

物性物理学特論第八
メゾ・ナノスコピック系の電気伝導 壺

川畑有郷

物理系欧文誌刊行センター

2010年6月吉日

メゾスコピック (Mesoscopic) 系とは

マクロスコピック (Macroscopic—目に見える大きさ) よりはやや小さいが、原子の大きさよりは大きく、物質としての性格を保持している。

具体的には、 $1\mu\text{m} \approx 10\text{nm}$ 程度の大きさ (現象による)。

参考文献：

◇ Electron conduction in one-dimension

A. Kawabata, Rep. Prog. Phys. **70** (2007) 219

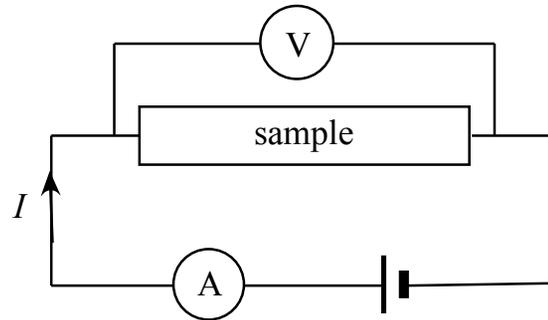
◇ メゾスコピック系の物理学

川畑有郷：培風館 (1997)

◇ ナノスコピック系

メゾスコピック系よりやや小さい (名前の問題)

1. 電気伝導の基礎



諸量の定義： 試料の長さ $\cdots L$, 断面積 $\cdots S$

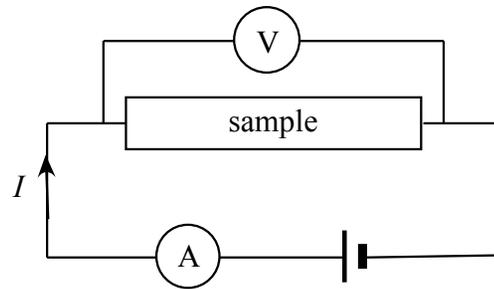
resistance (抵抗) $= \frac{V}{I}$ \cdots 試料の大きさ・形による

conductance (コンダクタンス) $= \frac{I}{V}$ \cdots 試料の大きさ・形による

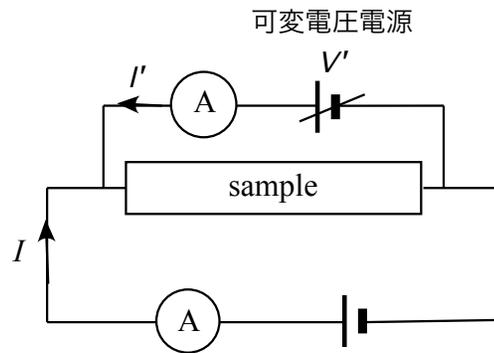
resistivity (抵抗率) $= \frac{VS}{IL}$ \cdots 試料の大きさ・形によらない

conductivity (電気伝導率) $= \frac{IL}{VS}$ \cdots 試料の大きさ・形によらない

◇ 正確な電気伝導率等の測定法 … 4端子法



これでは、 I には電圧計を流れる電流も含まれるので、試料を流れる電流とは正確に等しくない。



$I' = 0$ となるように V' を調整する。資料の両端にかかる電圧は V' 、資料を流れる電流は I であるので、正確な抵抗、コンダクタンスは、

$$\text{resistance (抵抗)} = \frac{V'}{I}, \quad \text{conductance (コンダクタンス)} = \frac{I}{V'}$$

2. 電気伝導の理論

電気伝導の理論は、非平衡状態の理論

非平衡統計力学は確立していない… 難しい！

特に、直流の場合… 端の問題

◇ 久保の理論

無限に大きい試料に一様な電場を加える

電場なしの時のハミルトニアン

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$V(\mathbf{r}_i)$ … 格子, 不純物ポテンシャル, $U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ … クーロンポテンシャル

電場 E を加えたとき (x 方向)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}', \quad \mathcal{H}' = \sum_{i=1}^{N_e} eEx_i, \quad e > 0, \quad \text{電子の電荷} = -e$$

\mathcal{H}' を摂動として、電流を計算 $\left(\mathcal{H}' = \sum_{i=1}^{N_e} eEx_i \right)$

E がいくら小さくても, $x_i \rightarrow \pm\infty$ で $\mathcal{H}' \rightarrow \pm\infty$ となる

単純な摂動ではだめ

\mathcal{H}' を

$$\mathcal{H}'(t) \equiv \mathcal{H}' = \sum_{i=1}^{N_e} eEe^{\delta t} x_i, \quad (\delta \rightarrow +0)$$

で置き換える (Adiabatic switching on) .

◇ 久保公式 電流密度 $j_x = \sigma E$

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt \langle \hat{J}_x(-i\lambda) \hat{J}_x(t) \rangle e^{\delta t}, \quad (\delta \rightarrow +0)$$

$$\hat{J}_x \equiv -\frac{e}{m} \sum_{i=1}^{N_e} \hat{p}_{xi} \cdots \text{電流演算子}, \quad \Omega \cdots \text{体積}$$

$$\hat{J}_x(t) \equiv e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \hat{J}_x e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar}, \quad \hat{J}_x(-i\lambda) \equiv e^{\mathcal{H}_0 \lambda/\hbar} \hat{J}_x e^{-\mathcal{H}_0 \lambda/\hbar}$$

(Heisenberg 表示)

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \hat{A} \}, \quad \beta \equiv \frac{1}{k_B T}, \quad Z \equiv \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \}$$

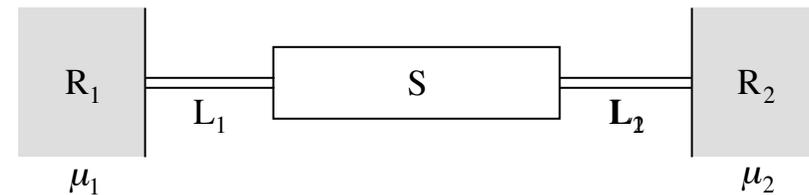
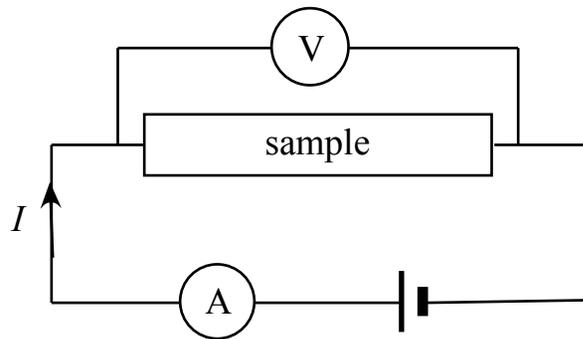
$$\text{Tr} \{ \hat{B} \} \equiv \sum_k \langle \varphi_k, \hat{B} \varphi_k \rangle, \quad \varphi_k \cdots \text{固有状態 (多体)}$$

◇ Landauerの理論

R. Landauer IBM J. Res. & Dev.: **1** (1957) 223

M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas: Phys. Rev. B **31** (1985) 6207

1次元（に近い）系の電気伝導を議論するのに便利
モデル化

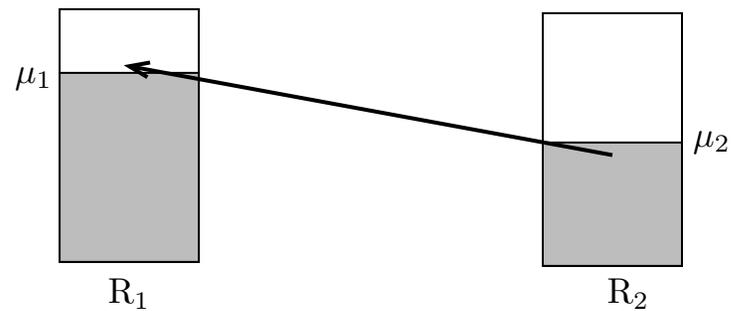


$R_1, R_2 \dots$ reservoirs (電子だめ) $L_1, L_2 \dots$ leads (リード線)

$S \dots$ sample (試料), $\mu_1, \mu_2 \dots$ chemical potential (化学ポテンシャル)

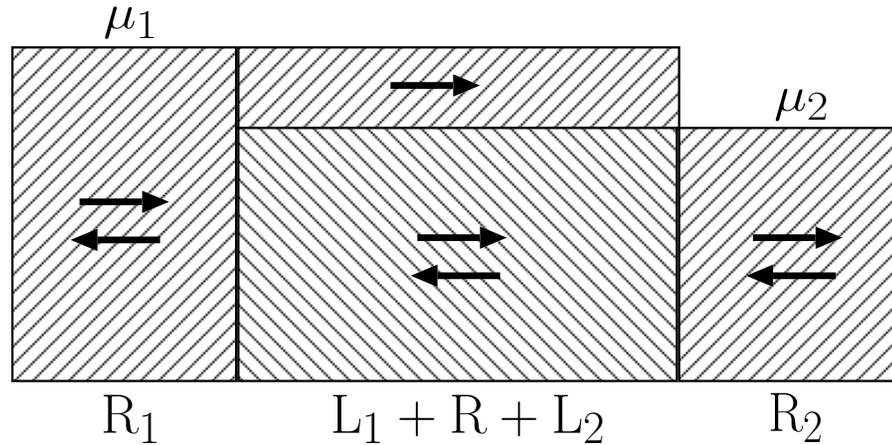
◇ R_1, R_2 間の電位差 $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$

電子を R_2 から R_1 へ運ぶための最小の仕事/e



Landauerの理論における仮定

- ◇ 電子間相互作用（クーロン相互作用）は無視する
- ◇ リード線は理想的で、電子はその中では散乱されない
- ◇ 電子は、試料の中で非弾性散乱を受けない
- ◇ L_1 中では、エネルギーが μ_1 と μ_2 の間で右向きに走る電子の状態はすべて電子が占めている
- ◇ R_1 中では、 L_1 に出た電子はすぐに補給され、化学ポテンシャルは常に μ_1 に保たれる
- ◇ L_2 から R_2 に入った μ_2 より高いエネルギーをもつ電子は、すぐに μ_2 に緩和する
- ◇ R_1 から L_1 に入る電子の波動関数は、すべて incoherent（非干渉）である



L_1 中の、エネルギーが μ_1 と μ_2 の間の状態数

単位長さ当たり

$$\frac{1}{2\pi} \int_{k_2}^{k_1} dk = \frac{k_1 - k_2}{2\pi}, \quad \mu_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \quad (i = 1, 2), \quad k_1 \approx k_2 \approx k_F \text{ とする}$$

電流 (試料が無いとして)

単位時間当たりに電子が走る距離 $\cdots v_F = \hbar k_F / m$

$$I = 2 \times \text{電荷} \times \text{状態数} \times \text{電子の速さ} = 2e \frac{(k_1 - k_2) \hbar k_F}{2\pi m} \quad (\times 2 \text{ は, spin})$$

コンダクタンス

$$G = \frac{I}{V} = 2e \frac{(k_1 - k_2) \hbar k_F}{2\pi m} \frac{e}{\mu_1 - \mu_2} = e \frac{(k_1 - k_2) \hbar k_F}{\pi m} \frac{2em}{\hbar^2 (k_1 + k_2)(k_1 - k_2)}$$
$$= \frac{e^2}{\pi \hbar}, \quad (k_1 + k_2 \approx 2k_F)$$

電子が試料を透過する確率を \mathcal{T} とすると (電子のエネルギーは $\mu_1 \approx \mu_2$)

$$G = \frac{e^2 \mathcal{T}}{\pi \hbar} \cdots \text{Landauer の公式}$$

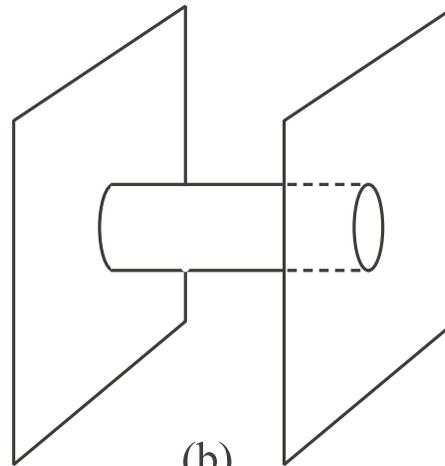
単純！ 非弾性散乱, 電子間相互作用のある場合 (無視出来ない) には使えない

◇ なぜ reservoir が必要か？

古典気体で考える



(a)



(b)

$\mathcal{T} = 1$ でも抵抗 ($1/G$) は有限 ... reservoir と 1次元系の接触抵抗? (J. Imry)

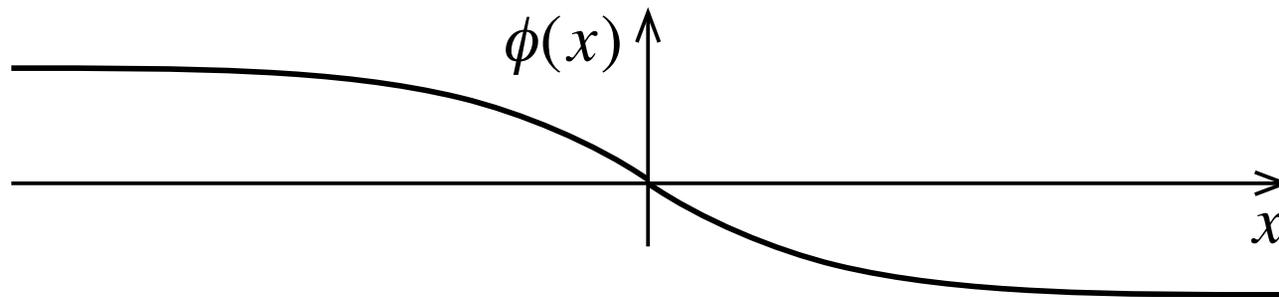
久保公式と Landauer の公式は同じものか？

久保公式から Landauer の公式を導ける

A. Kawabata, Reports on progress in physics **70** (2007) 219

川畑有郷：物理学会論文選集III「メゾスコピック系」解説（川畑有郷・川村清 編集，日本物理学会）

久保公式では，化学ポテンシャルの差の代わりに，ポテンシャル・エネルギーで電流を駆動する

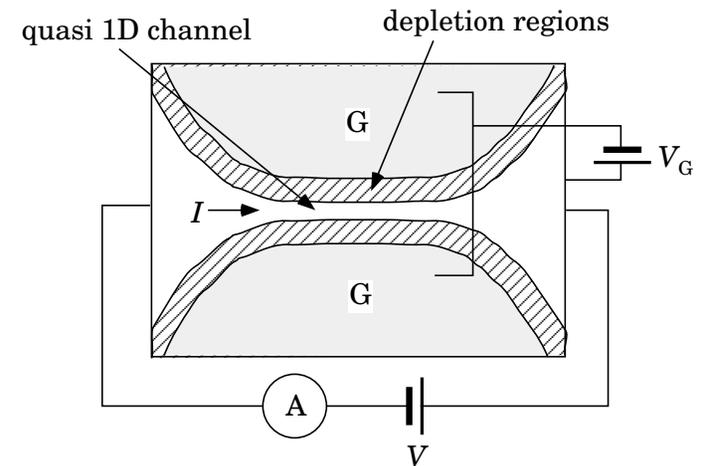
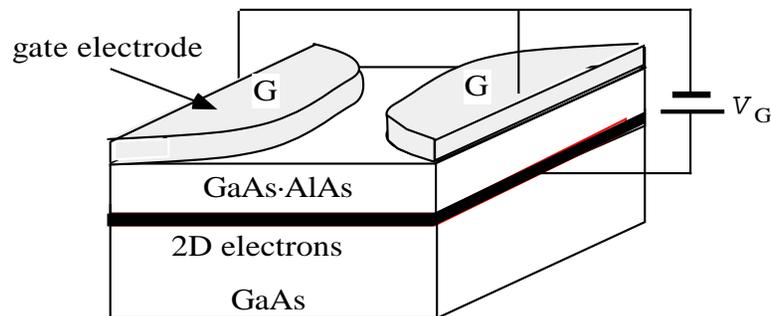


3. 1次元系の電気伝導

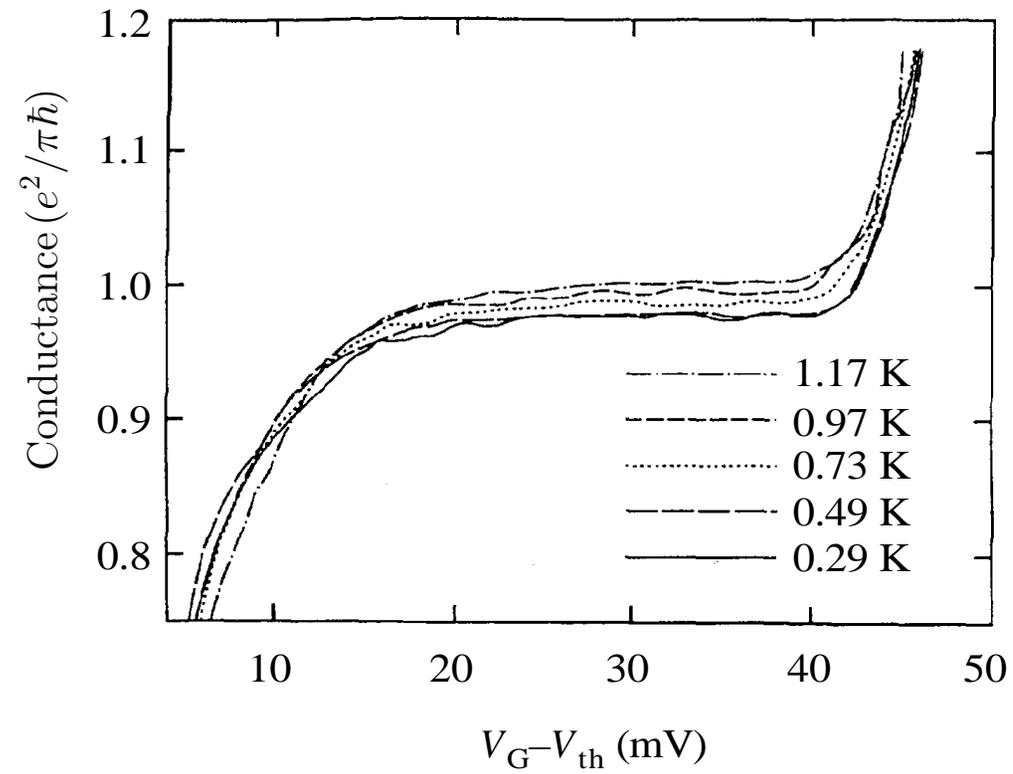
3次元より難しい面もある

◇ 1次元系の実現法

◇ 量子細線 (quantum wire)

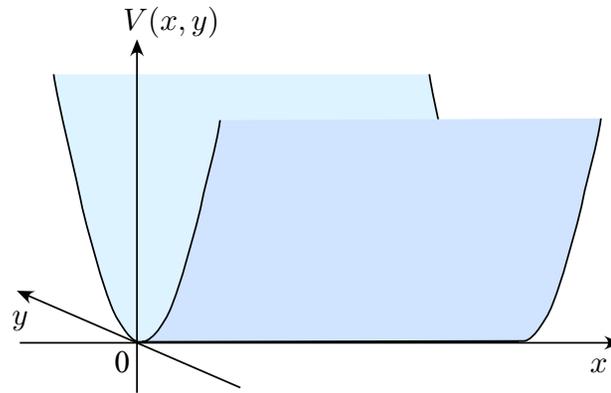


Taruch et al.: SSC **94** (1995) 413.



◇ Multisubband quantum wire

溝ポテンシャル: $V(x, y) = \frac{Ky^2}{2}$



Schrödinger equation

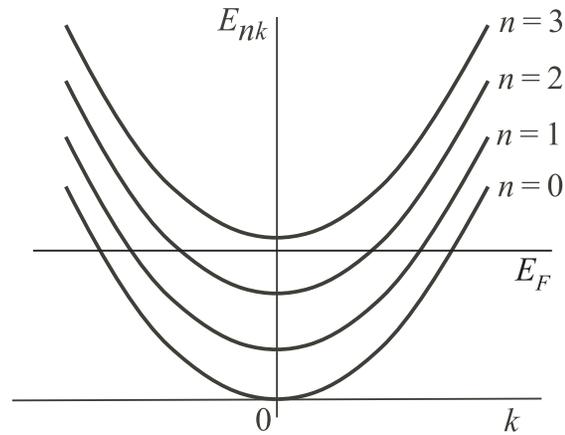
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right\} \Psi(x, y) = E \Psi(x, y)$$

solution: $\Psi_{nk}(x, y) \equiv e^{ikx} \varphi_n(y)$. $n = 0, 1, 2, \dots$ subband

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{Ky^2}{2} \right\} \varphi_n(y) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \varphi_n(y), \quad \omega = \sqrt{K/m}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right\} \Psi_{nk}(x, y) = E_{nk} \Psi_{nk}(x, y)$$

$$E_{nk} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

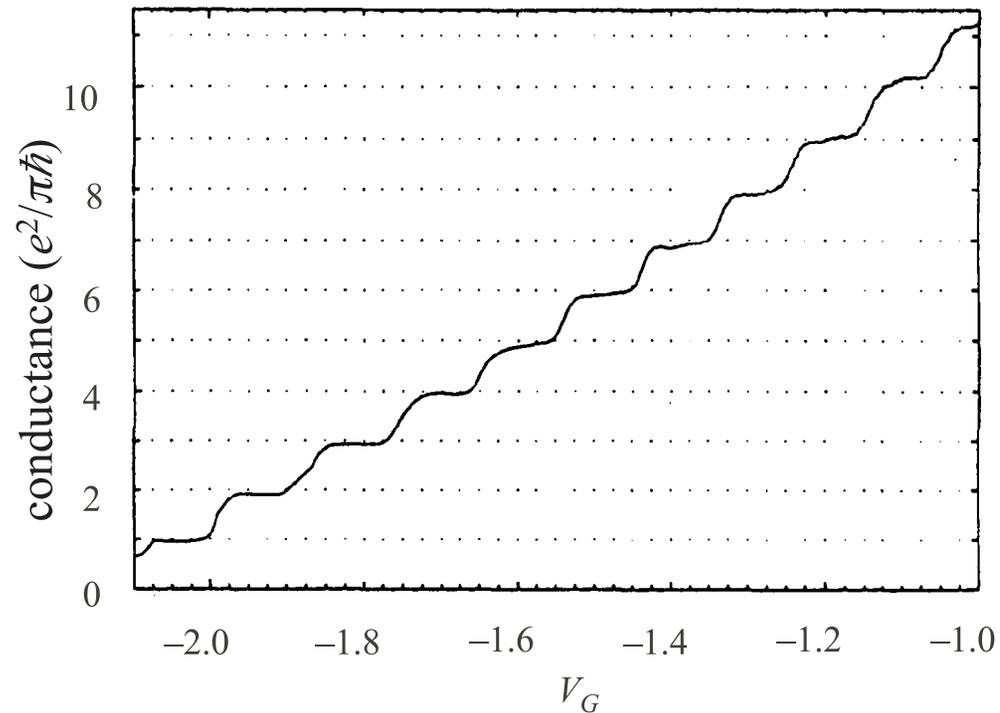


この場合, $n = 2$ の subband まで電子が入る. 各 subband が独立に伝導に寄与すれば,

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{n=0}^2 \mathcal{T}_n$$

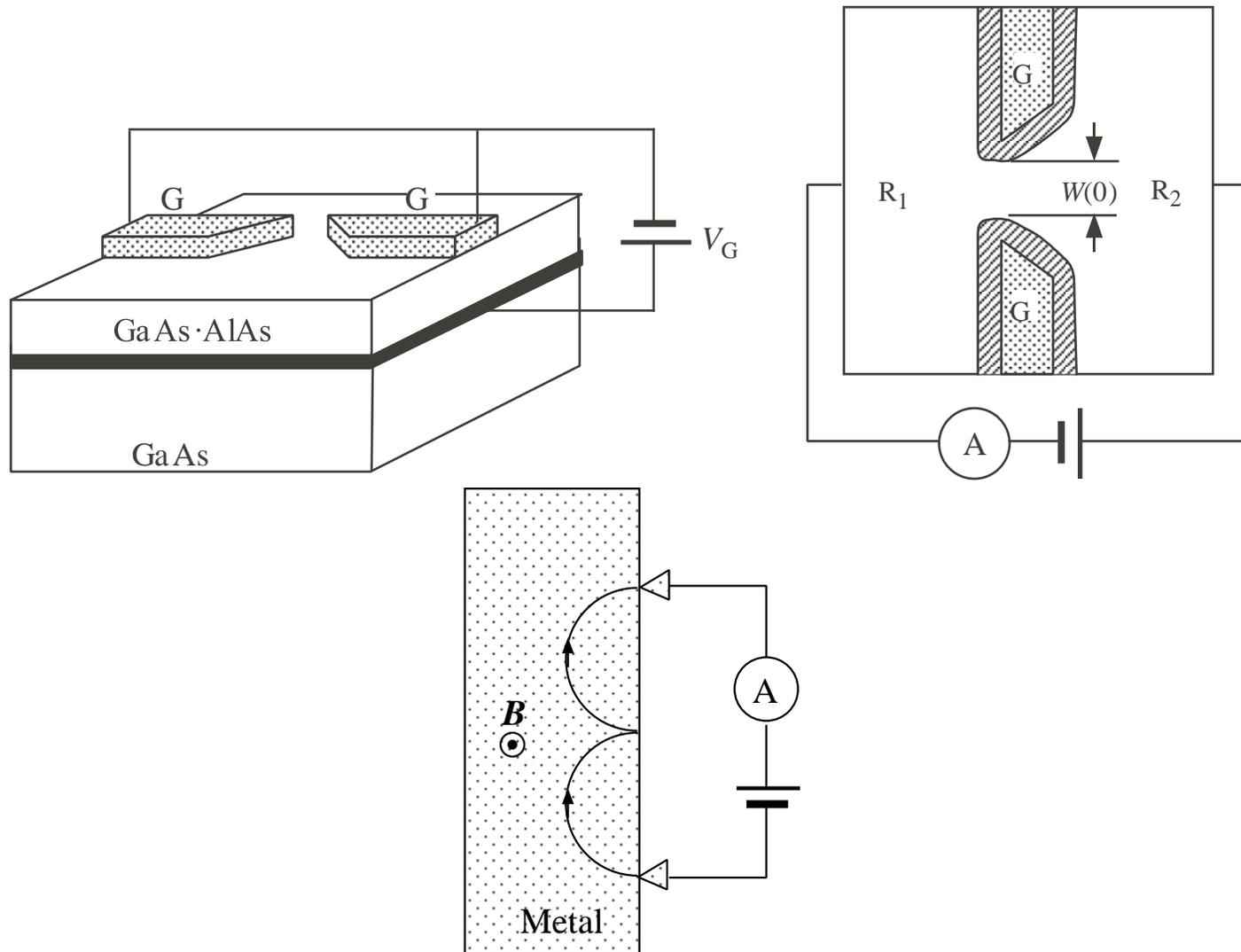
$T_n \approx 1$ ならば, $n = N$ のchannelまで電子が入っていれば,

$$G \approx \frac{e^2}{\pi\hbar}(N + 1) \cdots \text{conductanceの量子化}$$



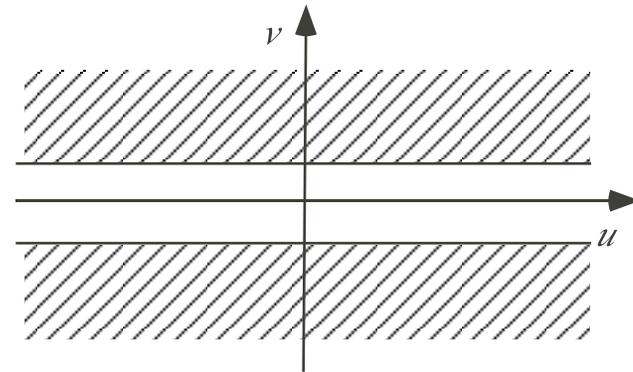
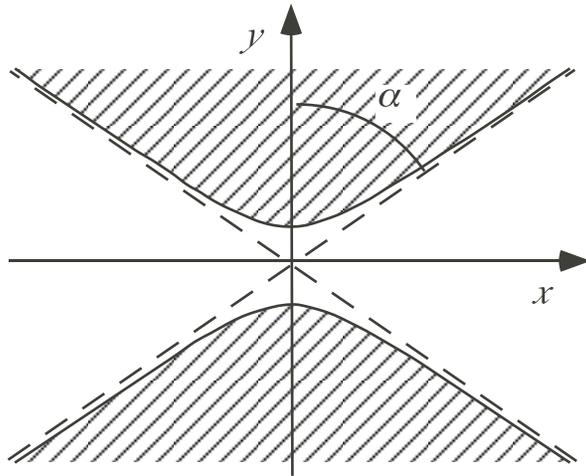
B.J. van Wees et al.: Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 848

B.J. van Wees et al. の試料



◇ Wan Wees et al. の試料でコンダクタンスの量子化が観測できるか？

試料のモデル



$$\frac{y^2}{\cos^2 \alpha} - \frac{x^2}{\sin^2 \alpha} = c^2$$

楕円座標系に変換

$$x = c \sinh u \sin v, \quad y = c \cosh u \cos v$$

$$-\infty < u < \infty, \quad \alpha < v < \pi - \alpha$$

変数分離

$$\Psi(x, y) = U(u)V(v), \quad -\frac{\hbar^2 \Delta \Psi(x, y)}{2\mu} = E\Psi(x, y)$$

$$-\frac{d^2 V(v)}{dv^2} + 4q \cos^2 v V(v) = AV(v) \quad (1)$$

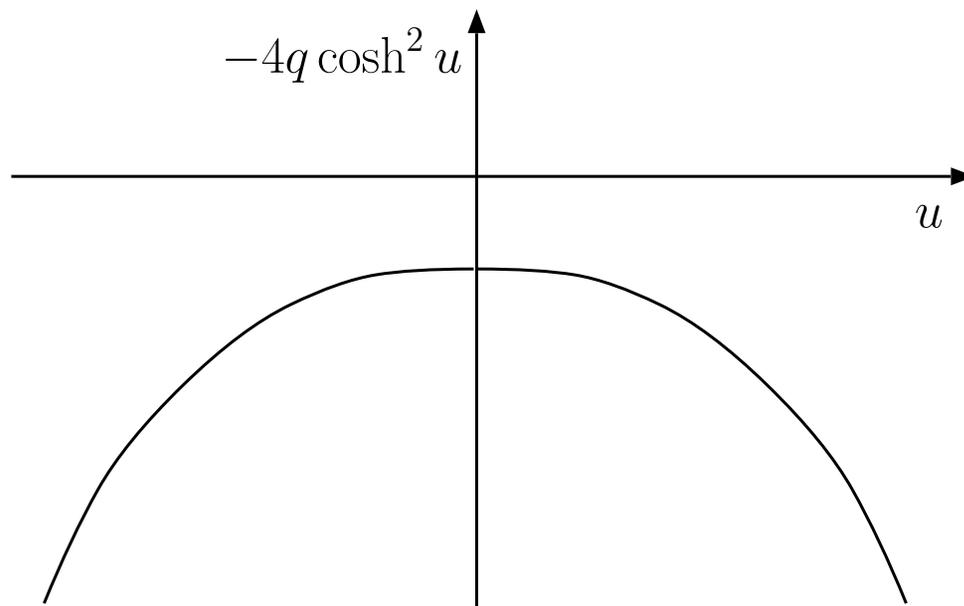
$$-\frac{d^2 U(u)}{du^2} - 4q \cosh^2 u U(u) = -AU(u) \quad (2)$$

$$q = \frac{c^2 \mu E}{2\hbar^2}, \quad E = E_F$$

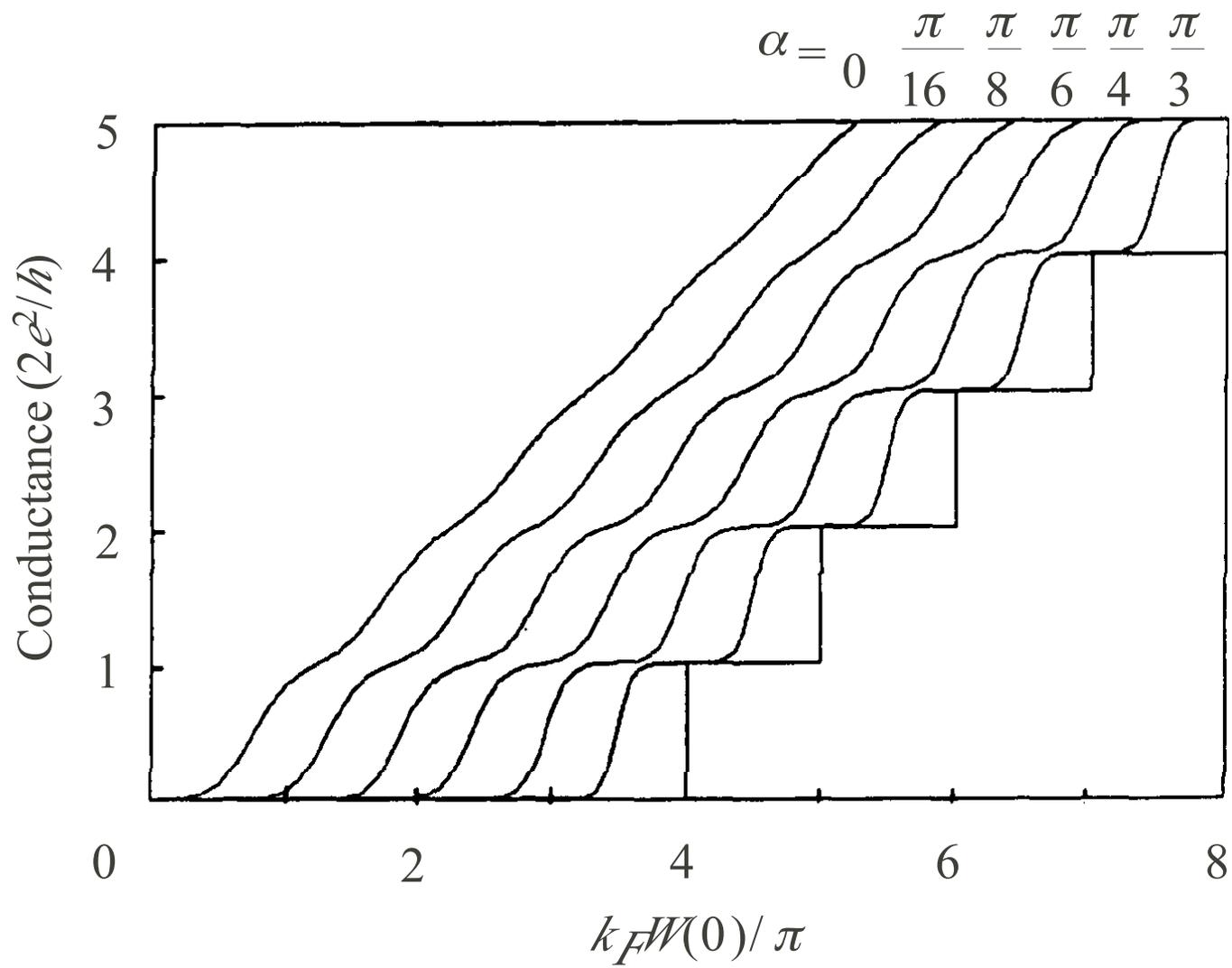
A は、(1) を境界条件 $V(\alpha) = V(\pi - \alpha) = 0$ の下で解いた場合の固有値

$A = A_0 < A_1 < A_2 \cdots \cdots$ subband に相当

(2) は、エネルギー $-A$ の粒子がポテンシャル・エネルギー $-4q \cosh^2 u$ の中で運動するシュレディンガー方程式



ポテンシャル・エネルギーによる散乱（透過率）を計算



4. 1次元系における電子間相互作用の効果

◇ 朝永の理論 S. Tomonaga Prog. Theor. Phys.1950 **5** 544

解説 A. Kawabata, Reports on progress in physics **70** (2007) 219

ハミルトニアン： $\mathcal{H} = \mathcal{H}_K + \mathcal{H}_I$

$$\mathcal{H}_K = \sum_{k, \sigma=\uparrow, \downarrow} \varepsilon(k) a_{k, \sigma}^\dagger a_{k, \sigma}, \quad \varepsilon(k) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

$$\mathcal{H}_I = \frac{1}{2L} \sum_q \hat{V}(q) \rho_{-q} \rho_q$$

$$\rho_q \equiv \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} a_{k-q/2, \sigma}^\dagger a_{k+q/2, \sigma} \cdots \text{電子密度}$$

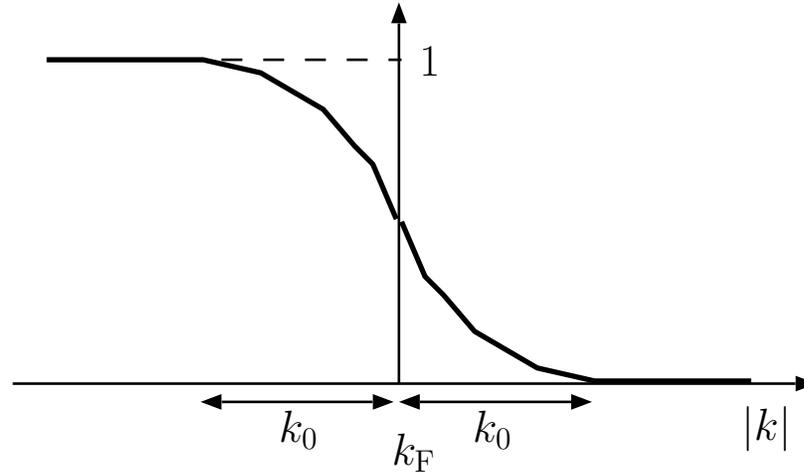
$$\hat{V}(q) \cdots \text{相互作用ポテンシャル } V(x) \text{ のフーリエ成分} \quad \hat{V}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} V(x) e^{-iqx} dx$$

新しい演算子

$$\rho_{q,\sigma}^{\pm} \equiv \sum_{k \geq 0} a_{k-q/2,\sigma}^{\dagger} a_{k+q/2,\sigma} \quad (\text{複合同順})$$

$$\rho_{q,\sigma} \equiv \rho_{q,\sigma}^{+} + \rho_{q,\sigma}^{-}$$

考える状態 Ψ の電子の占有数は,



とする。即ち,

$$a_{k-q/2,\sigma}^{\dagger} \Psi \approx 0, \quad (|k| < k_F - k_0)$$

$$a_{k+q/2,\sigma} \Psi \approx 0, \quad (|k| > k_F + k_0), \quad (|q| < k_0)$$

交換関係

$$[\rho_{q,\sigma}^{\pm}, \rho_{q',\sigma'}^{\pm}] = 0, \quad (\sigma \neq \sigma')$$

$$\begin{aligned} [\rho_{q,\sigma}^{+}, \rho_{q',\sigma}^{+}] &= \sum_{k,k'>0} \left[a_{k-q/2}^{\dagger} a_{k+q/2,\sigma}, a_{k'-q'/2}^{\dagger} a_{k'+q'/2,\sigma} \right] \\ &= \left(\sum_{k>q'/2} - \sum_{k>q/2} \right) a_{k-q/2-q'/2}^{\dagger} a_{k+q/2+q'/2,\sigma} \quad (?) \\ &= \sum_{q/2>k>q'/2} a_{k-q/2-q'/2}^{\dagger} a_{k+q/2+q'/2,\sigma} = 0, \quad (q > q' > 0) \end{aligned}$$

$q > 0, \quad q' = -q$ の場合

$$[\rho_{q,\sigma}^{+}, \rho_{-q,\sigma}^{+}] = \sum_{q/2>k>-q/2} a_{k,\sigma}^{\dagger} a_{k,\sigma} = \frac{Lq}{2\pi}$$

結局

$$[\rho_{q,\sigma}^+, \rho_{q',\sigma}^+] = -[\rho_{q,\sigma}^-, \rho_{q',\sigma}^-] = \frac{Lq}{2\pi} \delta_{q,-q'}, \quad [\rho_{q,\sigma}^+, \rho_{q',\sigma}^-] = 0$$

◇ 運動エネルギーを $\rho_{q,\sigma}^\pm$ で表す

$$\mathcal{H}_K = \sum_{k,\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon(k) a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}, \quad [\mathcal{H}_K, \rho_q^\pm] = \mp \hbar v_F q \rho_q^\pm$$

$$\varepsilon(k + \frac{q}{2}) - \varepsilon(k - \frac{q}{2}) = \frac{\hbar^2(k + q/2)^2}{2\mu} - \frac{\hbar^2(k - q/2)^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k q}{\mu} \approx \hbar v_F q$$

電子の励起を波として扱う ... 集団座標

2, 3次元では, $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2) - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}/2) = \hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}$... \mathbf{q} の方向に依存するのでうまくいかない

同じ交換関係を満たす演算子

$$\bar{\mathcal{H}}_K \equiv \frac{\pi \hbar v_F}{2L} \sum_{q,p=\pm} \rho_{-q}^p \rho_q^p, \quad [\bar{\mathcal{H}}_K, \rho_q^\pm] = \mp \hbar v_F q \rho_q^\pm$$

◇ 有効ハミルトニアン

$$H_s = \frac{1}{2L} \sum_q \left\{ \pi \hbar v_F (\rho_{-q}^+ \rho_q^+ + \rho_{-q}^- \rho_q^-) + \hat{V}(q) (\rho_{-q}^+ + \rho_{-q}^-) (\rho_q^+ + \rho_q^-) \right\}$$

有効ハミルトニアンの対角化

$$\mathcal{H}_s = \sum_{q>0} E_q (B_q^\dagger B_q + C_q^\dagger C_q)$$

$$E_q = q \sqrt{\hbar v_F (\hbar v_F + 2\tilde{V}(q))}, \quad B_q = \alpha_q \rho_q^+ + \beta_q \rho_q^-, \quad C_q = \alpha_q \rho_q^- + \beta_q \rho_q^+$$

$$\alpha_q = \sqrt{\frac{\pi}{2L}} \left\{ \frac{\hbar v_F + \tilde{V}(q)}{E_q} + \frac{1}{q} \right\}^{1/2}, \quad \beta_q = \sqrt{\frac{\pi}{2L}} \left\{ \frac{\hbar v_F + \tilde{V}(q)}{E_q} - \frac{1}{q} \right\}^{1/2}$$

$$\tilde{V}(q) \equiv \hat{V}(q)/\pi$$

$$[B_q, B_{q'}^\dagger] = [C_q, C_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'}, \quad [B_q, C_{q'}] = [B_q, C_{q'}^\dagger] = 0$$

エネルギー E_q をもつ自由な2種類の Boson の集合と同等

Tomonaga-Luttinger liquid, Tomonaga liquid

"A mathematically closed and clear-cut presentation of the theory is achieved, however, at the expense of physical usefulness, because thus far, the author has succeeded only in giving a complete formulation for a one-dimensional assembly of particles"

5. 散乱のない1次元系での電子輸送

Landauerの公式への相互作用の効果は？

電流演算子

$$\begin{aligned} J(x) &= -\frac{e\hbar}{mL} \sum_{k,q,\sigma} k e^{iqx} a_{k-q/2,\sigma}^\dagger a_{k+q/2,\sigma}, \\ &= -\frac{ev_F}{L} \sum_q e^{iqx} (\rho_q^+ - \rho_q^-), \end{aligned}$$

B_q, C_q で書くと

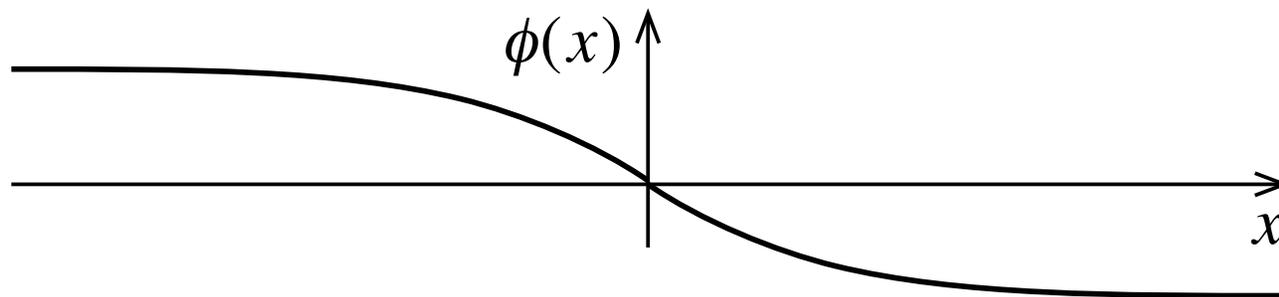
$$J(x) = -\frac{ev_F}{\pi} \sum_{q>0} q(\alpha_q + \beta_q) \left\{ e^{iqx} (B_q - C_q^\dagger) + e^{-iqx} (B_q^\dagger - C_q) \right\}$$

局所伝導率

ポテンシャル・エネルギー $\phi(x)$ を加えた場合の電流

$$I(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\phi(x')}{dx'} \sigma_2(x', x) dx'$$

$$\sigma_2(x', x) \equiv \int_0^{\beta} d\lambda \int_0^{\infty} dt \langle J(x', -i\hbar\lambda) J(x, t) \rangle e^{-\eta t}$$



$$\sigma_2(x', x) = \frac{4}{\pi^2} e^2 v_F^2 \sum_{q>0} \frac{q^2 (\alpha_q + \beta_q)^2}{E_q} \frac{\eta \cos q(x' - x)}{(E_q/\hbar)^2 + \eta^2}, \quad (\eta \rightarrow +0)$$

$$B_q(t) = B_q e^{-itE_q/\hbar}, \quad \langle B_q^\dagger B_{q'} \rangle = \delta_{q,q'} f_B(E_q)$$

$$\sigma_2(x', x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{4e^2 \delta(q) \cos q(x' - x)}{\sqrt{1 + 2\hat{V}(q)/(\pi\hbar v_F)}} dq = \frac{e^2}{\sqrt{1 + \gamma} \pi \hbar}, \quad \gamma \equiv \frac{2\hat{V}(0)}{\pi\hbar v_F}$$

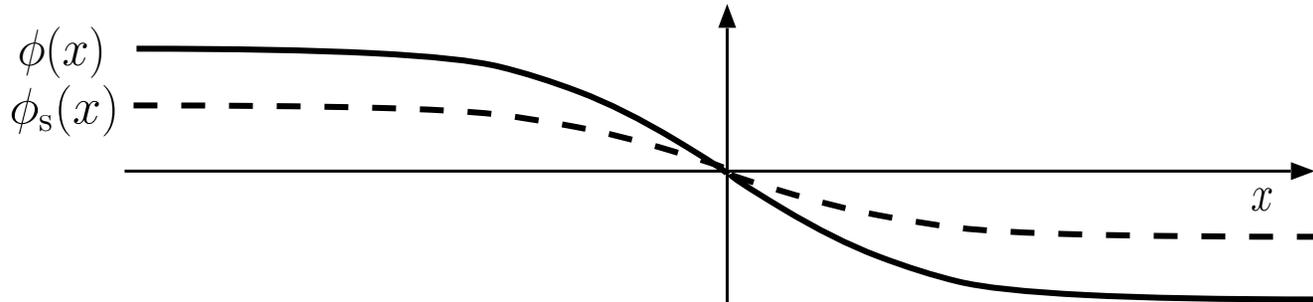
電流

$$I(x) = - \int_{-\infty}^\infty \frac{d\phi(x')}{dx'} \sigma_2(x', x) dx' = \frac{e^2}{\sqrt{1 + \gamma} \pi \hbar} (\phi(-\infty) - \phi(\infty))$$

$$G = \frac{e^2}{\sqrt{1 + \gamma} \pi \hbar} \quad \dots \text{相互作用による補正?}$$

実ほうそ … 実験では観測されない

電流減少の理由 … 遮蔽効果で有効ポテンシャルが減少する



遮蔽されたポテンシャルを計算すると

$$\phi_s(x) = \frac{\phi(x)}{\sqrt{1 + \gamma}}, \quad I(x) = \frac{e^2}{\pi \hbar} (\phi_s(-\infty) - \phi_s(\infty))$$

実際に観測される電位差（電子が感じる電位差）は

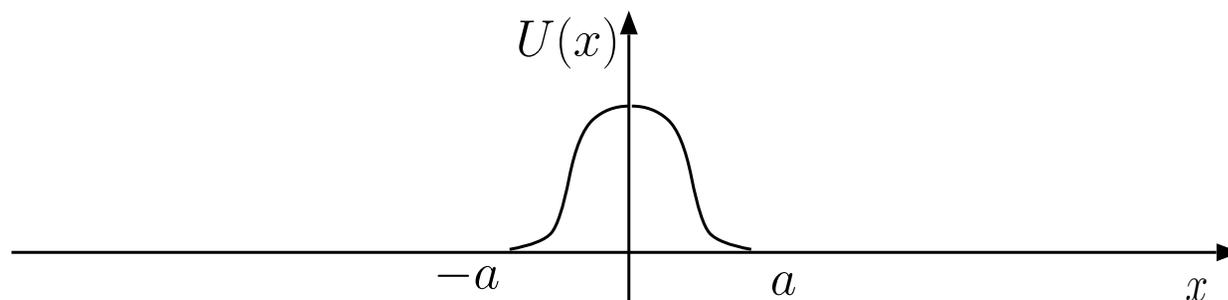
$$V_s \equiv (\phi_s(-\infty) - \phi_s(\infty))$$

$$G = \frac{I(x)}{V_s} = \frac{e^2}{\pi \hbar}$$

6. ポテンシャルの壁がある場合の1次元系の電気伝導-相互作用の効果 I

電子のスピンはないとする

ポテンシャルの壁 $U(x)$, $U(-x) = U(x)$, $|x| > a$ で $U(x) = 0$ とする



相互作用がなければ,

$$G = \frac{e^2 \mathcal{T}}{\pi \hbar} \cdots \text{Landauer の公式} \quad \mathcal{T} \text{ は透過率}$$

◇ 相互作用の効果

ポテンシャルによる電子密度の変化 \rightarrow ポテンシャル・エネルギーを作る ($U_c(x)$)

対称ポテンシャル中の固有関数 ($|x| > a$)

$$\varphi_{sk}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k|x| + \delta_s(k)) \quad (\text{symmetric})$$

$$\varphi_{ak}(x) = \text{sign}(x) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k|x| + \delta_a(k)) \quad (\text{antisymmetric})$$

$$\varepsilon_s(k) = \varepsilon_a(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k > 0, \quad L \text{ 系の長さ}$$

$\delta_s(k), \delta_a(k) \cdots$ phase shift ポテンシャルがなければ0

電子密度

$$\rho(x) = \frac{L}{2\pi} \int_0^\infty f_F(\varepsilon(k)) \{ \varphi_{sk}^2(x) + \varphi_{ak}^2(x) \} dk$$

スピンは無視する

$$\rho(x) = \frac{k_B T}{\hbar v_F} \operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T |x|}{\hbar v_F} \sin(\delta_s - \delta_a) \cos(2k_F |x| + \delta_s + \delta_a) + \rho'(x)$$

$$\delta_s \equiv \delta_s(k_F), \delta_a \equiv \delta_a(k_F), \operatorname{csch} y \equiv \frac{1}{\sinh y}$$

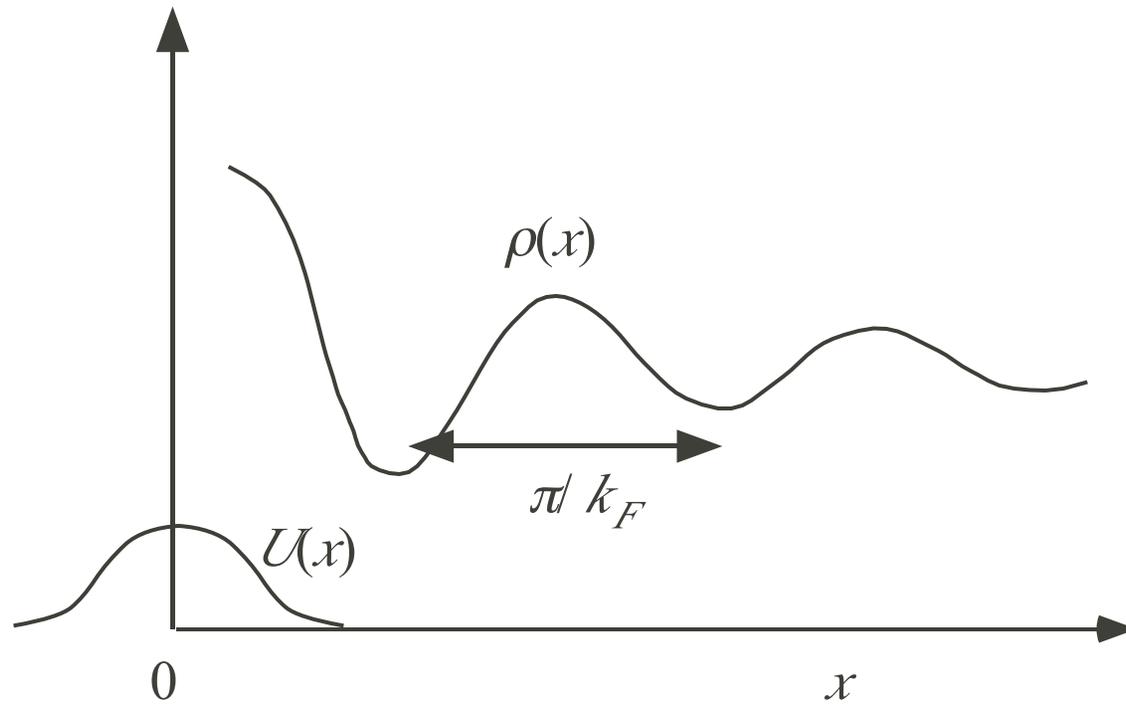
$\rho'(x) \cdots x$ にあまりよらない

$$\rho(x) \text{ によって作られるポテンシャルエネルギー } U_c(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x') V(x - x') dx'$$

$k = k_F$ から $k = -k_F$ への散乱の行列要素 ($e^{ik_F x} \longrightarrow e^{-ik_F x}$)

$$\hat{U}_c(-2k_F) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ik_F x} U_c(x) dx = \hat{V}(-2k_F) \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ik_F x} \rho(x) dx,$$

$$\operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T |x|}{\hbar v_F} = \begin{cases} \hbar v_F / (2\pi k_B T |x|) & (|x| < \hbar v_F / (2\pi k_B T)) \\ 0 & (|x| > \hbar v_F / (2\pi k_B T)) \end{cases}$$



Blagg 反射的な反射で波数 k_F の電子を強く反射する

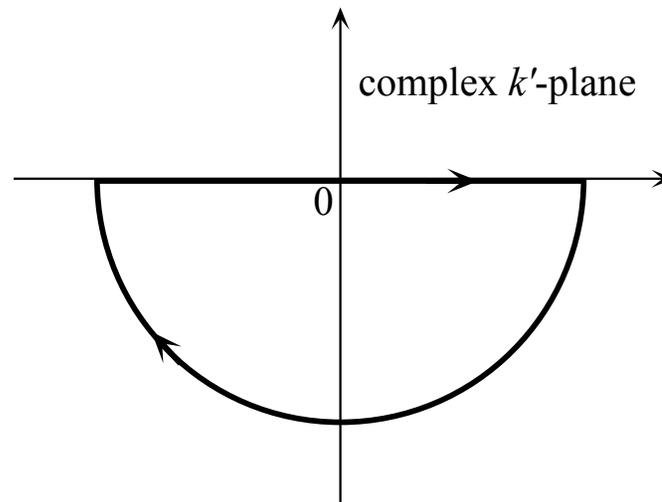
$$\hat{U}_c(-2k_F) = \frac{\hat{V}(-2k_F)}{2\pi} e^{-i(\delta_s + \delta_a)} \sin(\delta_s - \delta_a) \log\left(\frac{T_0}{T}\right), \quad T_0 = \frac{\hbar v_F}{2\pi k_B T a}$$

x の積分は $|x| > a$ で行った

◇ 透過率 (反射率) の計算

◇ Born 近似: 摂動で反射率を計算すると, $U_t(x) \equiv U(x) + U_c(x)$

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{U}_t(-k + k') e^{ik'x}}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k') + i\eta} \frac{dk'}{2\pi}, \quad (\eta \rightarrow +0)$$



$k' = -k - i\eta m / (k\hbar^2)$ の pole をひろう

$$\psi(x) = e^{ikx} - i \frac{\hat{U}_t(-2k)}{\hbar v_F} e^{-ikx}$$

$$\text{反射率は } \mathcal{R} = \frac{|\hat{U}_t(-2k)|^2}{(\hbar v_F)^2}$$

$k = k_F$ で $T \rightarrow 0$ とすると, $\mathcal{R} \rightarrow \infty$ となる!

◇ 実空間繰り込み群 (Poor man's scaling, P.W. Anderson)

$$U_l(x) = \begin{cases} U(x) + U_c(x) & (|x| \leq l) \\ 0 & (|x| > l) \end{cases}$$

のようなポテンシャルエネルギーの中で運動する電子を考える。固有関数は, $|x| > l$ では

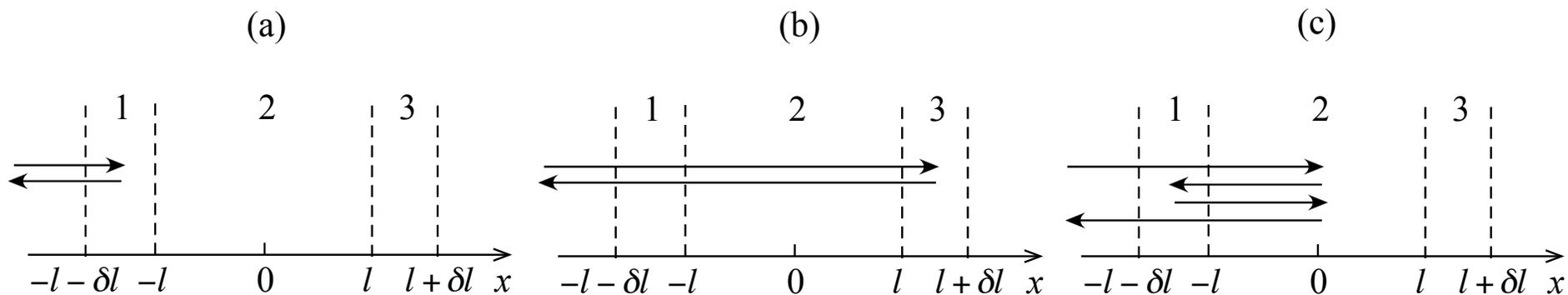
$$\varphi_{sk}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k|x| + \delta_{sl}(k)) \quad (\text{symmetric})$$

$$\varphi_{ak}(x) = \text{sign}(x) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k|x| + \delta_{al}(k)) \quad (\text{antisymmetric})$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) &\equiv e^{i\delta_{sl}}\varphi_{sk}(x) + ie^{i\delta_{al}}\varphi_{ak}(x) \\ &= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2L}}e^{ikx} \{e^{2i\delta_{sl}} + e^{2i\delta_{al}}\}, & (x > l) \\ \sqrt{\frac{2}{L}}e^{ikx} + \sqrt{\frac{1}{2L}}e^{-ikx} \{e^{2i\delta_{sl}} - e^{2i\delta_{al}}\}, & (x < -l) \end{cases} \end{aligned}$$

反射係数 $r_l = \frac{1}{2} (e^{2i\delta_{sl}} - e^{2i\delta_{al}}) = i \sin(\delta_{sl} - \delta_{al}) e^{i(\delta_{sl} + \delta_{al})}$

次に、 l を $l + \delta l$ に変える $\dots r_l$ がどれだけ変化するか



(a) のプロセス

$$\begin{aligned}
 \delta \hat{U}_{al}(-2k) &= \int_{-l-\delta l}^{-l} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \rho_l(x-x') V(x') e^{2ikx} \\
 &= \frac{k_B T}{2\hbar v_F} \sin(\delta_{sl} - \delta_{al}) e^{i(\delta_{sl} + \delta_{al})} \\
 &\quad \times \int_{-l-\delta l}^{-l} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{2i\{(k-k_F)x + k_F x'\}} \operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T(x' - x)}{\hbar v_F} V(x')
 \end{aligned}$$

ρ_l … ポテンシャルが $|x| > l$ で 0 の場合の電子密度, $V(x)$ … 相互作用ポテンシャル

$$\delta \hat{U}_{al}(-2k) = \delta l \hat{V}(-2k_F) \frac{k_B T}{2\hbar v_F} \sin(\delta_{sl} - \delta_{al}) e^{i(\delta_{sl} + \delta_{al})} \operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T l}{\hbar v_F}$$

(a) のプロセスによる r_l の変化

$$\delta r_{al} = -i \frac{\delta \hat{U}_{al}(-2k)}{\hbar v_F}$$

(a),(b),(c) の寄与を全部加えると

$$r_{l+\delta l} = i \sin(\delta_{sl} - \delta_{al}) e^{i(\delta_{sl} + \delta_{al})} \left\{ 1 - \delta l \hat{V}(2k_F) \frac{k_B T}{(\hbar v_F)^2} \cos^2(\delta_{sl} - \delta_{al}) \operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T l}{\hbar v_F} \right\}$$

透過率： $\mathcal{T}(l) = 1 - |r_l|^2$

透過率の変化

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{T}(l) &= |r_l|^2 - |r_{l+\delta l}|^2 \\ &= 4\delta l \alpha_1 \frac{\pi k_B T}{\hbar v_F} \sin^2(\delta_{sl} - \delta_{al}) \cos^2(\delta_{sl} - \delta_{al}) \operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T l}{\hbar v_F} \end{aligned}$$

$$\alpha_1 \equiv \hat{V}(2k_F) / (2\pi \hbar v_F)$$

一方, $\mathcal{T}(l) = 1 - \sin^2(\delta_{sl} - \delta_{al}) = \cos^2(\delta_{sl} - \delta_{al})$

$$\frac{d\mathcal{T}(l)}{dl} = 4\alpha_1 \frac{\pi k_B T}{\hbar v_F} (1 - \mathcal{T}(l)) \mathcal{T}(l) \operatorname{csch} \frac{2\pi k_B T l}{\hbar v_F}$$

繰り込み群方程式

交換相互作用も考える

直接相互作用

$$U_c(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x') V(x - x') dx'$$

交換相互作用：(a)のプロセスからの寄与

$$\begin{aligned} \delta \hat{U}_{\text{xal}}(-2k) &= -\frac{L}{2\pi} \int_{-l-\delta l}^{-l} dx \int_{-l-\delta l}^{-l} dx' \int_0^{\infty} dk' e^{ik(x+x')} V(x-x') \\ &\times f_{\text{F}}(\varepsilon(k')) \{ \varphi_{sk'}(x') \varphi_{sk'}(x) + \varphi_{ak'}(x') \varphi_{ak'}(x) \} \end{aligned}$$

$$\delta \hat{U}_{\text{xal}}(-2k) = -\delta l \hat{V}(0) \frac{k_{\text{B}}T}{2\hbar v_{\text{F}}} \sin(\delta_{sl} - \delta_{al}) e^{i(\delta_{sl} + \delta_{al})} \text{csch} \frac{2\pi k_{\text{B}}Tl}{\hbar v_{\text{F}}} \delta l$$

繰り込み群方程式

$$\frac{dT(l)}{dl} = -4\alpha \frac{\pi k_{\text{B}}T}{\hbar v_{\text{F}}} (1 - T(l)) T(l) \text{csch} \frac{2\pi k_{\text{B}}Tl}{\hbar v_{\text{F}}}$$

$\alpha \equiv \alpha_2 - \alpha_1$, $\alpha_2 \equiv \hat{V}(0)/(2\pi\hbar v_{\text{F}})$ (スピンを考えれば, $\alpha \equiv \alpha_2 - 2\alpha_1$)

$l = l_0$ のとき $\mathcal{T}(l) = \mathcal{T}_0$ として、繰り込み群方程式を解く

$$\mathcal{T}(\infty) = \frac{\mathcal{T}_0 \left(\tanh \frac{\pi k_B T l_0}{\hbar v_F} \right)^{2\alpha}}{\mathcal{R}_0 + \mathcal{T}_0 \left(\tanh \frac{\pi k_B T l_0}{\hbar v_F} \right)^{2\alpha}}, \quad \mathcal{R}_0 \equiv \mathcal{T}_0$$

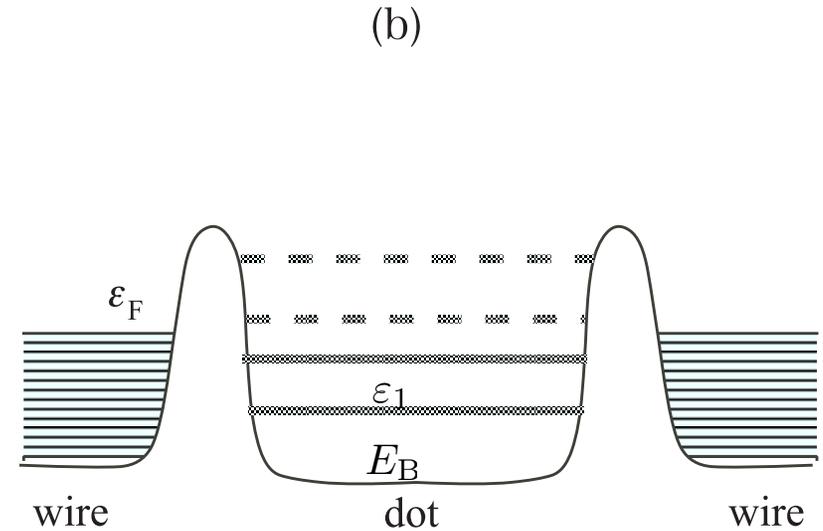
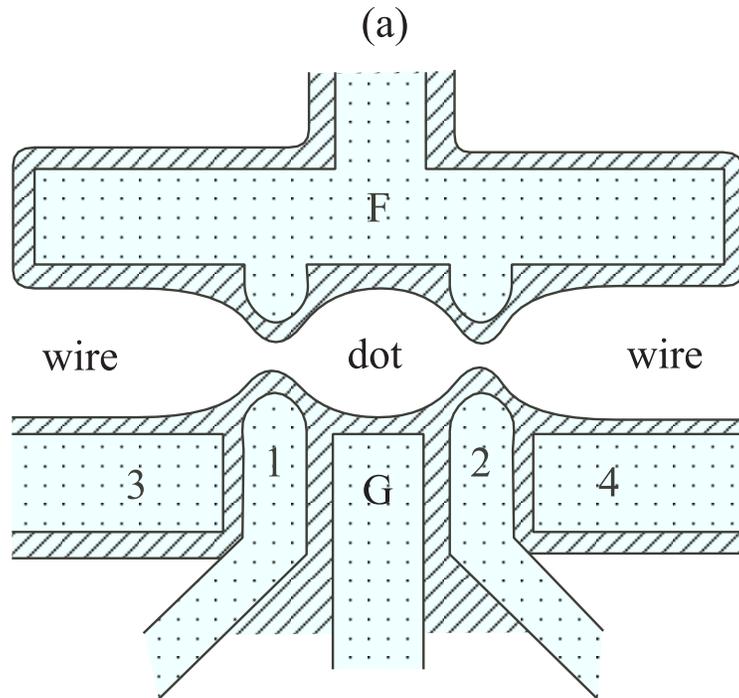
$T \rightarrow 0$ で、 $G \propto \mathcal{T}(\infty) \propto T^{2\alpha}$ である事が重要

基本的に、 α の最低次の摂動、 $\alpha < 1$ である事が必要

実験は後で示す

7. 量子ドットの電気伝導

◇ 量子ドット



電極 G にかける電圧 V_G でポテンシャルの底のエネルギー E_B および準束縛状態 ϵ_1 等を動かす

◇ 電子の透過率を考える

ドット中の準束縛状態 φ_j , 固有エネルギー ε_j

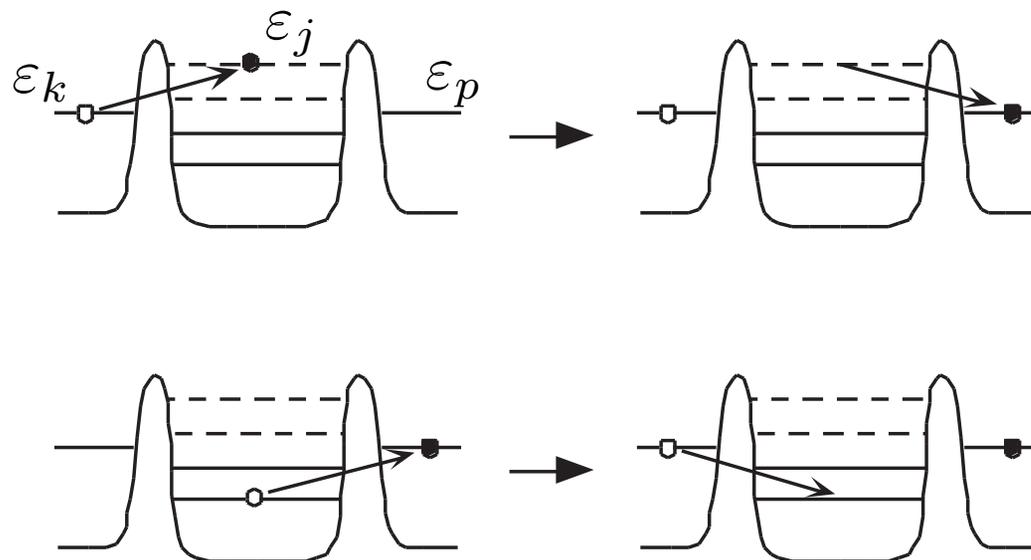
左のリード線中の固有状態 ψ_k , 固有エネルギー ε_k

右のリード線中の固有状態 ψ_p , 固有エネルギー ε_p

ハミルトニアン: $H = H_j + H_k + H_p + H_t$

H_t : 飛び移りのハミルトニアン 飛び移りの行列要素

$$\langle \varphi_j, H_t \psi_k \rangle = t_{jk}, \quad \langle \psi_p, H_t \varphi_j \rangle = t_{pj}$$



2次摂動による行列要素

$$t_2 = \sum_j \frac{t_{pj}t_{jk}}{\varepsilon_k - \varepsilon_j}$$

$\varepsilon_j = \varepsilon_k$ だと $t_2 = \infty$?

ドット中の準束縛状態のエネルギーの幅： Γ

ドットからトンネル効果で左（右）のリード線に出て行く平均時間： $\tau_L(\tau_R)$

$$\frac{1}{\tau_L} = \frac{2\pi}{\hbar} N_F |t_{kj}|^2, \quad \frac{1}{\tau_R} = \frac{2\pi}{\hbar} N_F |t_{pj}|^2, \quad N_F : \text{リード線内の状態密度}$$

平均寿命

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_L} + \frac{1}{\tau_R}$$

ドット中の電子の波動関数：

$$\text{寿命 } \infty \text{ の場合： } \varphi_j(t) = \varphi_j(0)e^{-i\varepsilon_j t/\hbar}, \quad |\varphi_j(t)|^2 = |\varphi_j(0)|^2$$

寿命 τ の場合， $\varphi_j(t) = \varphi_j(0)e^{-i\varepsilon_j t/\hbar - t/2\tau}$ であれば，

$$|\varphi_j(t)|^2 = |\varphi_j(0)|^2 e^{-t/\tau}$$

$\varepsilon_j \rightarrow \varepsilon_j - i\hbar/2\tau$ と置き換えればよい。

エネルギー幅： $\Gamma = \hbar/2\tau$ （不確定性原理）

$$\Gamma = \pi N_F (|t_{kj}|^2 + |t_{pj}|^2)$$

$$t_{kj} = t_{pj} = \bar{t} \text{ ならば（ドットが左右対称） } \Gamma = 2\pi N_F |\bar{t}|^2$$

$$t_2 = \sum_j \frac{\bar{t}^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_j + i\Gamma}$$

単位時間に電子が左から右に通り抜ける確率： P

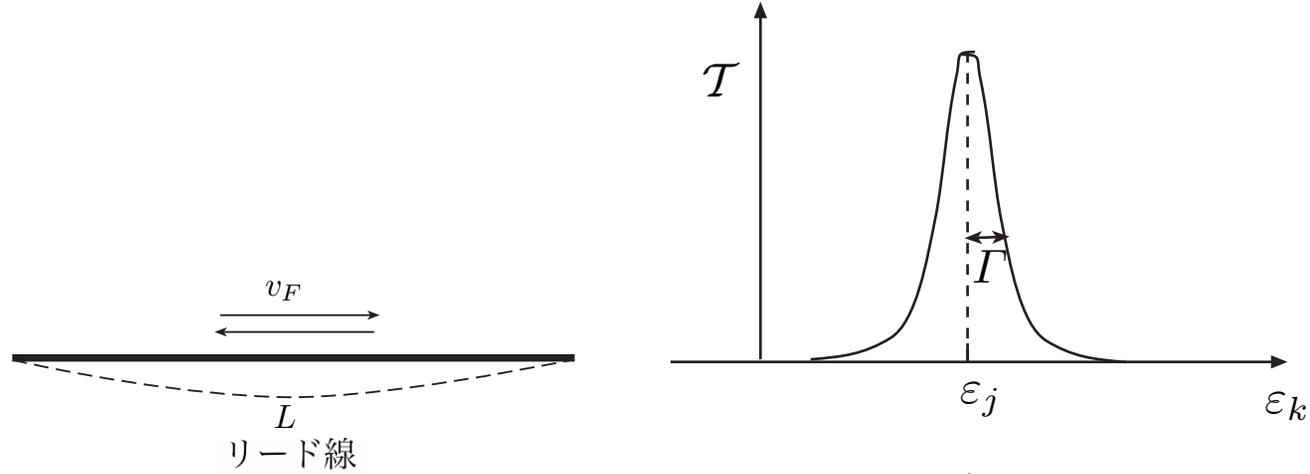
$$P = \frac{2\pi}{\hbar} N_F |t_2|^2$$

1次元系の状態密度

$$N_F = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\varepsilon_F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) dk = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(k_F - |k|)}{|\hbar^2 k/m|} dk = \frac{L}{\pi \hbar v_F}$$

ただし、 $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$, $v_F = \hbar k_F / m$

(k_F : フェルミ波数, v_F : フェルミ速度, L : リード線の長さ)



単位時間に $N \equiv v_F/2L$ 回ドットに入射する。1回の入射での透過率は

$$T = \frac{P}{N}$$

$N = 1/2\pi\hbar N_F$ から,

$$T = 4\pi^2 N_F^2 |t_2|^2 = 4\pi^2 N_F^2 \frac{|\bar{t}|^4}{(\epsilon_k - \epsilon_j)^2 + \Gamma^2} = \frac{\Gamma^2}{(\epsilon_k - \epsilon_j)^2 + \Gamma^2}$$

$|\varepsilon_k - \varepsilon_j| \ll \Gamma$ のとき

$$T = 1$$

共鳴透過

一つの壁の透過率 T_1

$$T_1 = 4\pi^2 N_F^2 |\bar{t}|^2$$

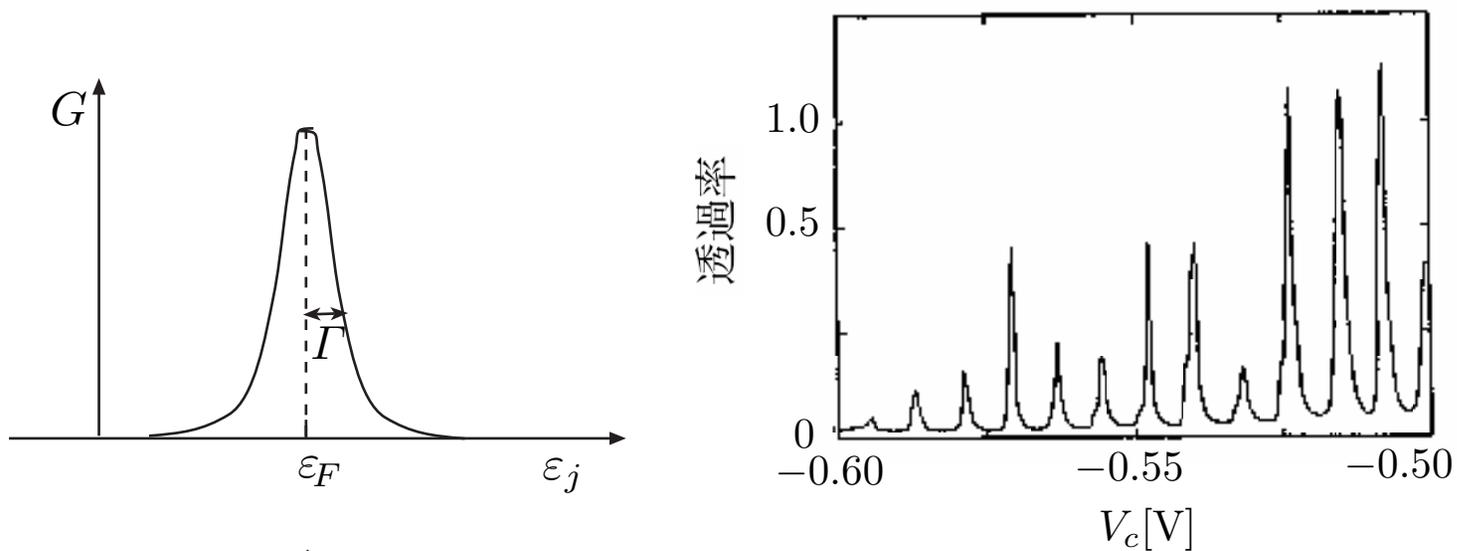
$T_1 \ll 1$ でも $T = 1$ になり得る.

ランダウアーの公式では, $T = 0$ で

$$G = \frac{2e^2}{h} T(\varepsilon_F) = \frac{2e^2}{h} \frac{\Gamma^2}{(\varepsilon_F - \varepsilon_j)^2 + \Gamma^2}$$

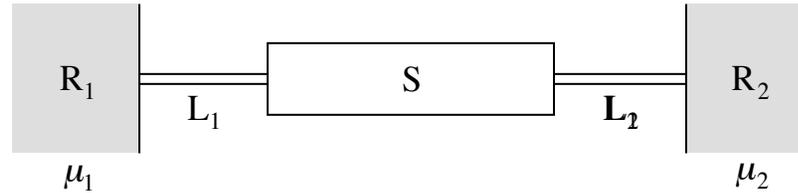
ε_F 又は, ε_j を変える事によるスイッチング

ε_F 又は, ε_j を変える事によるスイッチング



L.P. Kouwenhoven et al. Z. Phys. B **85** (1991) 367

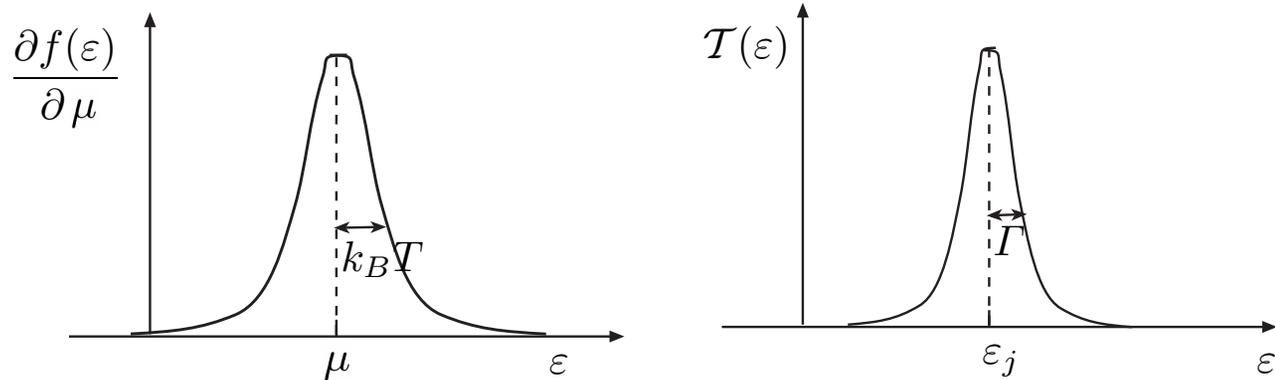
◇ 有限温度での電流（有限温度でのランダウアーの公式）：



$$I = \frac{2e}{h} \int_0^\infty \mathcal{T}(\varepsilon) \{f_1(\varepsilon)(1 - f_2(\varepsilon)) - f_2(\varepsilon)(1 - f_1(\varepsilon))\} d\varepsilon$$

$$f_k(\varepsilon) \equiv \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu_k)} + 1}, \quad (k = 1, 2)$$

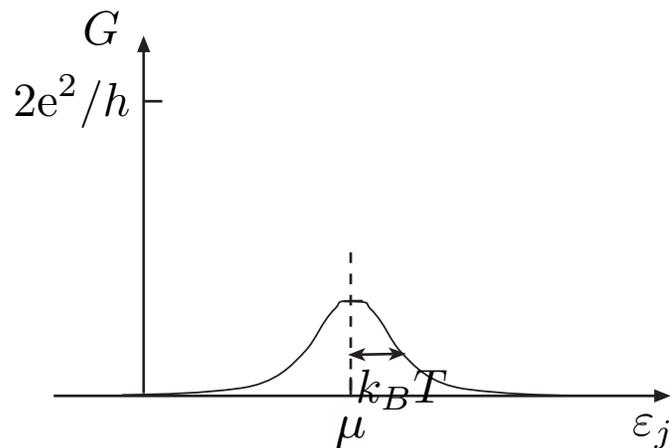
$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{h} \int_0^\infty \mathcal{T}(\varepsilon) \{f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)\} d\varepsilon \\ &= \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \int_0^\infty \mathcal{T}(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \mu} d\varepsilon = \frac{2e^2}{h} V \int_0^\infty \mathcal{T}(\varepsilon) \frac{\beta e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1)^2} d\varepsilon \end{aligned}$$



$k_B T \gg \Gamma$ ($\beta \Gamma \ll 1$) ならば,

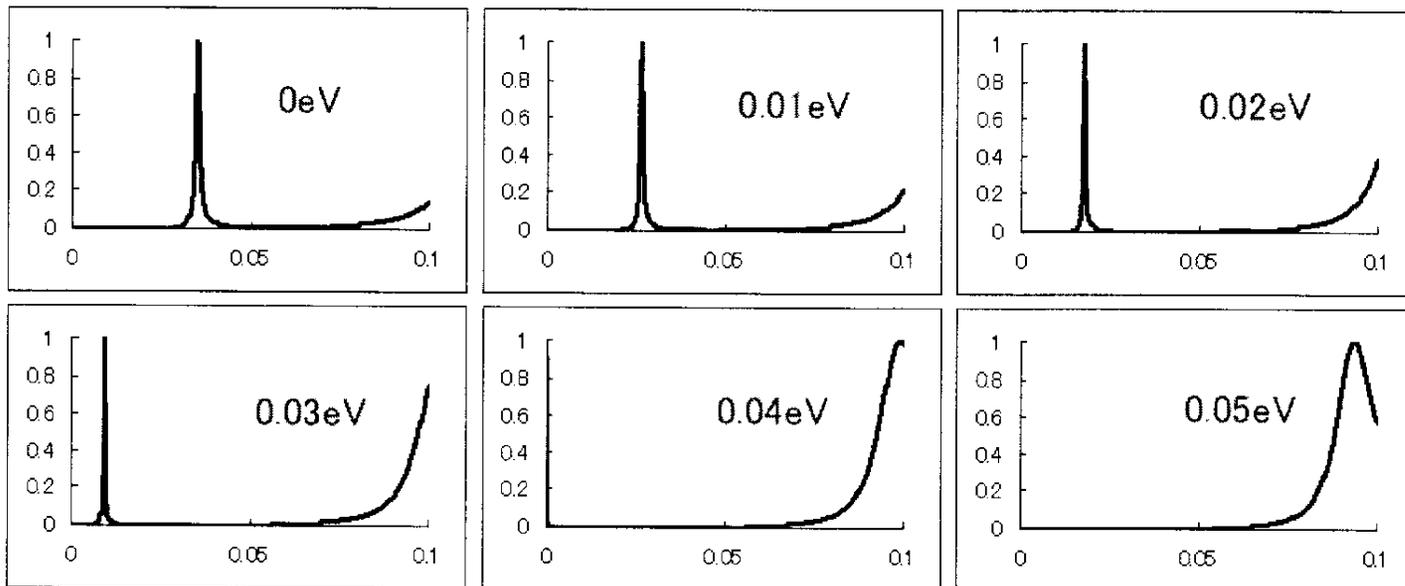
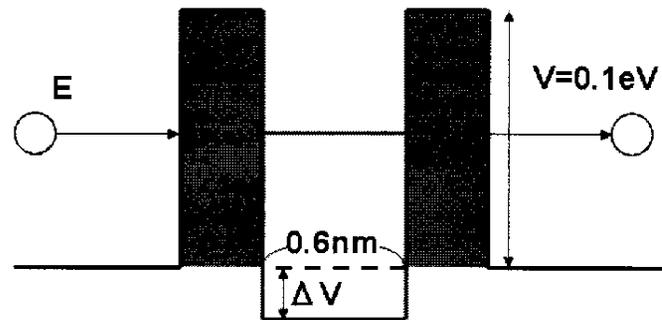
$$G \approx \frac{2e^2}{h} \frac{\beta e^{\beta(\epsilon_j - \mu)}}{(e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} + 1)^2} \int_0^\infty T(\epsilon) d\epsilon = \frac{2e^2}{h} \frac{\pi \Gamma \beta e^{\beta(\epsilon_j - \mu)}}{(e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} + 1)^2}$$

($|t_{pj}| = |t_{kj}|$ の場合)



8. 数値計算

卒業研究（阿久津良宏）より



◇ $-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \mathcal{T}(\epsilon)$ のエネルギー依存性

$T = 10\text{K}$

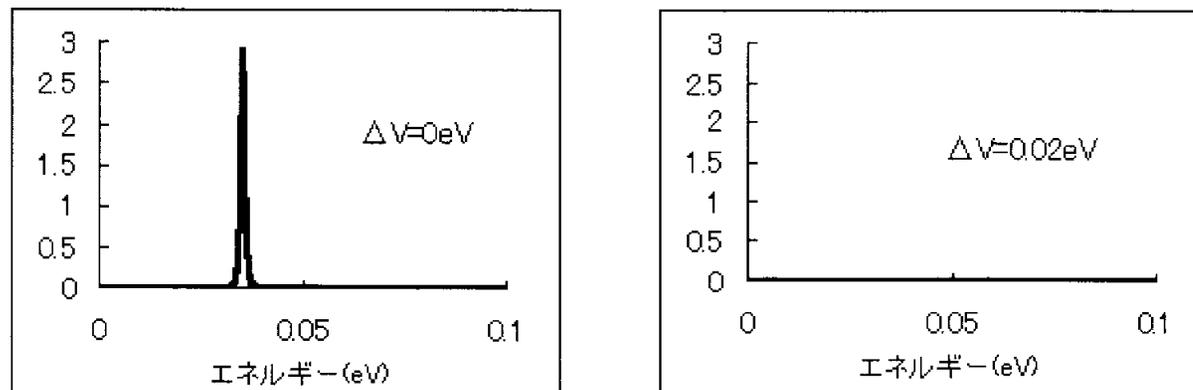


図 6: 左 $\Delta V = 0\text{eV}$, 右 $\Delta V = 0.02\text{eV}$

$T = 100\text{K}$

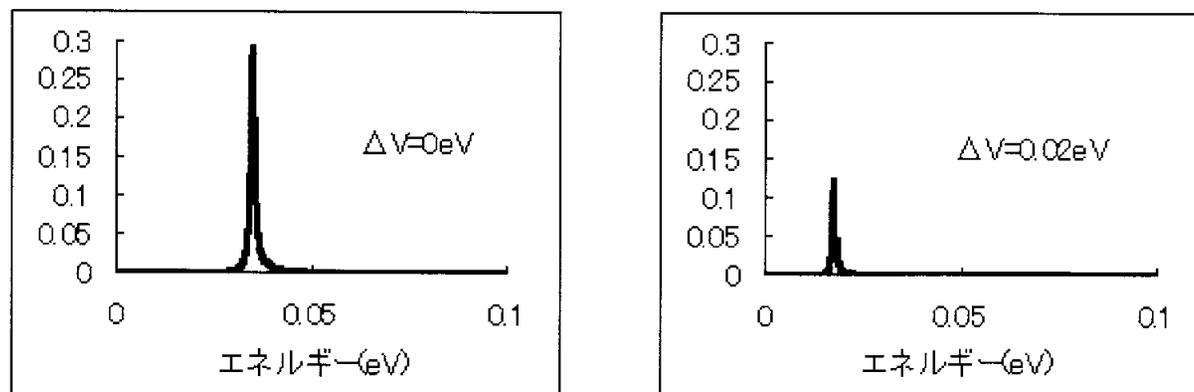
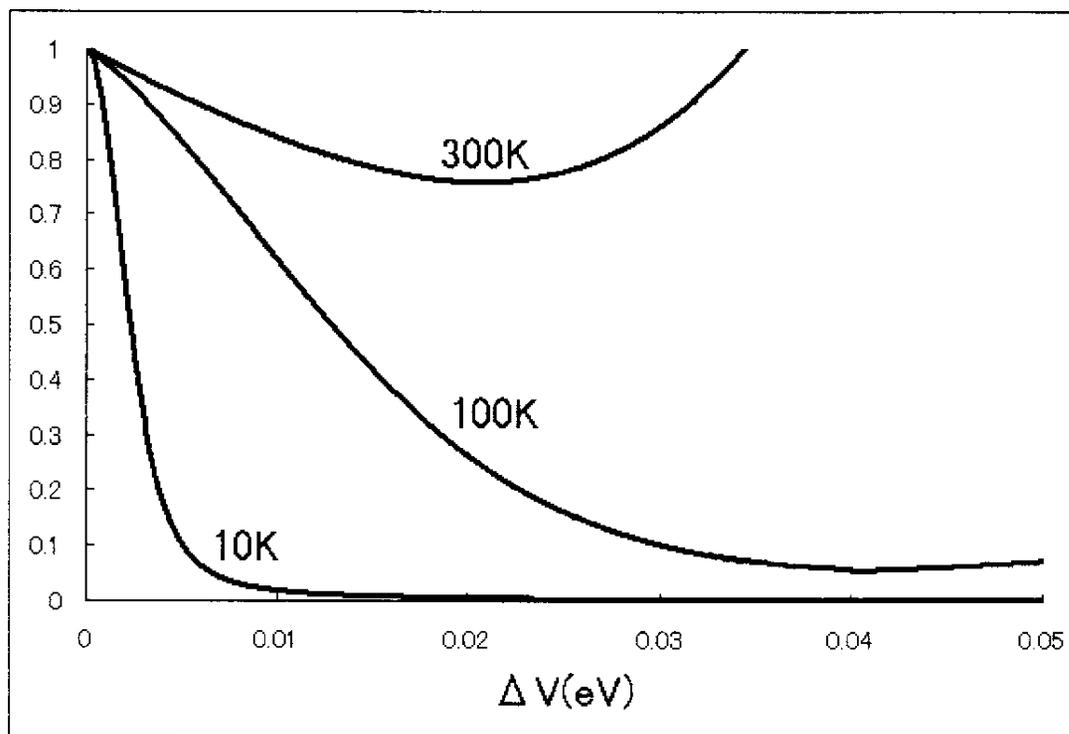


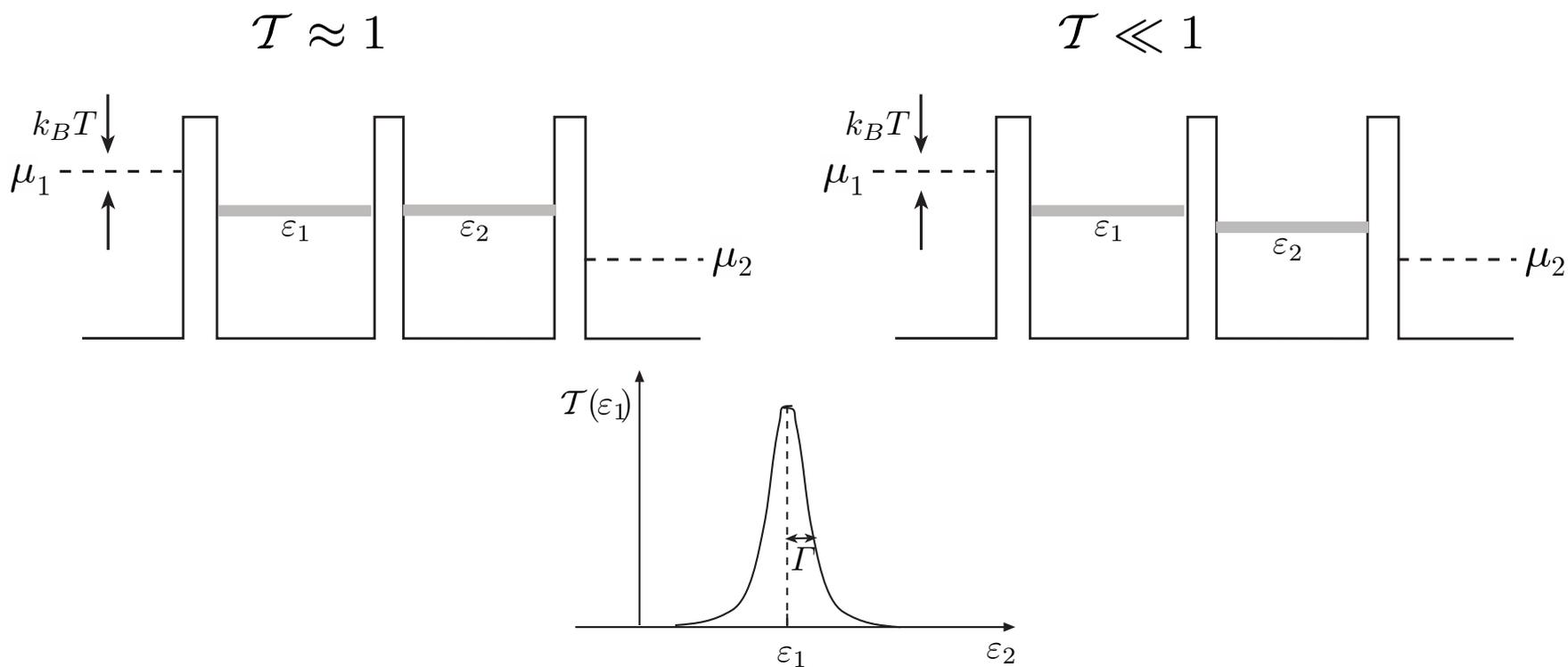
図 7: 左 $\Delta V = 0\text{eV}$, 右 $\Delta V = 0.02\text{eV}$

◇ 透過率の ΔV への依存性



室温では, うまく働かない

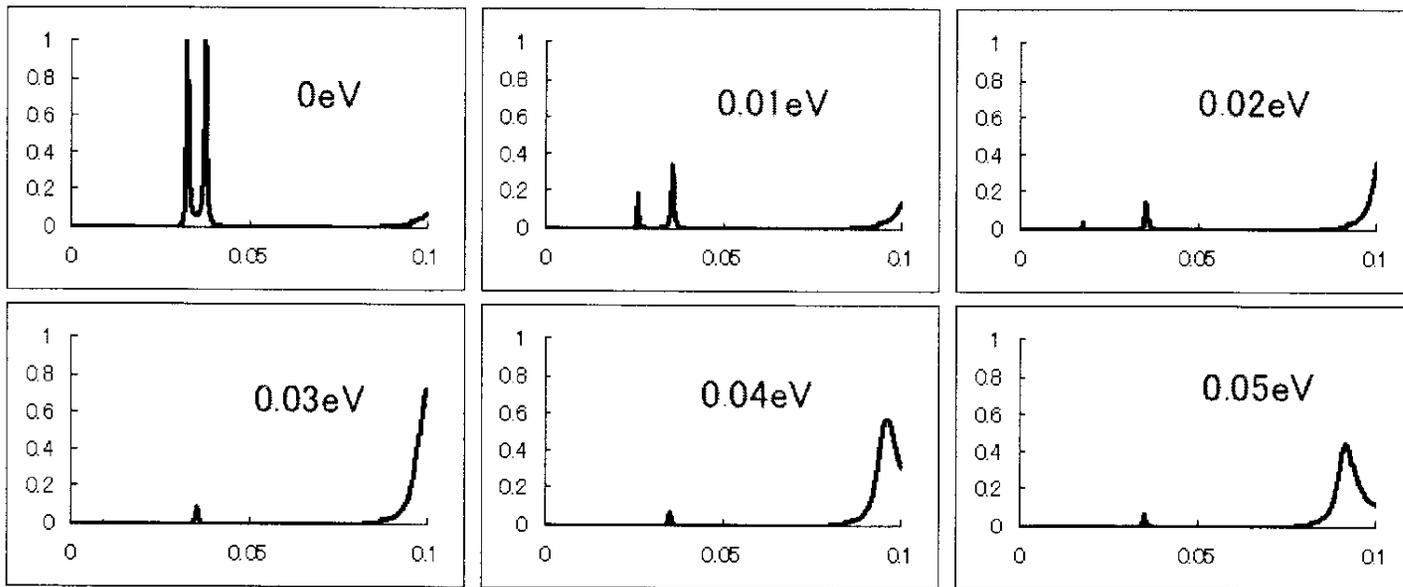
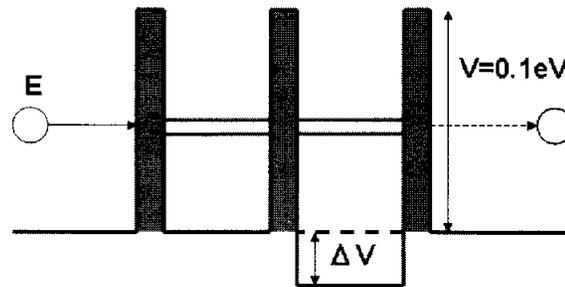
● 3重障壁



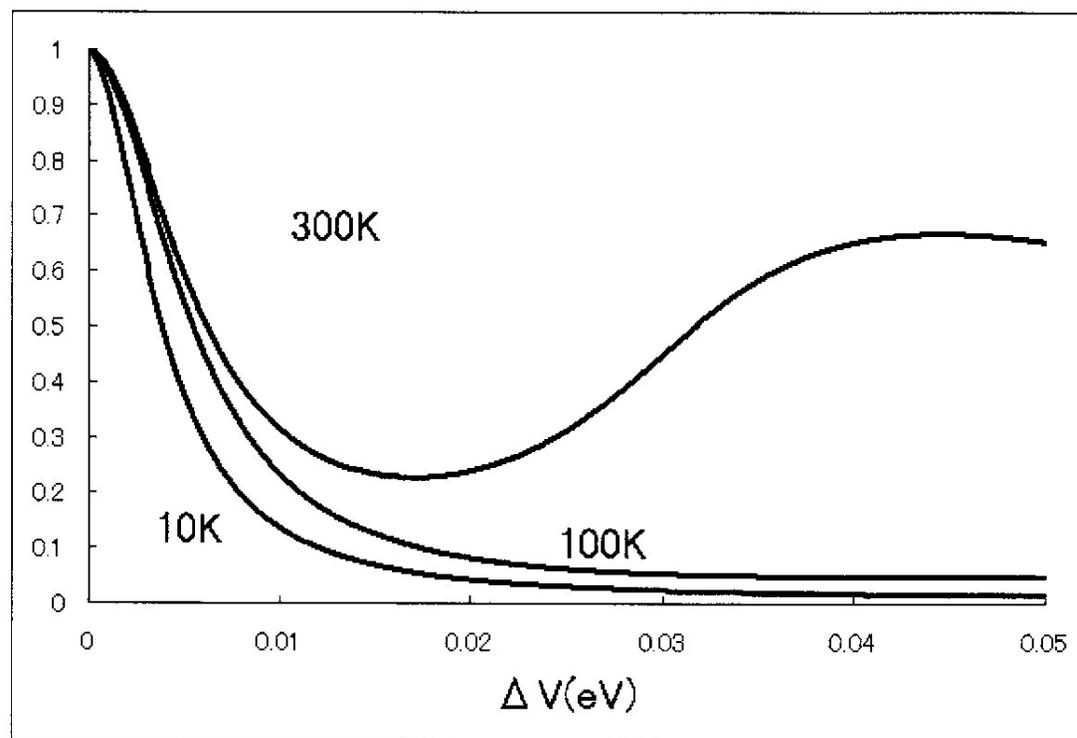
$$|\epsilon_1 - \epsilon_2| > \Gamma \text{ なら, } I \ll \frac{2e^2}{h} V \quad (\Gamma \ll eV = \mu_1 - \mu_2)$$

9. 数値計算

卒業研究（阿久津良宏）より

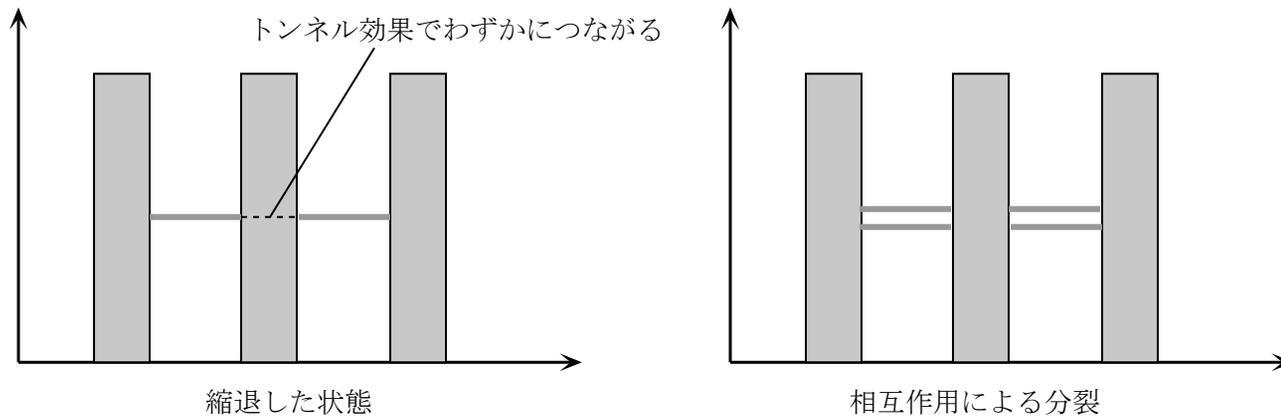


◇ 3枚壁の場合の透過率の ΔV への依存性



室温でもうまく動く

- ◇ 3枚壁のポテンシャルの透過率のエネルギー依存性がdouble peakとなる事について
同じエネルギーを持つ状態のエネルギーは、小さい相互作用によって分裂する



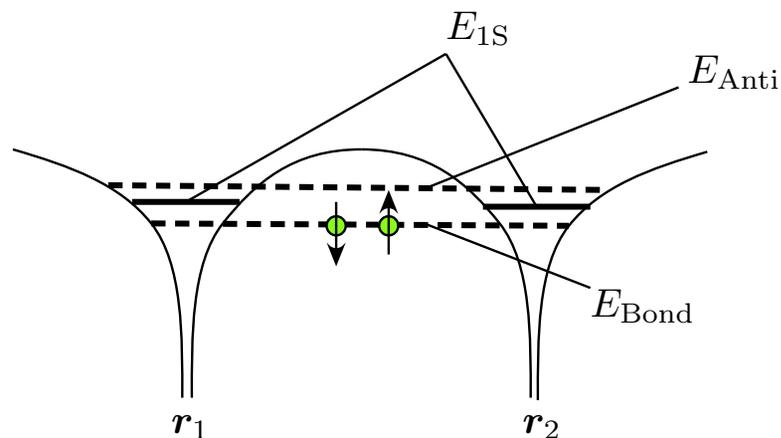
水素分子の結合 (Bonding), 反結合 (Antibonding) 状態

$\psi_{1S}(\mathbf{r}) \cdots \mathbf{r} = 0$ を中心とする水素原子の 1S 状態の波動関数

$$\psi_{\text{Bond}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \psi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)), \cdots \text{Bonding state}$$

$$\psi_{\text{Anti}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) - \psi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)), \cdots \text{Antibonding state}$$

$$E_{\text{Bond}} < E_{1S} < E_{\text{Anti}}$$



Bonding state 電子が2個入れば, $2E_{\text{Bond}} < 2E_{1S} \longrightarrow$ 分子は安定

10. ポテンシャルの壁がある場合の1次元系の電気伝導-相互作用の効果

II

相互作用の効果： $T \rightarrow 0$ で、 $G \propto T(\infty) \propto T^{2\alpha}$

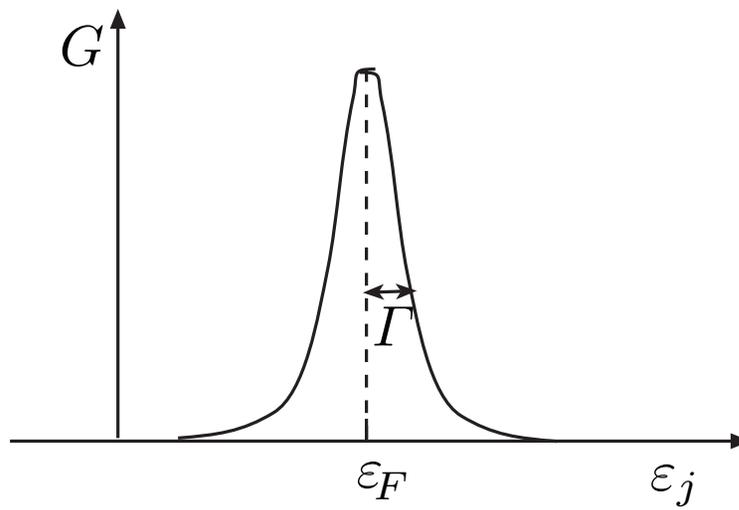
量子ドットがある場合の相互作用効果：十分低温で

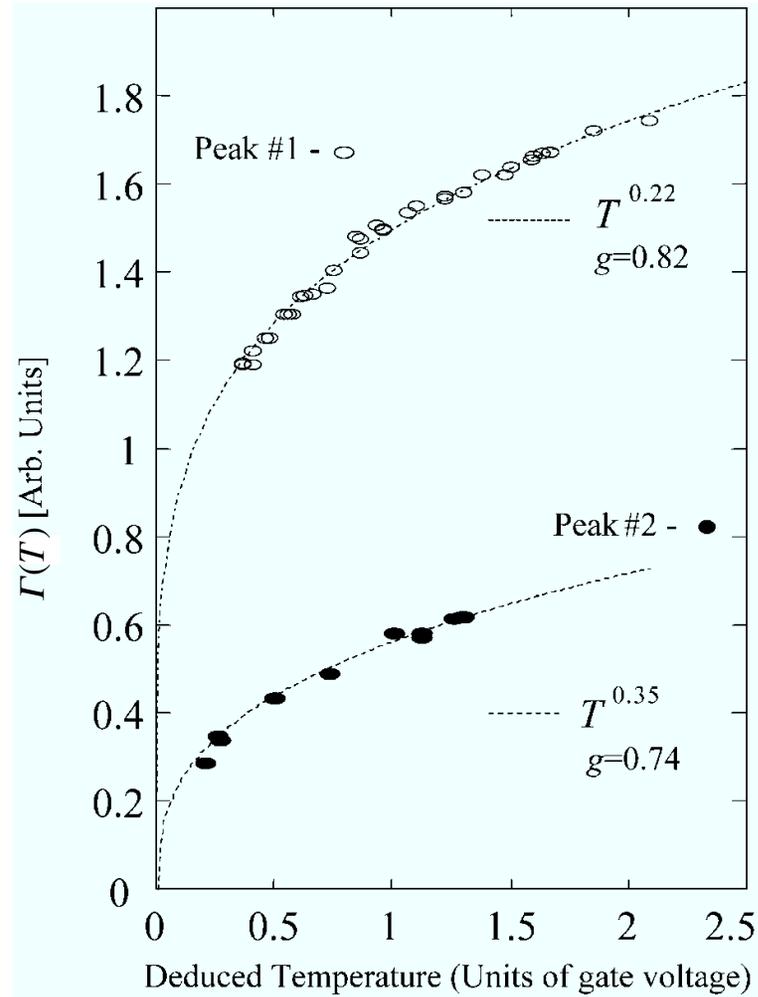
$$G = \frac{2e^2}{h} T(\varepsilon_F) = \frac{2e^2}{h} \frac{\Gamma^2}{(\varepsilon_F - \varepsilon_j)^2 + \Gamma^2}$$

$|\varepsilon_F - \varepsilon_j| \gg \Gamma$ とすると

$$G = \frac{2e^2}{h} T(\varepsilon_F) = \frac{2e^2}{h} \frac{\Gamma^2}{(\varepsilon_F - \varepsilon_j)^2} \propto T^{2\alpha} \quad \text{でなければならない}$$

$$\Gamma \propto T^\alpha$$





$\Gamma \propto T^{0.22}, T^{0.35} \dots$ 理論と consistent

11. 量子ドットにおける近藤効果

◇ Friedel sum rule

◇ 3次元の Friedel sum rule : 金属中に母体原子より価数が Z 多い不純物を入れる

$$Z = \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \delta_l(k_F), \quad \delta_l \cdots \text{角運動量 } l \text{ の phase shift}$$

J. Friedel Phil. Mag. (1952) **43** 153, Advance in Physics (1954) **3** 446

対称ポテンシャル中の固有関数 ($|x| > a$)

$$\varphi_{sk}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k|x| + \delta_s(k)) \quad (\text{symmetric})$$

$$\varphi_{ak}(x) = \text{sign}(x) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k|x| + \delta_a(k)) \quad (\text{antisymmetric})$$

$\varphi_{sk}(x)$ を考える。系の長さを L として、境界条件を $\varphi_{sk}(\pm L/2) = 0$ とする

$$\frac{kL}{2} + \delta_s(k) = n\pi + \frac{\pi}{2}, \quad n \text{ は整数 (正とする)}$$

ある k と次の k との間隔, Δk

$$\Delta k \left\{ \frac{L}{2} + \frac{d\delta_s(k)}{dk} \right\} = \pi$$

フェルミエネルギーまでの準位に入っている電子の数は

$$N_s = 2 \int_0^{k_F} \frac{dk}{\Delta k} = \frac{Lk_F}{\pi} + \frac{2}{\pi} \{ \delta_s(k_F) - \delta_s(0) \}$$

ポテンシャルがないときは, $\delta_s(k_F) = \delta_s(0) = 0$

ポテンシャルがあるときとないときの電子数の差

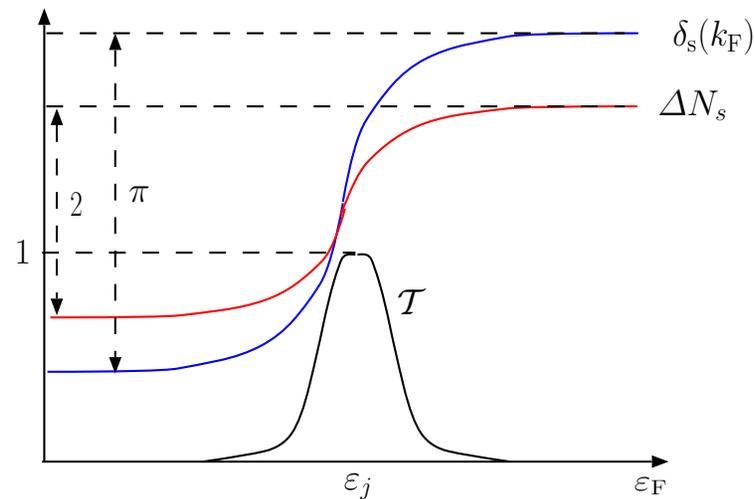
$$\Delta N_s = \frac{2}{\pi} \{ \delta_s(k_F) - \delta_s(0) \}$$

この電子は，ポテンシャルの付近にある（Laueの定理），量子ドットの場合は，ドットの中の準束縛状態（対称）と考える

反対称の準束縛状態に関しては

$$\Delta N_a = \frac{2}{\pi} \{ \delta_a(k_F) - \delta_a(0) \}$$

対称な束縛状態の近くでは

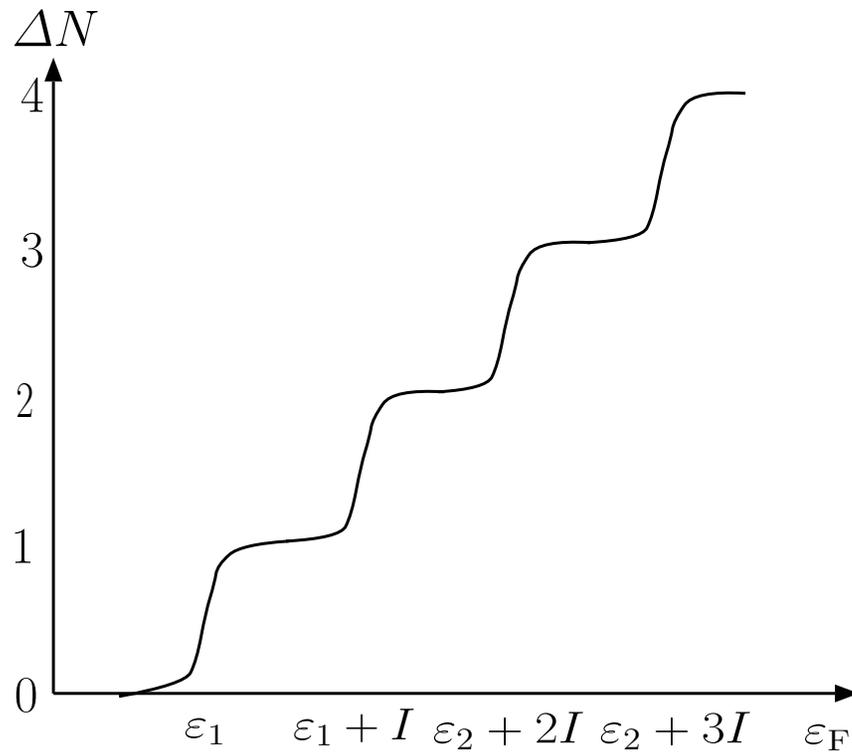


◇ ドット内のクーロン斥力

準束縛状態 $\psi_j(x)$ に電子が2個 (\uparrow, \downarrow) 入ったときのクーロンエネルギー

$$I = \iint_{\text{dot}} |\psi_1(x)|^2 |\psi_1(x')|^2 V(x - x')$$

ε_F を増加させると、電子は1個ずつドットに入る。



$\psi_1(x)$ は対称, $\psi_2(x)$ は反対称な状態とする

ε_F が ε_1 より十分に小さいとする \rightarrow 共鳴透過なし

$$\mathcal{T} = \cos^2(\delta_s(k_F) - \delta_a(k_F)) \ll 1$$

$$\delta_s(k_F) - \delta_a(k_F) \approx n\pi + \pi/2, \quad n \text{ は整数}$$

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_F < \varepsilon_1 + I \text{ では, } \Delta N_s = \frac{2}{\pi} \{\delta_s(k_F) - \delta_s(0)\} = 1$$

$$\delta_s(k_F) - \delta_a(k_F) \approx (n+1)\pi, \quad \mathcal{T} = \cos^2(\delta_s(k_F) - \delta_a(k_F)) \approx 1$$

(この間, $\delta_a(k_F)$ は変わらないとした)

$$\varepsilon_1 + I < \varepsilon_F < \varepsilon_2 + 2I \text{ では, } \Delta N_a = \frac{2}{\pi} \{\delta_a(k_F) - \delta_a(0)\} = 1$$

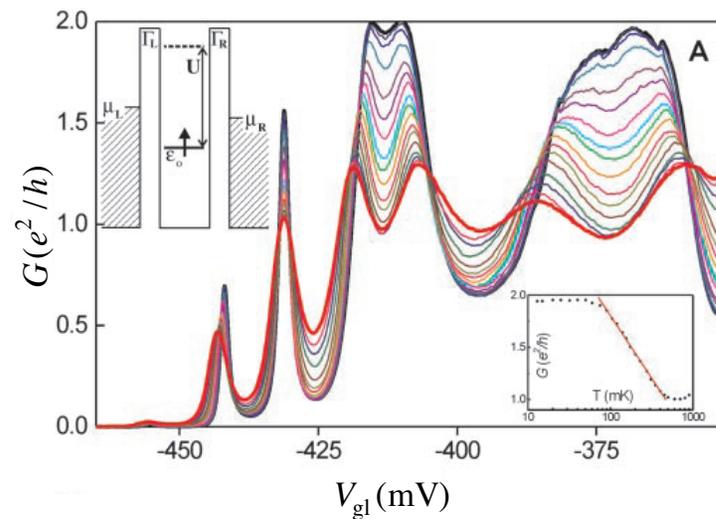
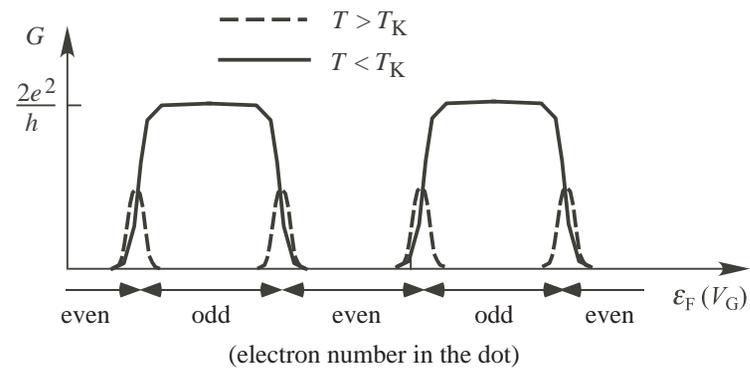
$$\delta_s(k_F) - \delta_a(k_F) \approx (n+1/2)\pi, \quad \mathcal{T} = \cos^2(\delta_s(k_F) - \delta_a(k_F)) \ll 1$$

(この間, $\delta_s(k_F)$ は変わらないとした)

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}$$

相互作用のある場合の Friedel sum rule \cdots 0K(実際には極低温) でのみ成り立つ

高温では，相互作用のない場合と同じ。ただし，電子は1個ずつしか通れないので，ピークの高さは半分



実験は，W.G. van der Wie et al. (樽茶グループ Science (2000) **289** 2105