

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 6 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540316

研究課題名(和文)量子ドット系における非平衡多体状態の数値計算手法開発

研究課題名(英文) Development of numerical methods for nonequilibrium many-body states in quantum dot systems

研究代表者

加藤 岳生 (Kato, Takeo)

東京大学・物性研究所・准教授

研究者番号：80332956

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：不純物アンダーソン模型で記述される単一の量子ドットで、時間に依存する外場の影響およびパーテックス補正の効果を議論した。この計算は相互作用のある系の光支援輸送を理解するときの理論的な出発点を与えると同時に、高次の保存近似の出発点となる。そのほか、単一電子生成および単一光子生成における位相緩和の効果、局所的な二準位系を介した熱輸送、金属中のスピン拡散長とスピン局在長の関係などについても、理論的な考察を行った。分担研究者の阪野壘は高バイアス下不純物アンダーソン模型における非平衡輸送特性とSU(N)模型への拡張を行った。

研究成果の概要(英文)：We discussed time-dependent transport and effect of vertex corrections in quantum dot systems, which are described by an impurity Anderson model. This calculation provides a starting point of theoretical approach to understand photon-assisted transport in interacting electron systems, and gives a foundation for higher-order conserving approximations. We also studied dephasing phenomena in single-electron and single-photon generation, heat transport via a local two-state systems, and relation between spin diffusion length and spin localization length theoretically. Sakano Rui, who is a member of this project, studied multi-orbital Anderson models theoretically in the limit of high bias as well as in the low-temperature Fermi-liquid region.

研究分野：物性理論

キーワード：メゾスコピック系・局在 近藤効果 量子コヒーレンス 非平衡統計力学 スピントロニクス

1. 研究開始当初の背景

ナノスケール素子の伝導特性は長年多くの理論研究者の研究対象となってきた。特に近藤効果に代表される非平衡多体効果の考察は難しく、現時点では電流電圧特性などの基本的な非線形伝導特性の評価は一部のモデル・パラメータ領域に限られてきた。ゆえに、多体効果を取り扱う一般的な理論の定式化とその数値計算手法への応用が強く求められる状況にある。

一方、従来手法で取り扱うことのできる範囲においても、ナノスケール素子の伝導現象に関わる多くの実験・理論研究が活発に行われている。特にここ数年の傾向として、時間依存外場のもとでの量子輸送特性の実験研究が進みつつあり、対応する理論の構築が強く求められている。また、フォノン伝導のような電子以外の輸送現象についても研究対象が広がりつつある。

2. 研究の目的

(1) 保存近似の逐次的構築法を試みる。ハートリー近似の範囲で電流応答関数と電流ノイズをパーテックス補正まで含めて定式化し、実際に計算を行う。さらにその計算結果を利用し、さらなる近似の次数を引き上げる試みを行う。

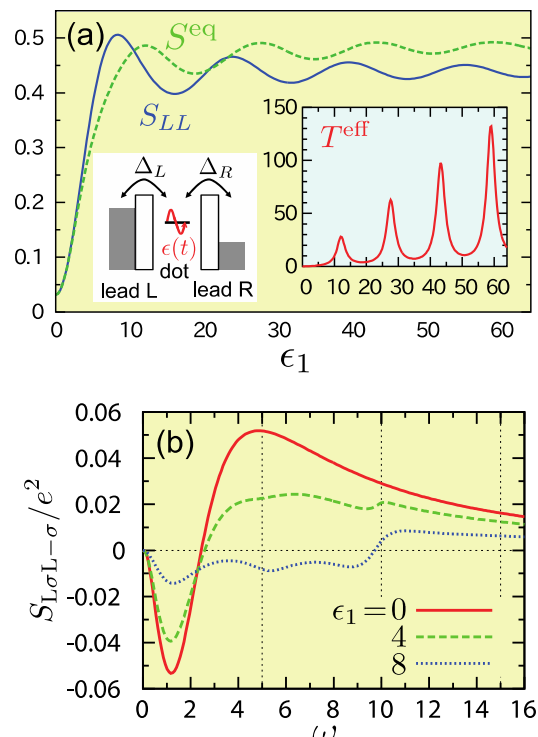
(2) 従来手法で取り扱うことのできる範囲で、ナノスケール素子の輸送特性を調べる。具体的には多体効果や時間依存外場の効果などを取り扱い、単一電子注入やフォノンによる熱伝導、非平衡近藤効果などについて研究を行う。またスピントロニクス分野への研究展開も行う。

3. 研究の方法

(1) 電子相関効果と非平衡現象が共存する最も簡単なモデルとして、不純物アンダーソン模型を考察する。この模型は、量子ドットを記述する模型として知られ、電子間相互作用によって近藤効果と呼ばれる多体効果が生じることがわかっている。この模型の動的応答を調べるために、強い時間依存周期外場下での各種の応答関数を調べ、保存近似の枠内でパーテックス補正を定式化した。さらにハートリー近似を出発点とし、具体的に電流応答関数(電流ノイズ)をパーテックス補正も含めて計算した。

(2) 既存の手法を用いた研究では、量子モンテカルロ法や非平衡グリーン関数法、量子光学で用いられる input-output 法などを利用した。

4. 研究成果

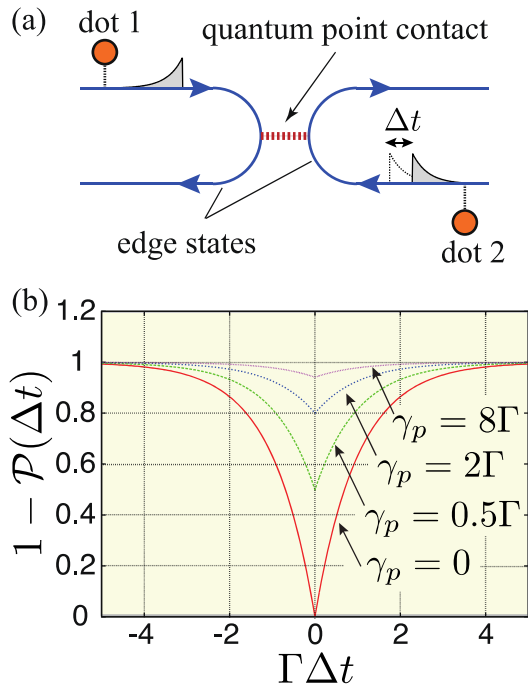


(1) 不純物アンダーソン模型で記述される単一量子ドット系について、強い周期外場下での輸送特性を研究した。時間に依存する輸送現象をゲージ不変な定式化によって記述し、クーロン相互作用がある場合の光支援電流ノイズのパーテックス補正を導出した。また具体的にフロッケグリーン関数を用いて自己無撞着ハートリー近似による計算を行い、周期外場のもとでのクーロン相互作用の効果を調べた。得られた電流ノイズの振る舞いは、有効温度を用いることでよく理解できることを示した。周期外場を強くしていくと、パーテックス補正は有効温度の上昇によって抑制され、ノイズのパワースペクトラムにおいて周期外場の振動数の整数倍の場所でピーク構造が現れることを示した。これらの結果は、相互作用のある系の光支援輸送を理解するときの理論的な出発点を与えるものである。(図(a)はゼロバイアス電流ノイズ S_{LL} と有効温度 T_{eff} から概算される熱ノイズ S_{eq} のグラフ。図(b)はパーテックス補正の寄りのみを持つスピン反平行の電流ノイズ。)

さらに高次の保存近似の構築を検討したが、先行研究を詳しく検討した結果、当初予定していた手法では電流保存則は満たされるものの、計算精度があまりよくなることが予想された。パルケ近似や繰り込み群などの手法を用いることで、この困難は回避できると期待されるが、本研究課題の研究期間内に研究成果をまとめることはできなかった。

(2) フォノン伝導における多体効果に由来する新規現象を開拓する目的で、局所的な二状態系を介した熱輸送を調べた。系をオーミック熱浴と結合した二準位系の模型(スピン-ボゾン模型)で記述し、この模型を異方的近

藤模型にマップすることで、近藤効果が生じることを議論した。具体的に熱輸送係数(熱コンダクタンス)を量子モンテカルロ法と線形応答理論を利用して計算した。熱コンダクタンスは近藤効果で特徴的なスケーリング則を満たし、近藤温度と二準位-熱浴の結合定数の2つによって普遍的に記述されることを示した。低温で近藤効果が生じる領域では、熱コンダクタンスは温度の3乗に比例する一方、高温では温度のべき(べき指数は結合定数による)で変化することを示した。



(3) 半導体キャビティと量子ドットを利用した単一光子源の作成が活発に行われている。この現象に関して、量子ドット中の電子がまわりの電磁場環境から受けるデコヒーレンスの効果を、量子光学分野でよく用いられる input-output 理論によって記述し、光子の純粋度を評価した。また最近、量子ホール効果のエッジ状態を利用して作成される単一電子注入源が注目を集めている。注入された電子の量子力学的な性質は粒子干渉実験によって調べることができる。注入された電子のデコヒーレンス現象もごく最近観測された。デコヒーレンスの原因はいろいろなものと考えられるが、現時点ではまだはっきりとしたことはわかっていない。そこで注入源のまわりの電磁場環境による純位相緩和効果を調べた。input-output 理論を用いて、生成された電子の密度行列をコンパクトな表式で解析的に得ることができた。さらに、2つの単一電子生成源のパラメータの不一致によっても、二粒子干渉実験の結果が大きく影響されることを示した。(図(a)は2粒子干渉実験の模式図。図(b)は片方の出力ポートで検出される電流揺らぎの大きさ。)

(4) スピントロニクス分野では、種々の応用

上、金属中でのスピン拡散長を評価することが重要である。しかし、しばしばスピン拡散長は短くなり、従来の手法では測定が困難となる場合がある。一方、弱局在の磁気抵抗のデータから、局在長とよばれる長さをフィッティングによって決定することができる。このスピン拡散長と局在長がほぼ比例関係にあることを実験的に確認した。この研究では、研究代表者は実験データの解釈について実験家と議論を行い、2つの特徴的な長さが比例関係になってよいことを理論的に指摘した。

(5) 研究分担者の阪野壘は、電子関連のある量子ドットの非平衡輸送特性について研究を進めた。スピンと軌道自由度ある不純物アンダーソン模型の、高温もしくは高バイアス下の電子状態や輸送を熱場の量子論を利用して厳密に導出した。また、逆に低バイアスでの電流の輸送特性に現れるフェルミ液体特性について、厳密に導出した。これらの結果は相補的に用いることで実験結果と比較可能なばかりではなく、数値計算手法を評価する有力な指標になる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計10件)

(1) T. J. Suzuki and T. Kato, "Effects of Coulomb interaction on photon-assisted current noise through a quantum dot", *Physical Review B*, vol. 91, 165302(1-12) (2015), 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.91.165302

(2) A. Oguri and R. Sakano, "Exact Green's function for a multiorbital Anderson impurity at high bias voltages", *Physical Review B*, vol. 91, 115429(1-14) (2015), 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.91.115429

(3) E. Iyoda, T. Kato, K. Koshino, and T. Martin, "Dephasing in single-electron generation due to environmental noise probed by Hong-Ou-Mandel interferometry", *Physical Review B*, vol. 89, 205318(1-8) (2014), 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.89.205318

(4) 加藤岳生, "メゾスコピック系の物理基礎から最近の話題まで (第58回物性若手夏の学校:講義)", 物性研究・電子版 3, 031201(1-26) (2014), 査読無
<http://www.bussei-kenkyu.jp/archives/category/2014/vol03-1>

(5) K. Saito and T. Kato, "Kondo Signature in Heat Transfer via a Local Two-State System", Physical Review Letters, vol. 111, 214301(1-5) (2013), 査読有
DOI:10.1103/PhysRevLett.111.214301

(6) Y. Niimi, D. Wei, H. Idzuchi, T. Wakamura, T. Kato, and Y. Otani, "Experimental Verification of Comparability between Spin-Orbit and Spin-Diffusion Lengths", Physical Review Letters, vol. 110, 016805(1-5) (2013), 査読有
DOI:10.1103/PhysRevLett.110.016805

(7) E. Iyoda, T. Kato, T. Aoki, K. Edamatsu, and K. Koshino, "Properties of a Single Photon Generated by a Solid-State Emitter: Effects of Pure Dephasing", Journal of the Physical Society of Japan, vol. 82, 014301(1-10) (2013), 査読有
DOI:10.7566/JPSJ.82.014301

(8) A. Oguri and R. Sakano, "Exact interacting Green's function for the Anderson impurity at high bias voltage", Physical Review B, vol. 88, 155424(1-12) (2013), 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.88.155424

(9) A. Oguri and R. Sakano, "1/(N-1) Expansion Approach to Full-counting Statistics for the SU(N) Anderson Model", Journal of the Korean Physical Society, vol. 63, 423-427 (2013), 査読有
DOI:10.3938/jkps.63.423

(10) 阪野壘, 小栗章, 小林研介, "量子ドットの近藤効果による非平衡電流の完全係数統計", 固体物理, vol. 47, 475-485 (2012), 査読無

〔学会発表〕(計 31 件)

(1) 阪野壘, "量子ドット系における非平衡近藤効果と電流揺らぎの理論研究", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 24 日, 早稲田大学(東京都新宿区)

(2) 伊與田英輝, 加藤岳生, 越野和樹, Thierry Martin, "単一電子生成における位相緩和の効果", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 22 日, 早稲田大学(東京都新宿区)

(3) 小栗章, 阪野壘, 吉井涼輔, Meydi Ferrier, 荒川智紀, 秦徳郎, 藤原亮, 小林研介, "多軌道量子ドットの近藤効果における軌道分裂の効果", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 22 日, 早稲田大学(東京

都新宿区)

(4) 荒川智紀, 秦徳郎, 藤原亮, 小林研介, Meydi Ferrier, Raphaelle Dalagrange, Richard Deblock, Helene Bouchiat, 阪野壘, 小栗章, "ショット雑音を用いたカーボンナノチューブ量子ドットにおける近藤効果の研究", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 22 日, 早稲田大学(東京都新宿区)

(5) 藤原亮, 秦徳郎, 吉井涼輔, 荒川智紀, 小林研介, Meydi Ferrier, Raphaelle Dalagrange, Richard Deblock, Helene Bouchiat, 阪野壘, 小栗章, "カーボンナノチューブ量子ドットにおけるショットノイズ測定", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 22 日, 早稲田大学(東京都新宿区)

(6) 阪野壘, 小栗章, Meydi Ferrier, 荒川智紀, 秦徳郎, 藤原亮, 小林研介, "近藤ドットの線形電流ノイズと電流の普遍性", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 8 日, 中部大学(愛知県春日井市)

(7) 秦徳郎, 荒川智紀, 藤原亮, 小林研介, Meydi Ferrier, Raphaelle Dalagrange, Richard Deblock, Helene Bouchiat, 阪野壘, 小栗章, "カーボンナノチューブ量子ドット系における SU(2)および SU(4)近藤効果の観測", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 8 日, 中部大学(愛知県春日井市)

(8) Meydi Ferrier, 荒川智紀, 秦徳郎, 藤原亮, 小林研介, Raphaelle Dalagrange, Richard Deblock, Helene Bouchiat, 阪野壘, 小栗章, "SU(2)および SU(4)近藤効果のスケールリングに関する実験的研究", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 8 日, 中部大学(愛知県春日井市)

(9) 荒川智紀, 秦徳郎, 藤原亮, 小林研介, Raphaelle Dalagrange, Richard Deblock, Helene Bouchiat, 阪野壘, 小栗章, "SU(2)および SU(4)近藤状態における非平衡電流ゆらぎ", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 8 日, 中部大学(愛知県春日井市)

(10) 小栗章, 阪野壘, "軌道縮退 Anderson 模型の Green 関数: $1/(N-1)$ 展開, NRG, NCA, 高温極限厳密解による解析", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 8 日, 中部大学(愛知県春日井市)

(11) 加藤岳生, 齊藤圭司, "二準位系を介した熱輸送における近藤効果", 第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 28 日, 東海大学湘南キャンパス(神奈川県平塚市)

(12) 阪野壘, 小栗章, "バイアスを印加され

た近藤量子ドットのスピントレント揺らぎ", 第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 28 日, 東海大学湘南キャンパス(神奈川県平塚市)

(13) 阪野壘, "近藤状態にある量子ドット系での非平衡電流揺らぎ", 物性研究所パソコン共同利用・CMSI 合同研究会, 2013 年 12 月 11 日, 東京大学物性研究所(千葉県柏市)

(14) Takeo Kato, Keiji Saito, "Kondo effect in heat transport via a two-state system", International Symposium on Nanoscale Transport and Technology, 2013 年 11 月 25 日, NTT 厚木 R&D センター(神奈川県厚木市)

(15) Rui Sakano, Akira Oguri, Yunori Nishikawa, Alex C. Hewson, "Nonequilibrium current through correlated dot with orbital degeneracy", International Symposium on Nanoscale Transport and Technology, 2013 年 11 月 27 日, NTT 厚木 R&D センター(神奈川県厚木市)

(16) Takeo Kato, Keiji Saito, "Kondo signature in heat transport via a local two-state system", Conference on Complex Nonlinear Systems: From Basic Science To Applications (招待講演), 2013 年 10 月 9 日, サマルカンド(ウズベキスタン)

(17) 曾弘博, 加藤岳生, "空間自由度を持つ進化ゲーム理論における固定確率", 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 28 日, 徳島大学(徳島県徳島市)

(18) 鈴木貴文, 加藤岳生, "振動外場下での量子ドットの動的輸送特性に与えるパーテックス補正の効果", 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 27 日, 徳島大学(徳島県徳島市)

(19) 阪野壘, 小栗章, 西川裕規, Alex C. Hewson, "S=1 近藤ドットにおける電流のスピントラッキング・軌道チャンネル間相関", 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 27 日, 徳島大学(徳島県徳島市)

(20) 阪野壘, 小栗章, 西川裕規, Alex C. Hewson, 加藤岳生, "近藤ドットによる電流中のエンタングルメント生成とベル型不等式", 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 27 日, 徳島大学(徳島県徳島市)

(21) 加藤岳生, "メソスコピック系の物理", 第 58 回物性若手夏の学校: 講義(招待講演), 2013 年 8 月 13 日~8 月 15 日, 白浜荘(滋賀県高島市)

(22) Takeo Kato, "Fermi-Edge Singularity

in Single Electron Generation", VietNam2013, IXth Rencontres du Vietnam(招待講演), 2013 年 8 月 6 日, クイニオン(ベトナム)

(23) Takafumi Suzuki, Rui Sakano, Takeo Kato, "Dynamic response to AC fields in quantum dot systems", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, 2013 年 8 月 6 日, 東京大学本郷キャンパス(東京都文京区)

(24) Rui Sakano, Akira Oguri, Yunori Nishikawa, Alex C. Hewson, "Cross-correlation of Nonequilibrium Current through an Quantum Dot with a Hund's Rule Exchange Coupling", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, 2013 年 8 月 6 日, 東京大学本郷キャンパス(東京都文京区)

(25) Akira Oguri, Rui Sakano, "Correlation functions of an Anderson impurity at high energies", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, 2013 年 8 月 6 日, 東京大学本郷キャンパス(東京都文京区)

(26) 鈴木貴文, 加藤岳生, 阪野壘, "周期的に変動するゲート電圧下での量子ドットの非平衡電流とショットノイズ", 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 29 日, 広島大学(広島県広島市)

(27) 小栗章, 阪野壘, "アンダーソン量子ドットの高バイアス極限でのクーロン斥力による電流揺らぎ", 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 29 日, 広島大学(広島県広島市)

(28) 阪野壘, 小栗章, "異方的フント則結合のあるアンダーソン量子ドットの非平衡電流と普遍特性", 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 28 日, 広島大学(広島県広島市)

(29) 伊與田英輝, 加藤岳生, "量子ドットから生成される単一電子に対するフェルミ端異常の影響", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012 年 9 月 20 日, 横浜国立大学(神奈川県横浜市)

(30) 小栗章, 阪野壘, "軌道縮退 Anderson 模型に基づく完全係数統計における電流保存と $1/(N-1)$ 展開", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012 年 9 月 20 日, 横浜国立大学(神奈川県横浜市)

(31) 阪野壘, 小栗章, "アンダーソン量子ド

ットの高バイアス極限でのクーロン斥力による電流揺らぎ", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012 年 9 月 20 日, 横浜国立大学(神奈川県横浜市)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

受賞

阪野 壘, 日本物理学会第 9 回若手奨励賞(領域 4)

ホームページ等

加藤研究室・東京大学物性研究所

<http://kato.issp.u-tokyo.ac.jp/>

加藤研究室の紹介・東京大学物性研究所

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kato_group.html

6. 研究組織

(1) 研究代表者

加藤 岳生 (KATO, Taeko)

東京大学・物性研究所・准教授

研究者番号: 80332956

(2) 研究分担者

阪野 壘 (SAKANO, Rui)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号: 00625022

(3) 連携研究者

なし