

平成 26 年 6 月 23 日現在

機関番号：24402

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540375

研究課題名(和文)量子ドット・ナノ物質系における強相関電子による量子輸送の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical study on quantum transport through strongly correlated electrons in quantum dots and nano materials

研究代表者

小栗 章(Oguri, Akira)

大阪市立大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：10204166

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円、(間接経費) 750,000円

研究成果の概要(和文)：量子輸送現象における電子相関の効果を解析的な方法、および計算機を用いた数値的方法の両方を駆使し詳細に調べた。従来とは異なるスケーリング法により軌道縮退の大きな極限からRPAを系統的に超える摂動展開方法の確立、および相互作用する不純物Anderson模型の非平衡Green関数の高バイアス極限における厳密解の発見など、解析的な方向から重要な成果が得られた。さらに、Hund結合がある場合における非平衡電流のショットノイズに対する微視的局所Fermi流体論による定式化、および超伝導接合系における近藤効果とAndreev散乱等の競合による低エネルギー状態のクロスオーバーに関する数値研究に発展があった。

研究成果の概要(英文)：We have studied effects of inter-electron interaction on transport through quantum dots and nanoscale materials. We have proposed a novel large N expansion, where N is an orbital degeneracy. This method is different from the conventional ones and enables us a systematic calculation beyond the RPA. We have also obtained exact interacting Green's function for the Anderson impurity out of equilibrium at high bias voltages. Furthermore, we have provided an exact expression for nonequilibrium current fluctuations through a quantum dot, which includes a ferromagnetic Hund's rule coupling, in the low-energy Fermi liquid regime. Our result shows that the shot noise can be expressed in terms of renormalized parameters of quasiparticles defined with respect to equilibrium ground state in the particle-hole symmetric case. We have also studied interplay between Kondo and Andreev-Josephson effects of a quantum dot coupled to three terminals, consisting of normal and superconducting leads.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：近藤効果 強相関電子系 量子ドット 非平衡電流 ショットノイズ 超伝導 アンドレーエフ散乱  
数値くりこみ群

1. 研究開始当初の背景

量子ドットを含むナノ・メソスケール物質系の輸送現象は、微細加工技術の進歩とともに 1980 年代から実験・理論の両側面において、物性物理学の基礎研究の主要分野のひとつになっている。この系の特徴は、電子の粒子性と波動性という量子力学的な 2 重性が、電子間相互作用、超伝導との競合・協力により、新奇かつ多彩な量子状態や量子相転移がする点にある。量子ドット系は、実験的な制御性にすぐれ、ショットノイズ等の非平衡輸送特性、磁場による Aharonov-Bohm 効果を含む量子干渉、および量子ドット数や離散量子準位の変化により、実験・理論ともにさまざま展開を見せている。

我々は、以前から量子ドット系に近藤効果に関する研究を行っている。特に、本課題研究開始の当初は、3 角形 3 重量ドット系の長岡強磁性機構による高スピン状態の近藤効果、超伝導接合系における Andreev 散乱と近藤効果の競合、非平衡近藤効果におけるショットノイズに対する軌道縮退の影響に関する研究を系統的に進め、成果を積み重ねていた。同時に実験の進歩とも関連し、従来からの未解決の問題に加え、新たに多くの問題が発展的に見出されてきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、このようなメゾ・ナノ質系において、電子相関の効果により新しい量子状態が現れる可能性を探索し、詳細な理論計算を通し、そこに現れる普遍的な物理描像を明らかにすることにある。これまでの蓄積の上に立ち、新しい発展を含め、次の 2 点を研究全体を繋ぐテーマとし課題に取り組む：

- (1) 多重・多軌道量子ドット系、および量子ドット/超伝導リード接合系における強相関電子系の低エネルギー量子状態・輸送特性の研究。
- (2) 低エネルギー理論をベースとした非平衡状態、中間エネルギー領域に適用可能な有効理論の構築。特に、摂動的手法と非摂動的手法の両側面からの総合的な検討。

3. 研究の方法

我々の研究の特徴は、場の量子論に基づく解析的なアプローチに加え、計算機を用いた数値的なアプローチを駆使した、高度かつ総合的な理論計算に基づいている点にある。特に、不純物 Anderson 模型を拡張したハミルトニアンに基づいた具体的な計算を行った。

解析的な方法では、Green 関数の系統的な解析による微視的 Fermi 流体論、相互作用の効果がかくりこまれ展開パラメータによる多体摂動論などを用いた。また、数値くりこみ群法によって、低エネルギーの多体量子状態を高精度に求めることできる。特に、低温・低

バイアス領域の性質の詳細な計算を行った。

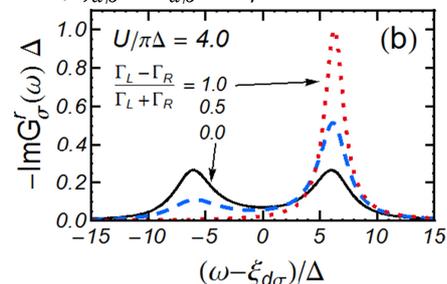
4. 研究成果

(1) 相互作用する不純物 Anderson 模型の高バイアス極限、および高温極限における Green 関数の厳密解を導いた[文献]。我々は、これらの極限では Keldysh 形式と等価である熱的場の理論が、非平衡状態に関する見通しの良い描像を与え、Green 関数を含めた 3 種類の相関関数の運動方程式が高エネルギーの極限で閉じる。以下、結果まとめると、

$$G_{\sigma}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{d,\sigma} - \langle n_{d,-\sigma} \rangle U + i\Delta - \Sigma_{\sigma}(\omega)}$$

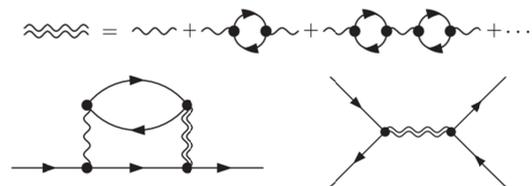
$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = \frac{\langle n_{d,-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{d,-\sigma} \rangle) U^2}{\omega - \varepsilon_{d,\sigma} - (1 - \langle n_{d,-\sigma} \rangle) U + i3\Delta}$$

ここで、 $\langle n_{d,\sigma} \rangle = \Gamma_L/\Delta$ 、 $\Delta = \Gamma_L + \Gamma_R$  は混成の強度。特に、多粒子散乱による緩和過程が 3 の虚部として寄与することが示された。また、下図には、スペクトル関数の例を示した。ただし、 $\xi_{d,\sigma} = \varepsilon_{d,\sigma} + U/2$  である。

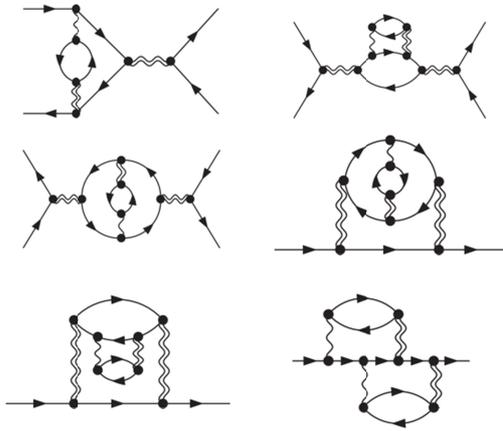


この結果と、低バイアス極限の厳密な表式 [A. Oguri, Phys. Rev. B 64, 153305 (2001)] とを合わせると、両極限における相互作用する Green 関数の漸近形が明らかになった。

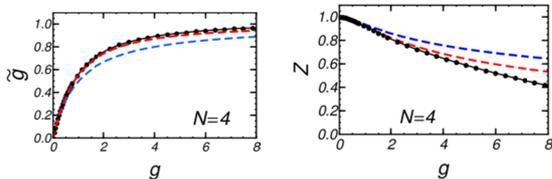
- (2) SU(N) Anderson 模型における新しい large N 理論を構築した[文献]。この方法は、数値くりこみ群 (NRG) などが適用できない軌道縮退数 N が大きな場合からの解析的なアプローチとして  $1/(N-1)$  を展開パラメータとする摂動が有効であり、従来の  $1/N$  展開や Non-crossing 近似 (NCA) とは異なる新しい展開法である。 $1/(N-1)$  の 2 次では次の様な Hattie-Fock + RPA 型の起用が現れる。



我々は  $1/(N-1)$  の 2 次から電子相関による揺らぎが寄与し、電子正孔対称な場合には、以下に一部のみ示すようなバーテックスと自己エネルギーの Feynman 図に対応することを示した。

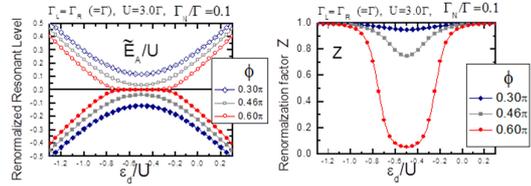
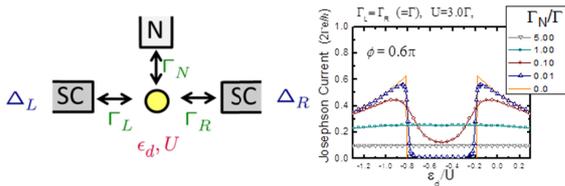


下図は、このような一連の寄与を全て加え合わせて次の結果を得た．電子正孔対称な場合の結果であり，スケールした Wilson 比  $\tilde{g}=(N-1)/(\pi\tilde{\Delta})$ ，およびくりこみ因子  $Z$  が，NRG の結果(点)とよく一致することを示している．



ただし，青線，赤線は，それぞれ  $1/(N-1)$  展開の 1 次 2 次の結果で 横軸は  $g=(N-1)U/(\pi\tilde{\Delta})$ ， $U$  は斥力である．我々は，電子正孔非対称への拡張，および完全計数統計への応用も行った．その結果は， $1/(N-1)$  の 2 次までの展開が， $N=4$  以上の場合には，電子間斥力  $U$  の弱相関から中間的な相関領域まで，特に，価数揺動領域において，有効であることを示している．また，非平衡 Green 関数へ拡張も進めている．

(3) 超伝導体接合系に関する研究では，下図のような 2 本の超伝導(SC)リードと 1 本の常伝道(N)リードからなる 3 端子に接続された単一量子ドットにおける電子相関の効果が，相互作用する Bogoliubov 準粒子の局所 Fermi 流体としての位相のずれと Bogoliubov 回転角，Josephson 位相  $\phi$  の 3 個の位相角で記述されることを示し，数値くりこみ群を用いた計算を行った[文献 10]．下のグラフは，近藤効果と Josephson 効果が競合する領域の超伝導電流(右上)，Andreev 共鳴の位置(左下)，くりこみ因子(右下)をゲート電圧の依存性の結果である．



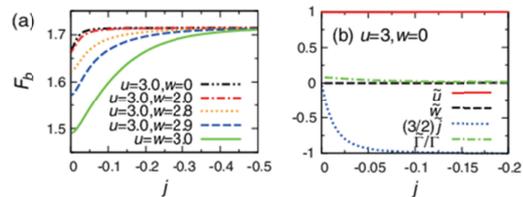
Josephson 位相が  $\phi = 0.6$  の例では， $\epsilon_d = -U/2$  付近では電子相関が大きく，輸送現象が抑えられ，ゲート電圧が  $\epsilon_d = -U/2$  付近からずれるに従い弱相関領域へとクロスオーバーが起こること等を明らかにした．

(4) 近藤効果を示す量子ドット系の非平衡定常電流，およびショットノイズ  $S$  に対する軌道縮退数  $N$  の効果をくりこまれた結合定数による摂動論と数値くりこみ群を組み合わせたアプローチを用い系統的に調べた[文献 11]．電子正孔対称な場合，低エネルギー Fermi 流体領域の性質は，準粒子間の残留相互作用の 2 次までの効果で厳密に決定されることを示した．特にショットノイズ  $S$  と後方散乱電流  $I_b$  の比であるファノ因子  $F_b$  の

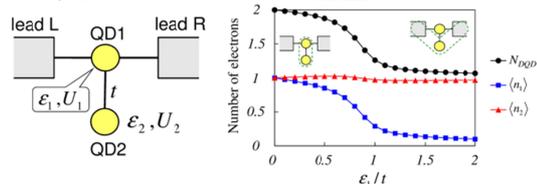
$$F_b \equiv \frac{S}{2I_b} = \frac{1+9\tilde{I}}{1+5\tilde{I}}$$

$$\tilde{I} \equiv \tilde{u}^2 + (N-2)(\tilde{w}^2 + 3\tilde{j}^2/4)$$

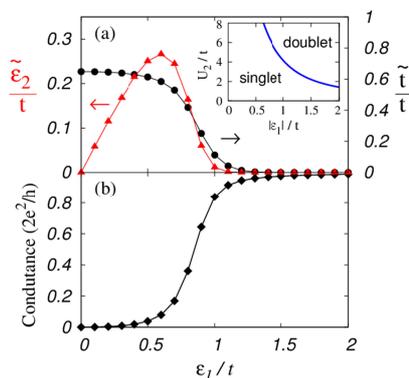
公式が導かれた．ここで， $\tilde{u} = \tilde{U}/(\pi\tilde{\Delta})$  は同一軌道内斥力， $\tilde{w} = \tilde{W}/(\pi\tilde{\Delta})$  は異なる軌道間の斥力， $\tilde{j} = \tilde{J}/(\pi\tilde{\Delta})$  は異なる軌道間に強磁性的交換相互作用である Hund 結合のくりこまれた値である．さらに，数値くりこみ群を用いて，裸の Hund 結合定数  $j = J/(\pi\tilde{\Delta})$  が強く働く場合には，縮退度が大きな場合にも電子相関の効果が強く残り  $F_b$  が増強されること等を，ハミルトニアンに含まれるパラメータの広範囲で調べ定量的に明らかにした．以下の図は，ファノ因子(右図)と，くりこまれたパラメータ  $\tilde{u}$ ， $\tilde{w}$ ， $\tilde{j}$  (左図)を裸の Hund 結合依存性の結果の例であり， $F_b$  の増強を示している．



(5) 多重量子ドットに関する研究の一環として，次の図に示すように，リード線側と異なる，脇の方向に結合し 2 重量子ドット系に



おける異なる近藤状態間のクロスオーバーについて、数値くりこみ群を用いて詳細に調べた[文献]。右上のグラフは、リードと結合した量子ドット(QD1)の離散エネルギー準位 $\varepsilon_1$ の変化に対するQD1と奥側の量子ドット(QD2)上の占有電子数の変化である。QD1にはゲート電圧が $\varepsilon_1 = 0$ の付近では、平均して1個の電子が占有され、隣接するQD2の局所磁気モーメントとsinglet対を形成する。他方、 $\varepsilon_1$ が増大するとQD1の占有数は減り、QD2上のスピンのスクリーニングはQD1を中継したリードとの高次のホッピング過程を通して起こるため、近藤singlet対は距離の隔てた長いものなり、近藤温度は低くなる。我々は、下図に見られるように、このような2種類の異なる近藤状態間のクロスオーバーは、QD1を介したリード間のコンダクタンスの変化を通して観測され、状態の変化はくりこみ因子等の局所Fermi流体のパラメータの値の変化を通して説明できることを示した。



## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計11件)

A. Oguri and R. Sakano, Exact interacting Green's function for the Anderson impurity at high bias voltages, Phys. Rev. B **88**, 155424-1 ~ 155424-11 (2013), 査読有, 10.1103/PhysRevB.88.155424

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 **63**, 423 ~ 427 (2013), 査読有, 10.3938/jkps.63.423

A. Oguri, R. Sakano and T. Fujii,  $1/(N-1)$  expansion for an  $SU(N)$  impurity Anderson model: a new large- $N$  scheme based on a perturbation theory in  $U$ , *Low-Dimensional Functional Materials* (NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics), edited by R. Egger, D. Matrasulov, and K. Rakhimov, pp. 165 ~ 178 (Springer, Dordrecht, The Netherlands, 2013), 査読有, ISBN:978-9400766662

A. Oguri, Yoichi Tanaka, and J. Bauer, Interplay between Kondo and Andreev-Josephson effects in a quantum dot coupled to one normal and two superconducting leads, Phys. Rev. B **87**, 075432-1 ~ 075432-11 (2013), 査読有, 10.1103/PhysRevB.87.075432

R. Sakano, Y. Nishikawa, A. Oguri, A. C. Hewson, and S. Tarucha, Full counting statistics for orbital-degenerate impurity Anderson model with Hund's rule exchange coupling, Phys. Rev. Lett. **108**, 266401-1 ~ 266401-4 (2012), 査読有, 10.1103/PhysRevLett.108.266401

Yoichi Tanaka, N. Kawakami and A. Oguri, Crossover between two different Kondo couplings in side-coupled double quantum dots, Phys. Rev. B **85**, 155314-1 ~ 155314-8 (2012), 査読有, 10.1103/PhysRevB.85.155314

A. Oguri, and Yoichi Tanaka, Transport through a single Anderson impurity coupled to one normal and two superconducting leads, J. Phys. Conference Series **391**, 012146-1 ~ 012146-4 (2012), 査読有, 10.1088/1742-6596/391/1/012146

阪野 隼, 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計数統計, 固体物理 **47**, 475 ~ 485 (2012), 査読有, <http://www.agne.co.jp/kotaibutsuri/kota1047.htm>

A. Oguri,  $1/(N-1)$  expansion for a finite  $U$  Anderson model away from half-filling, Phys. Rev. B. **85**, 155404-1 ~ 155404-7 (2012), 査読有, 10.1103/PhysRevB.85.155404

A. Oguri, R. Sakano, and T. Fujii,  $1/(N-1)$  expansion based on a perturbation theory in  $U$  for the Anderson model with  $N$ -fold degeneracy, Phys. Rev. B. **84**, 113301-1 ~ 113301-4 (2011), 査読有, 10.1103/PhysRevB.84.113301

R. Sakano, A. Oguri, T. Kato, and S. Tarucha, Full counting statistics for  $SU(N)$  impurity Anderson model, Phys. Rev. B. **83**, 241301-1 ~ 241301-4 (2011), 査読有, 10.1103/PhysRevB.83.241301

[学会発表](計 26 件)

佐藤 泉, 小栗 章, 超伝導リードに接続された3角形3重量子ドットの量子相転移と基底状態の性質, 日本物理学会 (2014.3.28, 東海大学 湘南).

栗根美由紀, 小栗 章, SU(N)近藤効果の $1/(N-1)$ 展開による研究: Green 関数の依存性に対する軌道縮退の効果, 日本物理学会 (2014.3.28, 東海大学 湘南).

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ラップ揺らぎ, 阪野 壘, 小栗 章, 日本物理学会 (2014.3.28 東海大学 湘南).

A. Oguri and M. Awane, Double expansion with respect to  $U$  and  $1/(N-1)$  for an SU(N) impurity Anderson model, American Physical Society March Meeting (March 3, 2014, Denver, USA).

栗根美由紀, 小栗 章, 軌道縮退 Anderson 模型  $1/(N-1)$ 展開: 量子ドット系の動的相関関数 I, 日本物理学会 (2013.9.27, 徳島大学)

小栗 章, 栗根 美由紀, 軌道縮退 Anderson 模型  $1/(N-1)$ 展開: 量子ドット系の動的相関関数 II, 日本物理学会 (2013.9.27, 徳島大学)

阪野 壘, 小栗 章, 西川裕規, A. C. Hewson,  $S=1$  近藤ドットにおける電流の spin・軌道チャネル間相関, 日本物理学会 (2013.9.27, 徳島大学)

阪野 壘, 小栗 章, 西川裕規, A. C. Hewson, 加藤 岳生, 近藤ドットによる電流中のエンタグルメント生成とベル型不等式, 日本物理学会 (2013.9.27, 徳島大学)

A. Oguri and R. Sakano, Correlations functions of an Anderson impurity at high energies, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (August 6, 2013, Tokyo).

R. Sakano, A. Oguri, Y. Nishikawa, and A. C. Hewson, Cross-correlation of Nonequilibrium Current through a Quantum Dot with a Hund's Rule Exchange Coupling, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (August 6, 2013, Tokyo).

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 II, 日本物理学会 (2013.3.27, 広島大学).

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 (2013.3.27, 広島大学)

A. Oguri, R. Sakano, and T. Fujii,  $1/(N-1)$  expansion for an SU(N) impurity Anderson model: a new large-N scheme based on a perturbation theory in  $U$ , Quantum Science of Strongly Correlated Systems Theory Forum: International Symposium on "Strongly Correlated Quantum Science (January 27, 2013, Tokyo).

A. Oguri, R. Sakano, and T. Fujii,  $1/(N-1)$  expansion for an SU(N) impurity Anderson model: a new large-N scheme based on a perturbation theory in  $U$ , the NATO Advanced Research Workshop on Recent Trends in Energy Security: with Special Emphasis on Low-Dimensional Functional Materials, (October 15, 2012, Tashkent, Uzbekistan).

小栗 章, 阪野 壘, 軌道縮退 Anderson 模型に基づく完全計数統における電流保存と  $1/(N-1)$  展開, 日本物理学会 (2012.9.20, 横浜国立大学).

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 (2012.9.20, 横浜国立大学).

A. Oguri and R. Sakano,  $1/(N-1)$  expansion for a finite  $U$  Anderson model with an SU(N) symmetry, International Conference on Magnetism (July 9, 2012, Busan, Korea).

小栗 章, 阪野 壘, 藤井達也, 軌道縮退 Anderson 模型の  $1/(N-1)$ 展開: ゲート電圧依存性および非平衡状態への拡張, 日本物理学会 (2012.3.24, 関西学院大学).

阪野壘, 西川裕規, 小栗章, A. C. Hewson, 樽茶清悟, Hund 則を有する量子ドット系の近藤効果による低バイアス非平衡電流 II, 日本物理学会 (2012.3.24, 関西学院大学).

島本将志, 小栗 章, 3 角形 3 重量子ドット系の近藤領域における Andreev 散乱と Josephson 電流, 日本物理学会 (2012.3.24, 関西学院大学).

- 21 R. Sakano, Y. Nishikawa, A. Oguri, A. C. Hewson, and S. Tarucha, Nonequilibrium current in orbital-degenerate Anderson dot with a Hund rule's coupling, The 26th Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop on Novel Quantum States in Condensed Matter: Correlation, Frustration and Topology (December 6, 2011, Kyoto).
- 22 小栗 章, 阪野 隼, 藤井 達也, 電子正孔対称・軌道縮退 Anderson 模型の  $1/(N-1)$  展開と非平衡近藤効果, 日本物理学会 (2011.9.24, 富山大学).
- 23 阪野 隼, 小栗 章, Hund 則を有する量子ドット系の近藤効果による低バイアス非平衡電流, 日本物理学会 (2011.9.24, 富山大学).
- 24 阪野 隼, 小栗 章, 加藤 岳生, 樽茶 清悟, 多端子 Anderson 量子ドット系の完全計数統と Hanbury-Brown-Twiss 効果, 日本物理学会 (2011.9.24, 富山大学).
- 25 島本将志, 小栗 章, 3 角形 3 重量子ドット系の近藤領域における近藤効果と Andreev 散乱, 日本物理学会 (2011.9.24, 富山大学).
- 26 A. Oguri and Yoichi Tanaka, Fermi Liquid Description for Andreev-Kondo Transport Through Quantum dot Coupled to Normal and Superconducting Leads, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (August 31, 2011, Cambridge, UK).

[その他]

A. Oguri, Kondo Assisted Charge Redistribution in Mesoscale Multi-Orbital Systems, JPSJ Online - News and Comments (December 10, 2012), <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJNC.9.18>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小栗 章 (OGURI AKIRA)  
大阪市立大学・大学院理学研究科・教授  
研究者番号: 10204166

(2) 研究協力者

阪野 隼 (SAKANO RUI)  
東京大学・物性研・助教  
研究者番号: 00625022

田中 洋一 (TANAKA YOICHI)  
アドバンスソフト株式会社・研究員  
(元理化学研究所・基礎科学特別研究員)

A. C. Hewson, Department of Mathematics,  
Imperial College, Senior Research  
Investigator.

島本 将志 (SHIMAMOTO MASASHI)  
大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

粟根 美由紀 (AWANE MIYUKI)  
大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

佐藤 泉 (SATO IZUMI)  
大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生