v_L^* \Gamma_R \psi_{L\sigma}^{\dagger} - v_R^* \Gamma_L \psi_{R\sigma}^{\dagger} \right) d_{\sigma} \right\rangle \right] \\ &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{\sigma} \sqrt{\rho_c} \int_{-D}^D d\varepsilon \left[\langle d_{\sigma}^{\dagger} (v_L \Gamma_R c_{\varepsilon L\sigma} - v_R \Gamma_L c_{\varepsilon R\sigma}) \rangle \right. \\ &\quad \left. - \left\langle \left(v_L^* \Gamma_R c_{\varepsilon L\sigma}^{\dagger} - v_R^* \Gamma_L c_{\varepsilon R\sigma}^{\dagger} \right) d_{\sigma} \right\rangle \right] \quad (35) \end{aligned}$$

となる。この電流の期待値を計算するために、次の3つのグリーン関数

$$G_{\varepsilon\alpha d\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \langle T_C c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t^{\mu}) d_{\sigma}^{\dagger}(t^{\nu}) \rangle, \quad (36)$$

$$G_{d\varepsilon\alpha\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \langle T_C d_{\sigma}(t^{\mu}) c_{\varepsilon\alpha\sigma}^{\dagger}(t^{\nu}) \rangle, \quad (37)$$

$$G_{d\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \langle T_C d_{\sigma}(t^{\mu}) d_{\sigma}^{\dagger}(t^{\nu}) \rangle, \quad (38)$$

を定義する。ただし、 μ, ν は $-, +$ をとり、ケルディッシュ成分を表す。このケルディッシュ形式で定義されたグリーン関数は、特にケルディッシュ-グリーン関数と呼ばれる。ケルディッシュ-グリーン関数を用いて、電流を書き換えると

$$\begin{aligned} I = \frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} \sqrt{\rho_c} \int_{-D}^D d\varepsilon \{ & [v_L \Gamma_R G_{\varepsilon L d\sigma}^{-+}(0) - v_R \Gamma_L G_{\varepsilon L d\sigma}^{-+}(0)] \\ & - [v_L^* \Gamma_R G_{d\varepsilon L\sigma}^{-+}(0) - v_R^* \Gamma_L G_{d\varepsilon R\sigma}^{-+}(0)] \} \quad (39) \end{aligned}$$

となる。このケルディッシュ-グリーン関数はその運動方程式を解くことで、ドット部分のグリーン関数と関連付けられ、

$$\begin{aligned} \sqrt{\rho_c} \int_{-D}^D d\varepsilon [v_L \Gamma_R G_{\varepsilon L d\sigma}^{-+}(0) - v_R \Gamma_L G_{\varepsilon L d\sigma}^{-+}(0)] \\ = i \Gamma_L \Gamma_R \int \frac{d\omega}{2\pi} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \bar{G}_{d\sigma}^a(\omega), \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\rho_c} \int_{-D}^D d\varepsilon [v_L^* \Gamma_R G_{d\varepsilon L\sigma}^{-+}(0) - v_R^* \Gamma_L G_{d\varepsilon R\sigma}^{-+}(0)] \\ = i \Gamma_L \Gamma_R \int \frac{d\omega}{2\pi} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \bar{G}_{d\sigma}^r(\omega), \quad (41) \end{aligned}$$

が得られる*4. ただし, $\bar{G}_{d\sigma}^{r/a}(\omega)$ はドット部のグリーン関数 (38) の, 周波数表示での遅延/先進グリーン関数である. これにより平均電流は,

$$I = \frac{e}{h} \int d\hbar\omega T_\sigma(\omega) [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad (42)$$

と得られる. ただし, 透過係数は, ドット部の状態密度 $\rho_{d\sigma}(\omega) = -\text{Im}\bar{G}_{d\sigma}^r(\omega)/\pi$ を用いて,

$$T_\sigma(\omega) = 2\pi \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\Gamma_L + \Gamma_R)} \rho_{d\sigma}(\omega) \quad (43)$$

と与えられる. さらに, 左右のリード電極のフェルミ分布関数は $f_\alpha(\omega) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega - \mu_\alpha}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}$ である. 以上より平均電流の表式 (42) は, 電圧バイアスのウインドウ内 ($-eV/2 < \omega < eV/2$) に量子ドットの電子状態があれば, その状態を介して電子のトンネルが起こり, 電流が発生することを意味している. さらに, 線型コンダクタンスは平均電流を微分することで

$$G = \left. \frac{dI}{dV} \right|_{V=0} = \frac{e^2}{h} \sum_\sigma \int d\omega T_\sigma(\omega) \left[-\frac{d}{d\omega} f(\omega) \right] \quad (44)$$

と得られる.

3.5 相互作用のない量子ドットの電流ノイズ ($U = 0$)

電流ノイズは (11) 式に電流演算子 (21) に代入して, ケルディッシュグリーン関数を用いれば具体的に計算できて,

$$S = \frac{2e^2}{h} \sum_\sigma \int d\omega T_\sigma(\omega) [1 - T_\sigma(\omega)] [f_L(\omega) - f_R(\omega)]^2 + \frac{2e^2}{h} \sum_\sigma \int d\omega T_\sigma(\omega) \{f_L(\omega) [1 - f_L(\omega)] + f_R(\omega) [1 - f_R(\omega)]\} \quad (45)$$

と, 平均電流と同様にドット部分の透過係数と左右のリードの電流のフェルミ分布関数で記述される*5. また, 相互作用が有限の場合 ($U \neq 0$) は, 電流ノイズは2体の相関関数であるために, パーテックス補正による項が加わり, ショットノイズを増幅し, 興味深い特性を持つ [9, 19, 20].

まず, 非相互作用極限 $U = 0$ の電流ノイズの性質を, 具体的に絶対零度 $T = 0$ と平衡 $eV = 0$ の場合を例にとり, 考えてみる.

3.5.1 絶対零度 $T = 0$

絶対零度では, 電流ノイズの第二項はゼロとなって消えるため,

$$S = \frac{2e^2}{h} \sum_\sigma \int d\omega T_\sigma(\omega) [1 - T_\sigma(\omega)] [f_L(\omega) - f_R(\omega)]^2 = \frac{2e^2}{h} \sum_\sigma \int_{-eV/2}^{eV/2} d\omega T_\sigma(\omega) [1 - T_\sigma(\omega)] \quad (46)$$

*4 計算の詳細は付録を参照.

*5 この計算過程は, 例えば, テキスト [12] などに詳しく示されている. 電流ノイズの場合も, 電極が2つだけの系であれば, 対称化した電流を用いると, 計算がしやすい.

となる。これは輸送が起こる $-eV/2 \leq \hbar\omega \leq +eV/2$ の各エネルギーごとに、入射した電子が、透過か反射の二項分布にしたがって揺らぎを起こしている。この電流ノイズは分配ノイズと呼ばれる。

特に透過係数が十分に小さければ ($T_\sigma(0) \ll 1$)、電流ノイズと平均電流はそれぞれ、

$$S \sim \frac{2e^2}{h} |V| \sum_{\sigma} T_{\sigma}(0), \quad (47)$$

$$I \sim \frac{e^2}{h} V \sum_{\sigma} T_{\sigma}(0) \quad (48)$$

となり、その比から

$$\frac{S}{2I} = \pm e \quad (49)$$

と、電子の素電荷が得られる。符号は電流の向き (バイアス電圧の印加方向) に起因している。これは非常に小さい確率で電子が量子ドットを透過し、ポアソン過程により透過電流が発生し、電子の素電荷が電流ノイズに現れている。

また、これとは逆に透過係数がほとんど 1 に近い場合も反射電流が小さい確率で起こるため、反射電流のショットノイズを考えることができる。粒子正孔対称なとき ($\epsilon_d = 0, v_L = v_R$)、量子ドット部の遅延グリーン関数は $\tilde{G}_{d\sigma}^r(\omega) = 1/(\omega - \epsilon_d + \Gamma)$ であるから、透過係数は

$$T_{\sigma}(\omega) = \frac{\Gamma^2}{\omega^2 + \Gamma^2} \quad (50)$$

となる。これより、フェルミ準位 $\omega = 0$ で完全透過となり、その付近でも透過係数は小さいことがわかる。このとき、平均電流と電流ノイズをバイアス電圧 V の 3 次まで求めると

$$I = \frac{2e^2}{h} V - \frac{2e}{h} \frac{1}{12} eV \left(\frac{eV}{\Gamma} \right)^2, \quad (51)$$

$$S = \frac{4e^2}{h} \frac{1}{12} |eV| \left(\frac{eV}{\Gamma} \right)^2 \quad (52)$$

が得られる。線型電流はユニタリ極限の電流で、フェルミ面での完全透過 ($T_{\sigma}(0) = 1$) からくる電流のため、揺らがない。そこで、後方散乱された電流 $I_b := \frac{2e^2}{h} V - I$ を考えると、電流ノイズは 2 端子系なので S は後方散乱電流の電流ノイズと同じである。以上より、後方散乱電流について平均電流とノイズの比は、 $S/(2I_b) = \pm e$ となる。これは透過係数がフェルミ面の外で 1 から少し小さくなり、そこでわずかに反射された電子の電荷が反映されている。

3.5.2 平衡 $eV = 0$

平衡系では、電流ノイズの第一項はゼロとなって消え、さらに $f(\omega) = f_L(\omega) = f_R(\omega)$ となるので

$$\begin{aligned} S &= \frac{4e^2}{h} \sum_{\sigma} \int d\omega T_{\sigma}(\omega) f(\omega) [1 - f(\omega)] \\ &= \frac{4e^2}{h} \sum_{\sigma} \int d\omega T_{\sigma}(\omega) \left[-\frac{k_B T}{\hbar} \right] \frac{d}{d\omega} f(\omega) \end{aligned} \quad (53)$$

となる。線形コンダクタンス (44) を代入すると良く知られたナイキスト-ジョンソンの関係式 $S = 4k_B G T$ が得られる。

4 完全計数統計

まず, 本節以降では特に明記しない限り, 簡単のため単位系 $\hbar = k_B = e = 1$ を用いる.

前節では, 相互作用のない系の電流ノイズを調べるために直接電流相関関数を計算したが, 本節以降では, 電子間相互作用に起因した電流揺らぎを取り扱うため, 完全計数統計を用いる. 完全係数統計では, 電流を構成する電子を計数しその確率分布を調べることで, 電流揺らぎを系統的に調べる [16]. すでに2節でも見たように, キュムラント生成関数を計算してしまえば, 平均電流に対応する一次のキュムラントや電流ノイズの対応する二次のキュムラントばかりではなく, 任意の次数のキュムラントが一度に得られる. さらに, 少し手間をかければ電流の交差相関なども一度に計算できる. 最も重要な利点は, キュムラント生成関数そのものや計算過程には散乱過程についての情報が豊富に含まれ, 電流を引き起こす物理の解釈を得やすいことにある. 一方, 電流ノイズを電流揺らぎの相関関数から直接計算すると, その電流を起こす物理の解釈には個々の散乱過程を調べる必要がある. 以上の理由から, 量子多体効果のような非自明な現象による輸送特性を調べる場合, 完全係数統計を用いることは有効である.

まず, 本節では完全係数統計を導入し, 前節で詳しく明らかにした非相互作用極限 $U = 0$ について完全係数統計を試す. その後, 次節において, 有限 U の場合つまり近藤効果が起こる場合の電流揺らぎについて, 完全係数統計を用いて解析する.

4.1 電流の生成関数の定式化

電子が時間 $[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}]$ の間に, 左のリード電極 $\alpha = L$ から残りの系へ, q だけ移動したとする. この電子数 q についての確率分布 $P(q)$ とその生成関数について定式化する.

まず, 時間 T で電子数が N_L から N'_L へ遷移する確率は

$$\mathcal{P}(N_L \rightarrow N'_L) = \left| \langle N'_L | e^{-i\hat{H}T} | N_L \rangle \right|^2 \quad (54)$$

である. これと時刻 $t = -T/2$ での左リード電極中の電子数の分布関数 $a(N)$ を用いれば, q についての確率分布は

$$P(q, T) = \sum_{N_L} a(N_L) \mathcal{P}(N_L \rightarrow N_L - q) \quad (55)$$

と書くことができる. さらに変形して

$$\begin{aligned}
P(q, \mathcal{T}) &= \sum_{N_L, N'_L} a(N_L) \langle N'_L | e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N_L \rangle \langle N_L | e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N'_L \rangle \delta_{N'_L, N_L - q} \\
&= \sum_{N_L, N'_L} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda a(N_L) \langle N'_L | e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N_L \rangle \langle N_L | e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N'_L \rangle e^{-i(N'_L - N_L + q)\lambda} \\
&= \sum_{N_L, N'_L} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-iq\lambda} a(N_L) \langle N'_L | e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N_L \rangle \langle N_L | e^{i\hat{N}_L\lambda} e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} e^{-i\hat{N}_L\lambda} | N'_L \rangle \\
&= \sum_{N'_L} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-iq\lambda} \langle N'_L | e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} \hat{\rho}_0 e^{i\hat{N}_L\lambda} e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} e^{-i\hat{N}_L\lambda} | N'_L \rangle \\
&= \sum_{N'_L} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-iq\lambda} \langle N'_L | \hat{\rho}_0 e^{i\hat{N}_L\lambda} e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} e^{-i\hat{N}_L\lambda} e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N'_L \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-iq\lambda} \left\langle e^{i\hat{N}_L(-\mathcal{T}/2)\lambda} e^{-i\hat{N}_L(\mathcal{T}/2)\lambda} \right\rangle. \tag{56}
\end{aligned}$$

ここで,

$$\hat{\rho}_0 = \sum_{n_L} a(N_L) |N_L\rangle \langle N_L| \tag{57}$$

は, 時刻 $t = -\mathcal{T}/2$ の密度行列である. また, 平均は

$$\langle \cdots \rangle := \text{Tr}_{N_L} [\cdots] = \sum_{N_L} \langle N_L | \hat{\rho}_0 \cdots | N_L \rangle \tag{58}$$

で定義している. この結果から, 生成関数は

$$\begin{aligned}
\chi(\lambda, \mathcal{T}) &= \sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda q} P(q) \\
&= \left\langle e^{i\hat{N}_L(-\mathcal{T}/2)\lambda} e^{-i\hat{N}_L(\mathcal{T}/2)\lambda} \right\rangle. \tag{59}
\end{aligned}$$

と得られる.

実際に計算を行うため, 生成関数をもう少し書き換えて,

$$\begin{aligned}
\chi(\lambda, \mathcal{T}) &= \sum_{N_L} \langle N_L | \hat{\rho}_0 e^{i\hat{N}_L\lambda} e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} e^{-i\hat{N}_L\lambda} e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N_L \rangle \\
&= \sum_{N_L} \langle N_L | \hat{\rho}_0 e^{i\hat{N}_L\lambda/2} \left[e^{i\hat{N}_L\lambda/2} e^{i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} e^{-i\hat{N}_L\lambda/2} \right] e^{-i\hat{N}_L\lambda/2} e^{-i\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}} | N_L \rangle \\
&= \sum_{N_L} \langle N_L | \hat{\rho}_0 e^{i\hat{\mathcal{H}}^+\mathcal{T}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0\mathcal{T}} e^{i\hat{\mathcal{H}}_0\mathcal{T}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}^-\mathcal{T}} | N_L \rangle \\
&= \langle \mathcal{S}_+(-\mathcal{T}/2, +\mathcal{T}/2) \mathcal{S}_-(+\mathcal{T}/2, -\mathcal{T}/2) \rangle. \tag{60}
\end{aligned}$$

ただし,

$$\mathcal{H}^\mp := e^{i\lambda_\mp \hat{N}_L/2} \mathcal{H}_A^\mp e^{-i\lambda_\mp \hat{N}_L/2} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_T^\mp + \mathcal{H}_U \tag{61}$$

$$\mathcal{H}_T^\mp := e^{i\lambda_\mp \hat{N}_L/2} \mathcal{H}_T e^{-i\lambda_\mp \hat{N}_L/2} \tag{62}$$

$$= \sum_{\sigma} \left(v_L e^{i\lambda_\mp/2} d_{L\sigma}^\dagger \psi_{L\sigma} + v_L^* e^{-i\lambda_\mp/2} \psi_{L\sigma}^\dagger d_{L\sigma} + v_R d_{R\sigma}^\dagger \psi_{R\sigma} + v_R^* \psi_{R\sigma}^\dagger d_{R\sigma} \right) \tag{63}$$

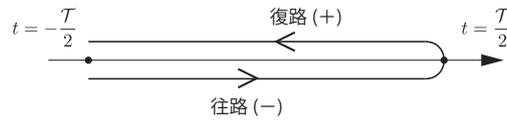


図3 ケルディッシュ経路 C_T . 特に, $T \rightarrow \infty$ は, $C_T \rightarrow C$ と書く.

で, 計数場は独立に λ_{\mp} としたが, $\lambda_{-} = -\lambda_{+} = \lambda$ で, 生成関数 (60) を再現する.

さらに時間発展演算子は

$$\mathcal{S}_{-} \left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2} \right) := e^{i\hat{H}_0 T} e^{-i\hat{H}_A^- T} = T \exp \left\{ -i \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} dt [\mathcal{H}_T^{-}(t) + \mathcal{H}_U(t)] \right\} \quad (64)$$

$$\mathcal{S}_{+} \left(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2} \right) := e^{i\hat{H}_A^{+} T} e^{-i\hat{H}_0 T} = \tilde{T} \exp \left\{ -i \int_{+\frac{T}{2}}^{-\frac{T}{2}} dt [\mathcal{H}_T^{+}(t) + \mathcal{H}_U(t)] \right\} \quad (65)$$

ここで, T, \tilde{T} はそれぞれ時間順序, 反時間順序演算子とする. 図3に示されるケルディッシュ経路 C_T とその経路に依存した計数場を導入すれば, 生成関数はもう少し簡単な形で書けて,

$$\chi(\lambda, T) = \langle \mathcal{S}_{C_T} \rangle \quad (66)$$

となる. ただし, 時間発展演算子は

$$\mathcal{S}_{C_T} = T_{C_T} \exp \left\{ -i \int_C dt [\mathcal{H}_T^{\lambda}(t) + \mathcal{H}_U(t)] \right\} \quad (67)$$

で, ケルディッシュ経路に依存した計数場 $\lambda(t)$ はハミルトニアンの中のトンネル部分へ導入し

$$\mathcal{H}_T^{\lambda} = \sum_{\sigma} \left(v_L e^{i\lambda(t)/2} d_{\sigma}^{\dagger} \psi_{L\sigma} + v_L^* e^{-i\lambda(t)/2} \psi_{L\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + v_R d_{\sigma}^{\dagger} \psi_{R\sigma} + v_R^* \psi_{R\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) \quad (68)$$

と書く. T_{C_T} は演算子を経路順序に並べる演算子である. 経路依存した計数場 $\lambda(t)$ は, 往路に対しては $\lambda_{-} = \lambda$, 復路に対しては $\lambda_{+} = -\lambda$ とする.

重要な事は, 時間発展演算子がケルディッシュ経路に依存するように拡張されたが, ウィックの定理も拡張して適用できることである. つまり, 通常ファインマンダイアグラムを利用した摂動が適用できる. さらに, ここでの議論は不純物アンダーソン模型だけではなく, 散乱体に結合した電子浴の電流についての議論へ, 簡単に一般化できる.

4.2 相互作用のない量子ドット ($U = 0$) のキュムラント生成関数

具体的に相互作用のない量子ドットのキュムラント生成関数を計算する [7]. 往路 (-) の時間発展演算子を展開して, 生成関数は

$$\begin{aligned} \chi_0(\lambda_{-}, \lambda_{+}, T) &= \left\langle \mathcal{S}_{+} \left(-\frac{T}{2}, \frac{T}{2} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_1 \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_2 \cdots \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_n T [\mathcal{H}_T^{-}(t_1) \mathcal{H}_T^{-}(t_2) \cdots \mathcal{H}_T^{-}(t_n)] \right\rangle \\ & \quad (69) \end{aligned}$$

と書ける. したがって, キュムラント生成関数を λ_- で微分すると, 長時間極限 $\mathcal{T} \rightarrow \infty$ では

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_-} \ln \chi_0(\lambda_-, \lambda_+, \mathcal{T}) = -i \int_{-\frac{\mathcal{T}}{2}}^{+\frac{\mathcal{T}}{2}} dt \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{T}}^-(t)}{\partial \lambda_-} \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+} \quad (70)$$

$$\rightarrow -i\mathcal{T} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{T}}(0^-)}{\partial \lambda_-} \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+} \quad (71)$$

ただし, 0^- はケルディッシュ経路で往路上の $t = 0$ を意味し, 期待値は

$$\left\langle \hat{A}(0) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+} = \frac{\left\langle \text{T}_C \mathcal{S}_{C_{\mathcal{T}}} \hat{A}(0) \right\rangle}{\left\langle \mathcal{S}_{C_{\mathcal{T}}} \right\rangle} \quad (72)$$

で定義する. トンネルハミルトニアン (68) を微分して

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_-} \ln \chi_0(\lambda_-, \lambda_+, \mathcal{T}) = \frac{\mathcal{T}}{2} \sum_{\sigma} \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{\rho_c} \left[v_L e^{i\lambda_-/2} \left\langle d_{\sigma}^{\dagger}(0^-) c_{\varepsilon L \sigma}(0^-) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+} \right. \\ \left. - v_L^* e^{-i\lambda_-/2} \left\langle c_{\varepsilon L \sigma}^{\dagger}(0^-) d_{\sigma}(0^-) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+} \right] \quad (73) \end{aligned}$$

が得られる. この式に現れる演算子の平均を計算するために, 一体のグリーン関数を次のように定義する:

$$g_{ab}^{\mu\nu}(t_1 - t_2) := -i \left\langle \text{T}_C a(t_1^{\mu}) b^{\dagger}(t_2^{\nu}) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}. \quad (74)$$

この時, 時間にはケルディッシュ経路に依存した自由度 ($\mu, \nu = -, +$) が加わる. ケルディッシュ経路順であることを考えると, グリーン関数の各成分は

$$g_{ab}^{--}(t_1 - t_2) = -i \left\langle \text{T} a(t_1) b^{\dagger}(t_2) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}, \quad (75)$$

$$g_{ab}^{-+}(t_1 - t_2) = i \left\langle b^{\dagger}(t_2) a(t_1) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}, \quad (76)$$

$$g_{ab}^{+-}(t_1 - t_2) = -i \left\langle a(t_1) b^{\dagger}(t_2) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}, \quad (77)$$

$$g_{ab}^{++}(t_1 - t_2) = -i \left\langle \tilde{\text{T}} a(t_1) b^{\dagger}(t_2) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+} \quad (78)$$

絶対零度のグリーン関数では時間発展の往路と復路が分離するために, 往路のみのグリーン関数で議論ができるが, 今考えているような粒子の移動が起こる非平衡な状況では, 往路と復路が分離しないため, 4成分のグリーン関数が必要となる. $\lambda_{\mp} = 0$ とすれば, 通常のケルディッシュグリーン関数の定義そのものとなる.

具体的にドット部のグリーン関数, リード-ドット間のグリーン関数, リード電極の無摂動のグリーン関数 ($v = 0, U = 0$) をそれぞれ,

$$g_{\dot{a}}^{\mu\nu}(t_1 - t_2) := -i \left\langle \text{T}_C d_{\sigma}(t_1^{\mu}) d_{\sigma}^{\dagger}(t_2^{\nu}) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}, \quad (79)$$

$$g_{\varepsilon\alpha d}^{\mu\nu}(t_1 - t_2) := -i \left\langle \text{T}_C c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t_1^{\mu}) d_{\sigma}^{\dagger}(t_2^{\nu}) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}, \quad (80)$$

$$g_{d\varepsilon\alpha}^{\mu\nu}(t_1 - t_2) := -i \left\langle \text{T}_C d_{\sigma}(t_1^{\mu}) c_{\varepsilon\alpha\sigma}^{\dagger}(t_2^{\nu}) \right\rangle_{\lambda_-, \lambda_+}, \quad (81)$$

$$g_{\varepsilon\alpha\varepsilon'\alpha'}^{0\mu\nu}(t_1 - t_2) := -i \left\langle \text{T}_C c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t_1^{\mu}) c_{\varepsilon'\alpha'\sigma}^{\dagger}(t_2^{\nu}) \right\rangle_0 \quad (82)$$

と定義する. そうすると, (73) 式は, リード-ドット間のグリーン関数の $(-, -)$ 成分書くことができる. 更にこのリード-ドット間のグリーン関数はその運動方程式を解くと, ドット部のグリーン関数

とリード部分の無摂動グリーン関数の周波数表示によって表すことができ、

$$\begin{aligned} & \ln \chi_0(\lambda_-, \lambda_+, \mathcal{T}) \\ &= -i\mathcal{T} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\rho_c |v_L|^2}{2} \int_{-D}^D d\varepsilon \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\eta\omega} \left[e^{i\bar{\lambda}/2} \bar{g}_{\varepsilon L \varepsilon L}^{0-+}(\omega) \bar{g}_d^{+-}(\omega) - e^{-i\bar{\lambda}/2} \bar{g}_d^{-+}(\omega) \bar{g}_{\varepsilon L \varepsilon L}^{0+-}(\omega) \right] \end{aligned} \quad (83)$$

が得られる。ドット部のグリーン関数は、具体的に解くことができ、絶対零度では、

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_-} \ln \chi_0(\lambda_-, \lambda_+, \mathcal{T}) = \frac{\partial}{\partial \lambda_-} \left(i2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln \{ \det [\bar{g}_d^{-1}(\omega)] \} \right) \quad (84)$$

が得られる。ただし、 $\bar{\lambda} = \frac{1}{2}(\lambda_- - \lambda_+)$ で、 $\bar{g}_d(\omega)$ はドット部の各ケルディッシュ成分を要素に持つ行列とする:

$$\bar{g}_d(\omega) = \begin{pmatrix} \bar{g}_d^{--}(\omega) & \bar{g}_d^{-+}(\omega) \\ \bar{g}_d^{+-}(\omega) & \bar{g}_d^{++}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (85)$$

(84) 式を積分し、規格化条件 $\ln \chi_0(0, 0) = 0$ で積分定数を決め、 $\lambda_- = -\lambda_+ = \lambda$ を代入することで、最終的にキュムラント生成関数が

$$\begin{aligned} & \ln \chi_0(\lambda, \mathcal{T}) \\ &= \frac{2\mathcal{T}}{2\pi} \int d\omega \ln (1 + T(\omega) \{ (e^{-i\lambda} - 1) [1 - f_L(\omega)] f_R(\omega) + (e^{-i\lambda} - 1) [1 - f_R(\omega)] f_L(\omega) \}) \end{aligned} \quad (86)$$

と得られる。実際にこの生成関数を計数場 λ で微分し、 eC_1/\mathcal{T} , $2e^2C_1/\mathcal{T}$ を計算すると、3節で見た平均電流、電流ノイズの絶対零度の結果と一致する。

5 近藤効果とその非線形電流

前節までは、電子間相互作用のない場合 ($U = 0$) の電流ノイズや完全計数統計について見てきた。ここでは、相互作用を有限にして近藤効果を起こし、電流中に形成される特有の電荷状態を、電流揺らぎの完全計数統計により調べる。

この節では近藤効果の最も強く現れる、粒子正孔対称な場合 ($\epsilon_d = -U/2, v_L = v_R$) の場合を考える。また、議論を簡単にするためバイアス電圧を $V > 0$ とする。

5.1 近藤効果

近藤効果とは基本的な電子の多体现象の一つである [17]。通常、金属を冷やして低温にすると格子振動が抑制され、電気抵抗は小さくなる。しかし、1930年ころから金属の温度を数 K 程度まで下げると抵抗が増幅しはじめ、抵抗値に極小が観測された。その後の実験によって、金属中に混じる磁性不純物が原因であると指摘され、1964年に近藤淳によってホスト金属のスピンが不純物原子のスピンと一重項状態を形成し、フェルミ準位付近に共鳴状態を形成することで、伝導電子が散乱され抵抗が増幅することが明らかにされた。

この近藤状態が形成された低エネルギーの状態は局所フェルミ流体論で記述できる。これはランダウのフェルミ流体論の、クーロン相互作用が不純物 (量子ドット) 準位のみで働く系への拡張に対

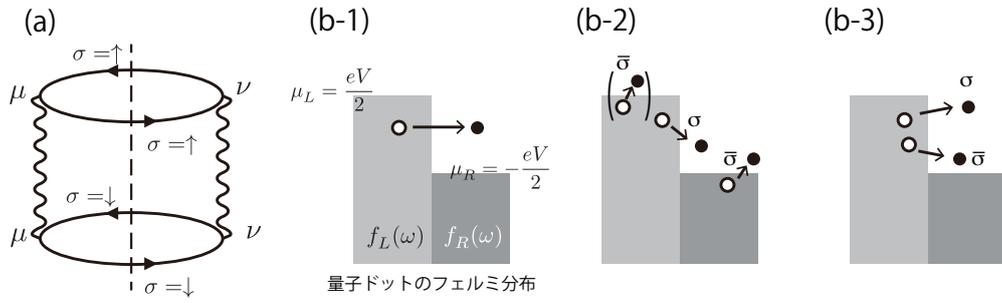


図4 (a) 結合クラスター展開の U の二次の展開のファインマンダイアグラム. 実線は電子の線, 波線はクーロン相互作用に対応する. (b) 量子ドットの中の有効フェルミ分布関数と, 電子正孔対形成による電流の駆動の模式図. (b-1) $U = 0$ のトンネル電子の散乱, (b-2) クーロン相互作用によって形成された二つの電子-正孔対によって駆動された電流で有効電荷は e と (b-3) $2e$ の散乱過程.

応し, 不純物準位中の電子状態はクーロン相互作用が繰り込まれて, 繰り込まれた準位と繰り込まれた線幅を持った準粒子状態を形成する. この時, クーロン相互作用の弱い極限から, クーロン相互作用が強い, 近藤効果は現れる極限まで連続的に繋がっている. そのため, まずクーロン相互作用の2次摂動によって完全計数統計を調べることで, 近藤効果による電流ノイズの概要が理解することが有効である [8, 23].

5.2 キュムラント生成関数のクーロン相互作用 U についての二次摂動による計算

キュムラント生成関数の計算は, (83) 式でドット部分のグリーン関数を相互作用 U を有限にしたものに置き換えることでも実行できる. しかし, U の摂動に関しては以下のように, より直接的にキュムラント生成関数の計算を行うと物理解釈がわかりやすくなる.

生成関数 (66) の対数, キュムラント生成関数に結合クラスター展開を用いれば,

$$\ln \chi(\lambda) = \ln \chi_0(\lambda) + \frac{(-i)^2}{2!} \int_C dt_1 dt_2 \langle \mathcal{H}_U(t_1) \mathcal{H}_U(t_2) \rangle_{\lambda, T, \text{linked}} + \dots \quad (87)$$

と書くことができる^{*6}. 平均は時間 t_1, t_2 の間で繋がったダイアグラムのみをとる. 具体的には図4(a)のダイアグラムになる.

この第2項の相互作用 U の2次の部分は, ドット部のグリーン関数を用いて

$$\begin{aligned} & \frac{(-i)^2}{2!} \int_C dt_1 dt_2 \langle \mathcal{H}_U(t_1) \mathcal{H}_U(t_2) \rangle_{\lambda, \text{linked}} \\ &= -\frac{U^2}{2} \int_C dt_1 dt_2 g_{d\uparrow}(t_1 - t_2) g_{d\uparrow}(t_2 - t_1) g_{d\downarrow}(t_1 - t_2) g_{d\downarrow}(t_2 - t_1) \\ &= -\mathcal{T} \frac{U^2}{2} \sum_{\mu\nu} \sigma_3^{\mu\mu} \sigma_3^{\nu\nu} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \frac{d\omega_3}{2\pi} \bar{g}_{d\uparrow}^{\mu\nu}(\omega_1) \bar{g}_{d\uparrow}^{\nu\mu}(\omega_2) \bar{g}_{d\downarrow}^{\mu\nu}(\omega_3) \bar{g}_{d\downarrow}^{\nu\mu}(\omega_1 - \omega_2 + \omega_3) \\ &= -\mathcal{T} \sum_{\mu\nu} D^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (88)$$

^{*6} 摂動にはトンネル結合 \mathcal{H}_T^λ による摂動もあるが, この部分は U 展開の各次において, 厳密に対角化してしまう. そのため, (87) 式では平均に T を付けている.

と書ける。ただし,

$$D^{\mu\nu} := \sigma_3^{\mu\mu} \sigma_3^{\nu\nu} \frac{U^2}{2} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \frac{d\omega_3}{2\pi} \bar{g}_{d\uparrow}^{\mu\nu}(\omega_1) \bar{g}_{d\uparrow}^{\nu\mu}(\omega_2) \bar{g}_{d\downarrow}^{\mu\nu}(\omega_3) \bar{g}_{d\downarrow}^{\nu\mu}(\omega_1 - \omega_2 + \omega_3) \quad (89)$$

と定義した。この $(-, -), (+, +)$ 成分は繰り込み因子の計算に対応した計算ができて,

$$D^{--} + D^{++} = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{3} \left(\frac{U}{\pi\Gamma} \right)^2 \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) V \left(\frac{V}{\Gamma} \right)^2 (e^{-i\lambda} - 1) + [\lambda\text{-independent term}] \quad (90)$$

と得られる。無摂動項 $\ln \chi_0(\lambda)$ は 3.5.1 節で見た, 粒子正孔対称な場合の電流になり, この項の線幅に繰り込まれる。計数場 λ に依存しない部分も含んでいるが, この項は生成関数の規格化条件から決まるので計算する必要はない。

興味深いのは $(-, +)$ と $(+, -)$ 成分である。その構造を詳しく見る。構成するドット部のグリーン関数は絶対零度 $T = 0$ で,

$$\bar{g}_{d\sigma}^{-+}(\omega) = i\Gamma \left\{ \frac{e^{i\lambda}}{\omega^2 + e^{i\lambda}\Gamma^2} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] + \frac{e^{i\lambda} + 1}{\omega^2 + \Gamma^2} f_R(\omega) \right\}, \quad (91)$$

$$\bar{g}_{d\sigma}^{+-}(\omega) = -i\Gamma \left\{ \frac{1}{\omega^2 + e^{i\lambda}\Gamma^2} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] + \frac{e^{-i\lambda} + 1}{\omega^2 + \Gamma^2} f_L(\omega) \right\} \quad (92)$$

となる。ただし, ハートリー項による準位の繰り込みを取り込んで, ドット準位はフェルミ準位 ($\omega = 0$) にある。低エネルギー $|\omega|, eV \ll \Gamma$ では

$$\bar{g}_{d\sigma}^{-+}(\omega) \sim \frac{i}{\Gamma} [f_L(\omega) + e^{i\lambda} f_R(\omega)], \quad (93)$$

$$\bar{g}_{d\sigma}^{+-}(\omega) \sim -\frac{i}{\Gamma} \{ [1 - f_L(\omega)] - e^{-i\lambda} [1 - f_R(\omega)] \} \quad (94)$$

となる。これを用いて, バイアス電圧の 3 次までを計算すると,

$$D^{-+} + D^{+-} = -\frac{1}{6} \frac{1}{2\pi} \left(\frac{U}{\pi\Gamma} \right)^2 V \left(\frac{V}{\Gamma} \right)^2 (e^{-i\lambda} - 1) - \frac{1}{3} \frac{1}{2\pi} \left(\frac{U}{\pi\Gamma} \right)^2 V \left(\frac{V}{\Gamma} \right)^2 (e^{-i2\lambda} - 1) \quad (95)$$

が得られる。この 2 項目の計数場に係数 “- 2” が現れている。ここから有効電荷 $2e$ の状態が後方散乱電流に形成されていることがわかる。この電流がどのように形成されたかは摂動の過程に戻って考えるとよく分かる。つまり, $(-, +)$ と $(-, +)$ で表される, ドット中の電子と正孔のグリーン関数が 2 つずつで構成されていることがわかる。ドット内のフェルミ分布は (91), (92) 式で $\lambda = 0$ とし得られ, $\frac{1}{2} [f_L(\omega) + f_R(\omega)]$ である。この分布中にエネルギー保存を満たすように電子と正孔を 2 つずつ作ると, 図 4(b-2), (b-3) の 2 パターンだけが可能である。特に分布関数の段差間に渡ってきた電子-正孔対に計数場 $-\lambda$ が一つ付く。つまりこの過程が 2 つある図 4(b-3) の過程によって (95) の 2 項目が得られ, 1 つある (b2) の過程によって (95) の 1 項目が得られる。このクーロン相互作用による散乱が, この系の電流揺らぎを特徴づけている。

5.3 局所フェルミ流体

前節では U についての摂動を 2 次まで行ったが, 無限次まで行うことができれば低エネルギーの厳密な計算が可能である。無限次までの摂動は簡単ではないが, 高次の項がどのように繰り込まれ

るかわかっていれば, 2 次摂動で得られた結果に相互作用を繰り込んでいくことで, 実質, 無限次までの摂動計算が可能である [18]. つまり, 2 次摂動の結果で, 元のドットの電子のパラメータを準粒子の繰り込まれたパラメータ, 残留相互作用 \tilde{U} , 準位幅 $\tilde{\Gamma}$, 準位 $\tilde{\epsilon}_d$ に置き換える:

$$U \longrightarrow \tilde{U} = z^2 \Gamma_{\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow}(0, 0; 0, 0), \quad (96)$$

$$\Gamma \longrightarrow \tilde{\Gamma} = z\Gamma, \quad (97)$$

$$\epsilon_d \longrightarrow \tilde{\epsilon}_d = z[\epsilon_d - \Sigma_d^r(0)]. \quad (98)$$

特に粒子正孔対称な場合 $\tilde{\epsilon}_d = 0$ となる. また, $\tilde{\Gamma}$ は系のエネルギースケールとなり, U の大きい極限では近藤温度 $T_K = \pi\tilde{\Gamma}/4$ と対応する. ただし, 単純にパラメータを置き換えるだけでは繰り込み過ぎになる. キュムラント生成関数中で (90) 式で表される項は無摂動部分に繰り込まれて, 自由準粒子項の線幅に寄与する. したがって, 上記の置き換えでは対応する項を削除する. これはいわゆる紫外発散の繰り込みに対応する. また, 繰り込まれたパラメータは元の系のバーテックス関数 $\Gamma_{\sigma\sigma'; \sigma'\sigma}(\omega, \omega'; \omega', \omega)$, くりこみ因子 z , 自己エネルギー $\Sigma_d^r(\omega)$ によって決まる. 重要なことは, 今の計算の範囲では準粒子の繰り込まれたパラメータは平衡かつ絶対零度 ($eV = 0, T = 0$) で決まるので, 数値繰り込み群や厳密解でその値を求めることができる. また, 物理解釈は前節での電子のクーロン相互作用による散乱を, 準粒子の残留相互作用による散乱とすれば良い.

以上の手順で求めた生成関数から, 任意の次数のキュムラントがバイアス V の 3 次までで,

$$\frac{C_m}{T} = 2 \frac{V}{2\pi} \delta_{m,1} + (-1)^m (P_{b1} + P_{b2} + 2^m P_{b3}) + \mathcal{O}(V^5) \quad (99)$$

と決まる. ここで, $P_{b1} = \frac{1}{12\pi} V \left(\frac{V}{\Gamma}\right)^2$ は準粒子による後方散乱が単位時間あたりに起こる確率 (有効電荷 e), $P_{b2} = \frac{1}{12\pi} \left(\frac{\tilde{U}}{\pi\tilde{\Gamma}}\right)^2 V \left(\frac{V}{\Gamma}\right)^2$ は残留相互作用によって準粒子が 1 つ後方散乱される確率 (有効電荷 e), $P_{b3} = \frac{1}{6\pi} \left(\frac{\tilde{U}}{\pi\tilde{\Gamma}}\right)^2 V \left(\frac{V}{\Gamma}\right)^2$ は残留相互作用によって準粒子対が後方散乱する確率 (有効電荷 $2e$) である. 平均電流と電流ノイズは,

$$I = \frac{C_1}{T} = 2 \frac{V}{2\pi} - P_{b1} - P_{b2} - 2P_{b3}, \quad (100)$$

$$S = 2 \frac{C_2}{T} = 2P_{b1} + 2P_{b2} + 8P_{b3}, \quad (101)$$

となる. このとき, 後方に散乱された電流

$$I_b := 2 \frac{V}{2\pi} - I = P_{b1} + P_{b2} + 2P_{b3} \quad (102)$$

は非常に小さい確率で起こり, ポアソン過程である. この後方散乱された電流の平均とノイズの比は

$$\frac{S}{2eI_b} = \frac{1 + 9 \left(\frac{\tilde{U}}{\pi\tilde{\Gamma}}\right)^2}{1 + 5 \left(\frac{\tilde{U}}{\pi\tilde{\Gamma}}\right)^2} \quad (103)$$

となる [8, 9, 19, 20]. 特に相関の強い近藤極限 ($\frac{U}{\Gamma} \rightarrow \infty$) では残留相互作用が $\frac{\tilde{U}}{\pi\tilde{\Gamma}} \rightarrow 1$ と収束し, ショットノイズ-平均電流比も $\frac{S}{2eI_b} \rightarrow \frac{5}{3}$ に収束する. 残留相互を厳密解を用いて計算することで, 中間のクーロン相互作用領域についても, ショットノイズ-平均電流比をプロットすることができて, 図 5 のようになる. $0 < U/(\pi\Gamma) < 1$ で非相互作用領域から近藤領域へクロスオーバーすることを

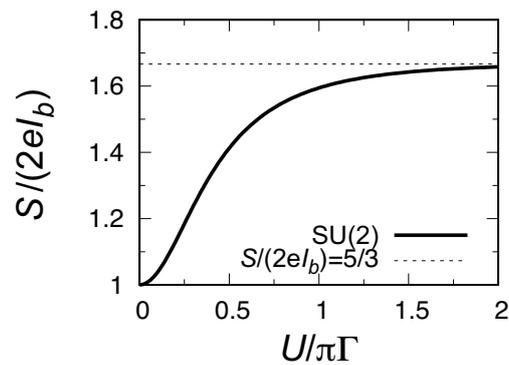


図5 SU(2) アンダーソン模型での、後方散乱電流のショットノイズと平均電流の比 (103) を、ドットサイトのクーロン斥力の関数としてのプロット。破線は $S/(2eI_b) = 5/3 = 1.666\cdots$ で、強いクーロン斥力の極限で、ショットノイズと平均電流の比はこの値に収束している。

反映し、ショットノイズ-平均電流比も大きく上昇する。そして、 $U/(\pi\Gamma) \sim 1$ でほとんど近藤極限での値まで収束していることがわかる。ここまで議論してきた明らかなように、この分数値は励起状態の素電荷そのものではない。有効電荷が e と $2e$ の状態が 1:1 で電流中に混在した結果である。複数の有効電荷状態があるとき、電流の平均とノイズの比 $S/(2I_b)$ は有効電荷の二乗の平均を有効電荷の平均で割ったものである。

6 まとめ

このテキストでは、スピン縮退のある量子ドットの近藤効果による、電流中の有効電荷状態の形成機構について見た。実際の量子ドットには軌道縮退があったり、大きなスピン状態が形成されていることがある。基底状態が局所フェルミ流体になる限りは、ここで見てきたようなドット内の電子間相互作用の摂動による局所フェルミ流体のアプローチが可能で、軌道の縮重度やスピンの大きさに依存した電流-ノイズ比が得られる [20–23]。いずれの場合も、準粒子対が生成されたことに起因して、1 から 2 の間の値をとる。

テキストではバイアス電圧が十分に小さく、粒子正孔対称な場合の近藤効果について扱った。バイアスの大きな極限では厳密解が知られている一方で、中間バイアス状態への遷移では近藤効果は弱められてゆくと予想される、どのように遷移していくかは未だに詳しいことはわかっていない。また、粒子正孔対称性が破れた非平衡 (非線形) 電流や電流ノイズは、局所フェルミ流体だけでは説明できないと考えられ、どのように取り扱うべきかわかっていない。これらは実験では簡単に到達できるにもかかわらず、理論的にはまだはっきりしない点も多く、今後の課題である。

謝辞

このテキストは、小栗章氏をはじめ、荒川智紀、内海裕洋、加藤岳生、小林研介、樽茶清悟、寺谷義道、西川裕規、秦徳郎、Alex C Hewson、Meydi Ferrier、藤井達也、藤原亮、吉井涼輔各氏との議論に基づいている。有益な議論に感謝いたします。また、本研究の一部は科研費 (JP26220711, JP16K17723) の助成を受けて行われた。

参考文献

- [1] R. A. Millikan, Phys. Rev. (Series I) **32**, 349 (1911).
- [2] W. Schottky, der Physik **362**, 541-567 (1918).
- [3] Ya.M. Blanter, and M. Büttiker, Phys. Rep. **336**, 1-166 (2000).
- [4] R. de-Picciotto, M. Reznikov, M. Heiblum, V. Umansky, G. Bunin and D. Mahalu, Nature **389**, 162 (1997).
- [5] L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin, and B. Etienne, Phys. Rev. Lett. **79**, 2526 (1997).
- [6] Lefloch, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 067002 (2003).
- [7] A. O. Gogolin and A. Komnik, Phys. Rev. B **73**, 195301 (2006).
- [8] A. O. Gogolin and A. Komnik, Phys. Rev. Lett. **97**, 016602 (2006).
- [9] E. Sela, Y. Oreg, F. von Oppen, and J. Koch, Phys. Rev. Lett. **97**, 086601 (2006).
- [10] M. Ferrier, T. Arakawa, T. Hata, R. Fujiwara, R. Delagrangé, R. Weil, R. Deblock, R. Sakano, A. Oguri and K. Kobayashi, Nat. Phys. **12**, 230 (2016).
- [11] 量子ドットなどの微細加工された人工系の物理についての教科書として, 勝本信吾, 半導体量子輸送物性, 培風館 (2014); 勝本信吾, メゾスコピック系, 朝倉書店 (2003); 勝本信吾, 実験・人工量子力学 (物理の世界 量子力学 4) 岩波書店 (2003); 家泰弘, 量子輸送現象 (物理の世界 物質科学の展開 2) 岩波書店 (2002) を挙げる.
- [12] H. Hang, A.-P. Jauho, “Quantum Kinetics in Transport and Optics in Semiconductors” (Springer, Berlin, 1996).
- [13] Thomas Frederiksen, “Inelastic electron transport in nanosystems”, (Master Thesis, Department of Micro and Nanotechnology Technical University of Denmark, 2004).
- [14] 小栗章, 物性論研究 vol.71, pp.449-462 (1998).
- [15] A. Oguri, ”Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology”, Edited by M. Rieth and W. Schommers (American Scientific Publishers, California, 2006, ISBN: 1-58883-052-7), Vol. 10, p. 409-435: arXiv:cond-mat/0606316.
- [16] M. Esposito, U. Harbola, and S. Mukamel Rev. Mod. Phys. **81**, 1665 (2009).
- [17] 近藤効果についての教科書として, 芳田奎, 近藤効果とは何か, 丸善 (1990); 山田耕作, 電子相関, 岩波書店 (2000); Alex C Hewson, Kondo problem to heavy fermions, Cambridge university press (1993) などが挙げられる.
- [18] A. C. Hewson, J. Phys.: Condens. Matter, **13**, 10011 (2001).
- [19] T. Fujii, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 044714 (2010).
- [20] R. Sakano, T. Fujii, and A. Oguri, Phys. Rev. B **83**, 075440 (2011).
- [21] C. Mora, P. Vitushinsky, X. Leyronas, A. A. Clerk, and K. Le Hur Phys. Rev. B **80**, 155322 (2009).
- [22] R. Sakano, A. Oguri, T. Kato, and S. Tarucha Phys. Rev. B **83**, 241301(R) (2011).
- [23] R. Sakano, Y. Nishikawa, A. Oguri, A. C. Hewson, and S. Tarucha, Phys. Rev. Lett. **108**, 266401 (2012).

付録 A (40), (41) 式の導出

A.1 グリーン関数の運動方程式

(36-38) で定義されたケルディッシュ-グリーン関数

$$G_{\varepsilon\alpha d\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \langle T_C c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t^\mu) d_\sigma^\dagger(t'^\nu) \rangle, \quad (104)$$

$$G_{d\varepsilon\alpha\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \langle T_C d_\sigma(t^\mu) c_{\varepsilon\alpha\sigma}^\dagger(t'^\nu) \rangle, \quad (105)$$

$$G_{d\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \langle T_C d_\sigma(t^\mu) d_\sigma^\dagger(t'^\nu) \rangle, \quad (106)$$

の運動方程式について考える.

まず, (104) 式の $(\mu, \nu) = (-, -)$ 成分

$$\begin{aligned} G_{\varepsilon\alpha d\sigma}^{--}(t-t') &= -i \langle T c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t) d_\sigma^\dagger(t') \rangle \\ &= -i [\theta(t-t') \langle c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t) d_\sigma^\dagger(t') \rangle - \theta(t'-t) \langle d_\sigma^\dagger(t') c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t) \rangle] \end{aligned} \quad (107)$$

を時間 t で微分すると,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\varepsilon\alpha d\sigma}^{--}(t-t') = -i \left\langle T \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t) \right] d_\sigma^\dagger(t') \right\rangle \quad (108)$$

が得られる. ハイゼンベルグ運動方程式より,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t) &= [c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t), \mathcal{H}_A] \\ &= \varepsilon c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t) + \sqrt{\rho_c} v_\alpha^* d_\sigma(t) \end{aligned} \quad (109)$$

であるから, これを (108) 式に代入して整理することで,

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon \right) G_{\varepsilon\alpha d\sigma}^{--}(t-t') = \sqrt{\rho_c} v_\alpha^* G_{d\sigma}^{--}(t-t') \quad (110)$$

が得られる. 他のケルディッシュ成分についても同様に計算できて, まとめると

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon \right) \mathbf{G}_{\varepsilon\alpha d\sigma}(t-t') = \sqrt{\rho_c} v_\alpha^* \mathbf{G}_{d\sigma}(t-t') \quad (111)$$

となる. ただし, 太字はケルディッシュ成分についての行列で,

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G^{--} & G^{+-} \\ G^{+-} & G^{++} \end{pmatrix}. \quad (112)$$

さらに, フーリエ変換し周波数表示にすると

$$(\hbar\omega - \varepsilon) \bar{\mathbf{G}}_{\varepsilon\alpha d\sigma}(\omega) = \sqrt{\rho_c} v_\alpha^* \bar{\mathbf{G}}_{d\sigma}(\omega) \quad (113)$$

が得られる.

ここで, 孤立したリード電極 α (ハミルトニアン \mathcal{H}_α で表わされる系) の電子のグリーン関数

$$g_{\varepsilon\alpha\varepsilon'\alpha\sigma}^{\mu\nu}(t-t') := -i \left\langle T_C c_{\varepsilon\alpha\sigma}(t^\mu) c_{\varepsilon'\alpha\sigma}^\dagger(t'^\nu) \right\rangle_{\mathcal{H}_\alpha} \quad (114)$$

の運動方程式についても考える. まず $(-, -)$ 成分について, 両辺を t で微分して, 整理することで

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon\right) g_{\varepsilon\alpha\varepsilon'\alpha\sigma}^{--}(t-t') = \delta(t-t')\delta(\varepsilon-\varepsilon') \quad (115)$$

が得られる. その他の成分についても同様に計算できて, まとめると運動方程式は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon\right) \mathbf{g}_{\varepsilon\alpha\varepsilon'\alpha\sigma}(t-t') = \delta(t-t')\delta(\varepsilon-\varepsilon')\boldsymbol{\sigma}_3 \quad (116)$$

と得られる. ただし,

$$\boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (117)$$

である. 運動方程式をフーリエ変換して周波数表示すると,

$$(\hbar\omega - \varepsilon) \bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon\alpha\varepsilon'\alpha\sigma}(\omega) = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \boldsymbol{\sigma}_3 \quad (118)$$

が得られる. これと (113) 式から,

$$\int_{-D}^D d\varepsilon \bar{\mathbf{G}}_{\varepsilon\alpha d\sigma}(\omega) = \sqrt{\rho_c} v_\alpha^* \int_{-D}^D d\varepsilon \bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon\alpha\varepsilon\alpha\sigma}(\omega) \boldsymbol{\sigma}_3 \bar{\mathbf{G}}_{d\sigma}(\omega) \quad (119)$$

が得られる. 以上より, 目的の計算で,

$$\begin{aligned} & \int_{-D}^D d\varepsilon [\Gamma_R \sqrt{\rho_c} v_L \bar{\mathbf{G}}_{\varepsilon L d\sigma}(\omega) - \Gamma_L \sqrt{\rho_c} v_R \bar{\mathbf{G}}_{\varepsilon R d\sigma}(\omega)] \\ &= \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{2\pi} \int_{-D}^D d\varepsilon [\bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon L \varepsilon L \sigma}(\omega) - \bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon R \varepsilon R \sigma}(\omega)] \boldsymbol{\sigma}_3 \bar{\mathbf{G}}_{d\sigma}(\omega) \end{aligned} \quad (120)$$

変形できる. とくにここでの計算では, 電流が対称化されたいのために, 計算過程においても左右の電極の寄与が簡単に対称化された.

いま, リード電極中のグリーン関数 $\bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon\alpha\varepsilon\alpha\sigma}(\omega)$ は具体的に解けていて,

$$\begin{aligned} & \bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon\alpha\varepsilon\alpha\sigma}(\omega) \\ &= \begin{pmatrix} [1 - f_\alpha(\varepsilon)] \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon + i\eta} + f_\alpha(\varepsilon) \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon - i\eta} & i2\pi\delta(\hbar\omega - \varepsilon) f_\alpha(\varepsilon) \\ -i2\pi\delta(\hbar\omega - \varepsilon) [1 - f_\alpha(\varepsilon)] & -[1 - f_\alpha(\varepsilon)] \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon - i\eta} - f_\alpha(\varepsilon) \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon + i\eta} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (121)$$

である. ただし, η は正の微小量. 両辺を ε で積分することで

$$\int_{-D}^D d\varepsilon \bar{\mathbf{g}}_{\varepsilon\alpha\varepsilon\alpha\sigma}(\omega) = i2\pi \begin{pmatrix} f_\alpha(\omega) - \frac{1}{2} & f_\alpha(\omega) \\ f_\alpha(\omega) - \frac{1}{2} & f_\alpha(\omega) - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (122)$$

が得られる. 最後に, これを (120) 式に代入することで

$$\begin{aligned} & \int_{-D}^D d\varepsilon [\Gamma_R \sqrt{\rho_c} v_L \bar{\mathbf{G}}_{\varepsilon L d\sigma}(\omega) - \Gamma_L \sqrt{\rho_c} v_R \bar{\mathbf{G}}_{\varepsilon R d\sigma}(\omega)] \\ &= i\Gamma_L \Gamma_R [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_3 \bar{\mathbf{G}}_{d\sigma}(\omega) \\ &= i\Gamma_L \Gamma_R [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \bar{\mathbf{G}}_{d\sigma}^a(\omega) \end{aligned} \quad (123)$$

が得られ, この $(-, +)$ 成分から (40) 式が確認された.

同様の計算を行うか、もしくはこの式の両辺の複素共役をとることで、

$$\begin{aligned} \int_{-D}^D d\varepsilon [\Gamma_R \sqrt{\rho_c} v_L \bar{\mathbf{G}}_{d\varepsilon L\sigma}(\omega) - \Gamma_L \sqrt{\rho_c} v_R \bar{\mathbf{G}}_{d\varepsilon R\sigma}(\omega)] \\ = i\Gamma_L \Gamma_R [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \bar{\mathbf{G}}_{d\sigma}^r(\omega) \end{aligned} \quad (124)$$

も簡単に得られ、 $(-, +)$ 成分から (41) 式も確認できる。