

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 5 日現在

機関番号：12102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2014

課題番号：24710111

研究課題名(和文) ナノスケール分子共振器における量子力学的振動モード制御の理論研究

研究課題名(英文) Theoretical studies of control of quantum vibrational modes in nano-scale molecular resonators

研究代表者

植田 暁子 (UEDA, Akiko)

筑波大学・数理物質系・助教

研究者番号：70453537

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：有機分子を用いた量子力学的な振動モードを発生するナノスケール共振器を実現するための基礎研究を行った。ナノスケール共振器を表す簡単な理論モデルを構築し、ケルディッシュグリーン関数法を用いて電気伝導特性を計算した。我々は、振動モードの数や量子状態をAC電圧やDC電圧、ゲート電圧で制御できることを明らかにした。また、量子力学的振動モードを発生させることができると期待されるトポロジカル超伝導体を有機分子に取り付けた系での電気伝導特性を調べ、ゼロバイアスに現れるコンダクタンスの特異な特徴を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We have performed fundamental studies for realizing nano-scale resonators which induce quantum vibrational modes. We have considered a simple model describing the nano-scale resonator and have calculated the transport properties using the Keldysh Green function methods. We have found that the number and states of the vibrational mode are controlled by the dc and ac, and gate voltage. We have also studied a molecule attached to a topological superconductor, which are expected to induce the quantum vibrational mode. We have revealed the anomalous features of conductance emerged at the zero bias voltage.

研究分野：ナノ物理学

キーワード：分子接合 共振器 フォノン トポロジカル超伝導体 ケルディッシュグリーン関数法 電気伝導 有機半導体

1. 研究開始当初の背景

ナノエレクトロメカニカルシステム (NEMS) の 1 つであるナノスケール共振器はデバイスの一部を宙に浮かせて振動の自由度を作り出し、電氣的に振動を発生、制御するデバイスである。高周波が発生できることから質量センサ等への応用が期待されている (古典力学的応用)。また、そのサイズから量子力学的な性質が現れる。量子力学的な性質の応用では、光と原子を相互作用させた Cavity QED のような用途が考えられる。ナノスケール共振器の場合、原子と光子が電子と振動モードに対応している。Cavity QED では、光子のスクイーズド状態、原子と光子のエンタングルメント状態等が観測され、量子通信や量子コンピュータへの応用されている。ナノスケール共振器の場合は、サイズが微小で、振動は GHz から THz の高周波であること、電氣的に振動状態を制御できること、また、電気伝導特性によって量子状態を観測可能であることからその特性を活かした応用が期待されている。

2. 研究の目的

我々は、ナノスケールの共振器として、有機分子に電極を取り付けたナノスケール分子共振器を考慮し、量子力学的な分子の振動状態を電氣的に制御する方法を理論的に提案する。量子的な振動状態は伝導電子と振動モードが相互作用することによって引き起こされる。我々は、電極と有機分子の接合の強さやソースドレイン電圧、ゲート電圧を変化させることによって、フォノンの量子状態がどのように変化するかを明らかにする。また、今まで調べられていないフォノンの量子力学的モードを発生されることを実現するため、超伝導リードやトポロジカル超伝導リードを取り付けた系を考え、電気伝導特性を議論する。

3. 研究の方法

分子共振器を表す一番簡単なモデルとして、図 1 のような電極につながれた 1 レベルの量子ドットと 1 レベルの振動モードが相互作用する系を考える。バイアス電圧をかけて振動モードを励起するため、有限バイアス電圧の影響を取り入れることができるケルディッシュグリーン関数法を用いて、振動の量子状態や電気伝導特性を計算する。電子格子相互作用は、主に摂動展開の方法で取り扱う。更に、熱電効果や電子間相互作用が強い場合、量子ドット中の 2 つ以上の電子軌道や振動モードが関わる場合について電気伝導特性への影響を考察する。また、ノイズなどの電圧に関して高次の電気伝導特性 (計数統計) については、計数場と Keldysh path integral を用いて計算を行う。トポロジカル超伝導体中のマヨラナ束縛状態は、マヨラナフェルミオンの性質

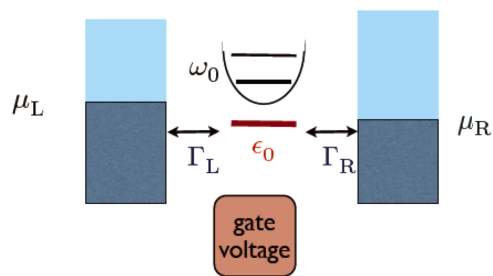


図 1 : ナノスケールの共振器のモデル図

をもった準粒子として取り扱う。

4. 研究成果

(1) AC 電圧とフォノンの分布

分子が中に浮いた状態で電極につながっている場合、分子の振動はフォノン浴と強く結合していないため、振動の分布は、ボーズ・アインシュタイン分布からずれたものとなる。分子には DC 電圧と微弱な AC 電圧がかかっているものとする。AC 電圧の振動数や DC 電圧の大きさによって、フォノンの個数は変化する。我々は、フォノンの振動数より振動数が小さいところでは、必ず AC 電圧によってフォノン数は増加し、フォノンの振動数より大きいときには、条件によってフォノン数が増加したり、減少したりすることを明らかにした。この研究で一番興味深い成果は、AC 電圧によって、フォノンを現象させることができることである (フォノン冷却)。フォノン冷却は、2 重量子ドットを用いた系なので提案されているが、AC 電圧を用いたフォノン冷却はこの提案が初めてである。我々は、この研究について、半導体物理国際会議や物理学会において成果発表を公表した。また、現在論文を執筆中である。今後の課題として、スクイーズド状態のような量子力学的なフォノンが発生している場合にも AC 電圧によるフォノン冷却が可能かを議論したいと考えている。

(2) 分子接合の完全計数統計

分子中の電子と分子の振動の相互作用の影響は電流、コンダクタンスだけでなく、ノイズなどの分布の高次のキュムラントにも現れるため、それらの特性を理解することは非常に重要である。我々は、モデルハミルトニアンに仮想の計数場を導入することにより、キュムラント生成関数を用いて伝導電子の電荷の確率分布が求めた。電子と分子の振動の相互作用は二次摂動の範囲で取り扱った。図はバイアス電圧に対する電流やノイズの変化を表している。我々は、透過率の違い (電極と有機分子の結合の強さ) の違いによって、電気伝導特性が大きく異なることを明らかにした。また、バイアス電圧がフォノンのエネルギーと一緒になる点で、確率分布が不連続になることを

明らかにした。この成果は、物理学会や Physical Review B にて報告を行った。今後は、AC 電圧がかかっている場合の確率分布を考察したいと考えている。

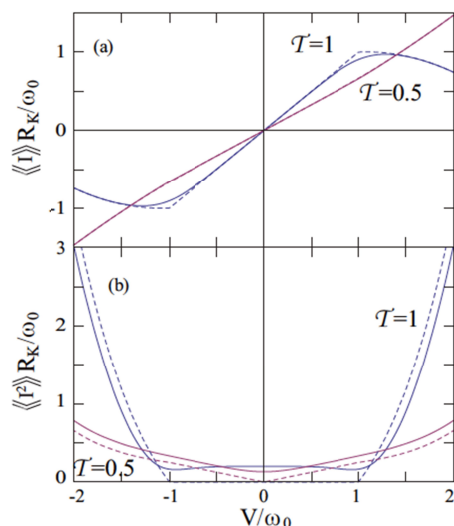


図 2 : 二次摂動での電流とノイズのバイアス依存性。T は透過計数。

(3) マヨラナフェルミオンの計測
トポロジカル超伝導リードに有機分子を取り付けて、分子の振動モードを制御するシステムを考案し、研究を進めた。トポロジカル超伝導体を有機分子に取り付けた系では、分子振動が量子力学的な振動モードになることが期待される。その前段階として、トポロジカル超伝導体を量子ドットに取り付けた系での電気伝導特性を調べた。量子ドットに金属リードを 2 つ、トポロジカル超伝導リードを取り付けた系では、マヨラナフェルミオンの数が奇数のときに、 e^2/h に固定されたコンダクタンスがゼロバイアスに現れることを明らかにした。また、マヨラナフェルミオンが現れる超伝導体は対称性によって分類される。現在、マヨラナフェルミオンの存在が調べられている超伝導体は、マヨラナフェルミオンが超伝導体の端に 1 つ現れるクラス D と呼ばれるものである。一方、超伝導体の端にマヨラナフェルミオン 2 つ現れるクラス BDI と呼ばれるトポロジカル超伝導体も存在する。クラス D のトポロジカル超伝導体のときは、常伝導、トポロジカル超伝導接合においてはゼロバイアスピークが現れるが、クラス BDI においてはディップになる。我々は、常伝導側をリング形状にし、量子ドットを埋め込んだ系を考え、リングを貫く磁場にゼロディップが影響されないことを明らかにした (図 3)。これは、マヨラナフェルミオンの計測に利用できると考えている。この研究は大変評価も高く、招待講演で成果を発表し、PRB Rapid communications にて成果を発表した。今後の課題として、クラスの違いが分子振動にどのように影響を

与えるかを議論したいと考えている。

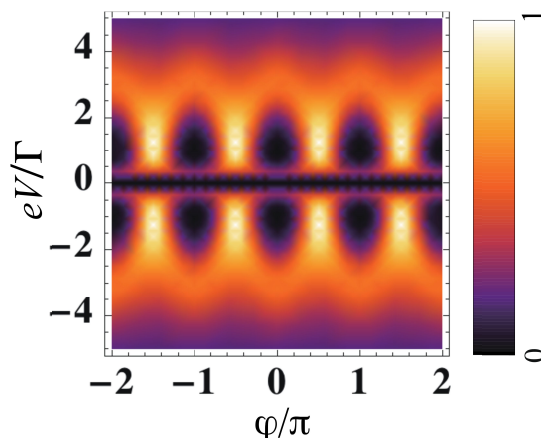


図 3 : クラス BDI のトポロジカル超伝導体に量子ドットを埋め込んだ常伝導リングを取り付けた系での電気伝導特性。横軸がリングを貫く磁場による電子の波の位相の変化で縦軸がバイアス電圧を表している。色の違いがコンダクタンスの大きさを示している。

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 5 件)

Akiko Ueda and Takehito Yokoyama, "Interferometry through a quantum dot coupled to Majorana fermions," Physics Procedia, 査読有, Vol. 58, 2014, pp.182-186, DOI: 10.1016/j.phpro.2014.09.045

Akiko Ueda and Takehito Yokoyama, Anomalous interference in Aharonov-Bohm rings with two Majorana bound states, Physical Review B, 査読有, Vol. 90, 081405(R), 2014, pp.1-4, DOI: 10.1103/PhysRevB.90.081405

Z. Rashidian, F.M. Mojarabian, P. Bayati, G. Rashedi, A. Ueda and T. Yokoyama Conductance and Fano factor in normal/ferromagnetic/normal bilayer graphene junction, 査読有, J. Phys.: Condens. Matter, Vol. 26, 2014, 255302/pp. 1-6, DOI: 10.1088/0953-8984/26/25/255302

Akiko Ueda and Takehito Yokoyama, Transport through quantum dot - Majorana junctions, JPS Conference Proceedings, 査読有, Vol. 1, 2014, 012028/pp.1-4, DOI: 10.7566/JPSC.1.012028

Yasuhiro Utsumi, Ora Entin-Wohlman, Akiko Ueda and Amnon Aharony, Physical

〔学会発表〕(計 8 件)

植田暁子, 量子ドット/超伝導体接合における超伝導対称性, 日本物理学会 2015 年年次大会, 2015 年 3 月 22 日、「早稲田大学(東京都・新宿区)」

植田暁子, Aharonov-Bohm interferometry coupled to a BDI class topological superconductor, 32nd International Conference on the Physics of Semiconductors, 2014 年 8 月 15 日、「Austin (アメリカ)」

植田暁子, Quantum dots coupling to Topological Superconductors, Collaborative Conference on Materials Research (CCMR), 「(招待講演)」, 2014 年 6 月 27 日、「Inchoen(韓国)」

植田暁子, Interferometry through a quantum dot coupled to Majorana fermions, International Superconductivity Symposium, 2013年11月19日, 「タワーホール船堀(東京都・江戸川区)」

植田暁子, マヨラナ・量子ドット接合系における電気伝導特性, 日本物理学会2013 年秋季大会, 2013年9月, 「徳島大学(徳島県徳島市)」

植田暁子, Transport through quantum dot - Majorana junctions, The 12th Asia Pacific Physics Conference, 2013年7月18 日, 「幕張メッセ(千葉県・幕張市)」

植田暁子, 分子接合における非平衡フォノン分布とAC コンダクタンス, 日本物理学会 2013年年次大会, 2013年3月29日, 「広島大学(広島県東広島市)」

植田暁子, Nonlinear Vibrational Effect on the AC Conductance of Molecular Junctions, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, 2012 年7月31日, 「Zurich (スイス)」

6. 研究組織

(1) 研究代表者

植田 暁子 (UEDA Akiko)
筑波大学・数理物質系・助教
研究者番号: 70453537