

平成 30 年 6 月 15 日現在

機関番号：24402

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400319

研究課題名(和文)メゾ・ナノスケール物質系の量子干渉と電子相関の競合に関する理論的研究

研究課題名(英文)Theoretical study on interplays of quantum interference and inter-electron interaction in nanoscale and mesoscale systems

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：量子ドットおよび金属中の磁性不純物の低エネルギー量子状態を統一的に説明するFermi流体論の微視的な拡張を行い、電子-正孔対称性のない場合における有限温度、バイアス電圧による補正項が局在電子の2体および3体感受率で決定されることを厳密に示した。我々の場の理論的な定式化は、近藤効果および強相関電子系の研究に広く応用できる。また、カーボンナノチューブなどの多数の局在軌道を持つ量子ドット系の非平衡電流および電流ノイズの低温の性質および温度依存性、励起スペクトルの構造を数値くりこみ群を用いて調べ、磁場中で観測されたSU(2)とSU(4)の近藤状態間のクロスオーバーに関する理論的な説明を与えた。

研究成果の概要(英文)：We have microscopically extended the Fermi-liquid theory for quantum dots and magnetic impurities in metals to explore low-energy non-equilibrium transport away from the particle-hole symmetric point. It reveals that the leading finite-temperature and finite-bias-voltage corrections to the transport coefficients are determined by the linear and non-linear-three-body susceptibilities of impurity electrons. Our field-theoretical description gives a clear answer to the long-standing problem, and can be applied to a wide class of Kondo systems and other strongly correlated electron systems. We have also studied a magnetic-field induced crossover from the SU(4) to SU(2) Kondo state observed in carbon nanotube quantum dots. Our results for the conductance and excitation spectrum, obtained by using the numerical renormalization group approach, agree reasonably with the experiments, which suggests the crossover is caused by a cancellation of the spin and orbital Zeeman splittings.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 量子ドット 近藤効果 フェルミ流体 電子相関 電流ゆらぎ 非平衡 国際情報研究

1. 研究開始当初の背景

量子ドットを含むメソスコピック系の輸送現象は、国内外で活発に研究が進められている分野である。最近では、ナノスケールのサイエンスとも結びつき、基礎研究から量子コンピュータなどを含めた応用まで、分野を横断した大きな潮流となっている。量子ドットの特徴は、量子化された離散エネルギー準位を持ち、準位構造がゲート電圧の変化を通し実験的に制御できることにある。そのため、様々な量子効果をコントロールし、従来は不可能であった様々な状況の下で精密な測定をすることが可能になってきた。特に、電子の波動性による干渉効果と粒子性に起因する電子間相互作用および磁場などの外場による、Aharonov-Bohm 効果、近藤効果。さらに、超伝導体を繋いだ系における Andreev 散乱と Josephson 位相など、量子力学に従う多粒子系の新奇で興味深い量子状態が実現され、基礎研究の発展が続いている。

我々は、量子ドット系の近藤効果を中心とした研究を継続して進めている。特に、非平衡電流および電流ゆらぎの低エネルギーの振る舞いに焦点をあて、Fermi 流体論に基づく定式化や数値くりこみ群を用いた計算を用いて、強相関電子系の量子状態の性質、および超伝導近接効果との競合を系統的に調べてきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、量子ドットを中心としたメゾ・ナノスケール系における量子干渉と電子間相互作用、および超伝導近接効果の競合による多彩な量子相の探究およびその性質を詳細な理論計算に基づき系統的に解明することにある。研究の主題は、次の二点からなる：

- (1) 線形応答領域を含む非平衡近藤効果による微分コンダクタンスや電流ゆらぎの低エネルギー領域の局所 Fermi 流体的なユニバーサルなスケージングの局所電子数、軌道縮退、磁場等への依存性、および高エネルギー領域への理論の拡張。
- (2) 超伝導体を含む接合系における電子相関との競合による量子状態の新たな側面の追及。量子相転移、Andreev 散乱、Josephson 効の広範囲におけるパラメータ依存性、および多端子で繋がれた接合における交差相関や非 Fermi 流体系への展開。

3. 研究の方法

我々は、場の量子論に基づく解析的なアプローチと計算機を用いた数値的なアプローチを駆使し、系統的で精密な理論計算を進めている。具体的な問題の定式化は、Anderson 模型および拡張した量子不純物系のハミルトニアンに基づいて行っている。

より詳細には、Green 関数および Ward 恒等式に基づく微視的 Fermi 流体論、くりこまれたパラメータと Feynman ダイアグラムによる展開法を用いた計算と定式化を行った。また、数値くりこみ群によって低エネルギー励起状態を高精度に求めることができるが、さらに、本研究期間中には完全系を用いたスペクトル関数の温度依存性の計算コードを作成し、多軌道系の励起スペクトル等に応用した。

4. 研究成果

(1) 局所 Fermi 流体の高次補正

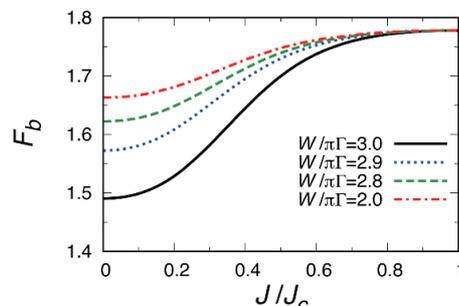
近藤効果の低エネルギー領域では、輸送係数に Fermi 流体に特徴的な振動数 ω 、温度 T 、バイアス電圧 eV に対する 2 乗の依存性が見られる。この依存性には準粒子間相互作用の効果が、二通りの寄与を通して現れる。一つは散乱による準粒子のダンピング、もう一つは準粒子エネルギーの補正であり、それぞれ自己エネルギー $\Sigma^r(\omega, T, eV)$ の虚部、実部に対応する。虚部の振る舞いは良く知られているが、実部の ω^2 、 T^2 、 $(eV)^2$ の項の係数についてはこれまで厳密なことは分かっていなかった。我々の研究では、この問題に対する完全な解答を与えた[雑誌論文]。特に、場の量子論の方法を用いて、実部の ω^2 、 T^2 、 $(eV)^2$ の項の係数の厳密な表式が、ドット内の電子数のゆらぎ $\delta n_{d\sigma} = n_{d\sigma} - \langle n_{d\sigma} \rangle$ の非線形感受率 $\chi_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3}^{[3]}$ によって完全に決定されることを示した：

$$\chi_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3}^{[3]} = - \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau_3 \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau_2 \langle T_\tau \delta n_{d\sigma_3}(\tau_3) \delta n_{d\sigma_2}(\tau_2) \delta n_{d\sigma_1} \rangle$$

我々の論文では、関連論文[C.Mora et al., Phys.Rev.B 92,075120 (2015)]で現象論的に展開された議論に微視的かつより一般的な証明を与え、さらに実部の 3 体相関による表現を与えた。これらの結果によって、電子-正孔非対称な場合における輸送係数の系統的な計算を行うことが可能になった。

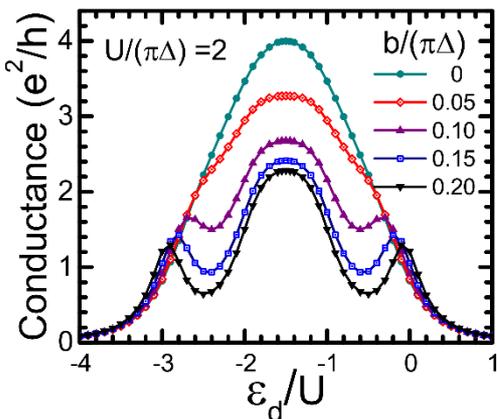
(2) Hund 結合とスピン流の交差相関

軌道縮退のある量子ドットの非平衡ゆらぎに対する Hund 結合および軌道間クーロン斥力が低エネルギーの性質に与えるの影響を調べた[雑誌論文]。その結果、電流ノイズの Fano 因子 F_b は、下図のように Hund 結合 J 依存性を示し、クーロン斥力 W が増大すると変化が顕著になる等の結果を、くりこまれた



摂動論と完全計数統計を用いて得た。さらに、電流およびスピン流の交差相関の振る舞いを完全計数統計とくりこまれた摂動論から計算し、軌道間のエンタングルメントの変化の詳細を明らかにした。

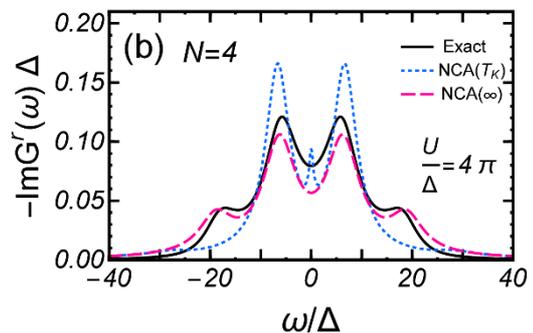
(3) カーボンナノチューブ(CNT)量子ドット
 CNT 量子ドットの実験では、SU(2)およびSU(4)近藤状態が実現されている。我々は、小林研介教授の実験グループ(阪大理)と共同して、この系で実現されている Fermi 流体状態を特徴づける重要なパラメータの一つである Wilson 比を高精度の電流ノイズの測定結果と理論の詳細な比較を通して決定した[雑誌論文]。また、この系では磁場によって誘発される SU(4)から SU(2)近藤状態へクロスオーバーが観測されている。我々は、小林グループと共同でこの実験を説明するモデルを提案し、数値くりこみ群を用いた理論計算を行った[雑誌論文]。我々がたてた仮説は、磁場中におけるスピンのゼーマン分離とナノチューブ軸回りの軌道ゼーマン分離が同じ程度の大きさであるために、磁場中でも2重縮退が残り得るというCNTでは試料によって起こり得るものである。特に、コンダクタンス、電流ノイズなどのゲート電圧依存性、磁場依存性に関する実験と仮説に基づく計算結果は良く一致し、仮説の妥当を支持することを確認した。特に、磁場 b を増大してもコンダクタンスは下図に示すようなゲート電圧依存性し、中央の幅広なピークが残ることを計算により示した:



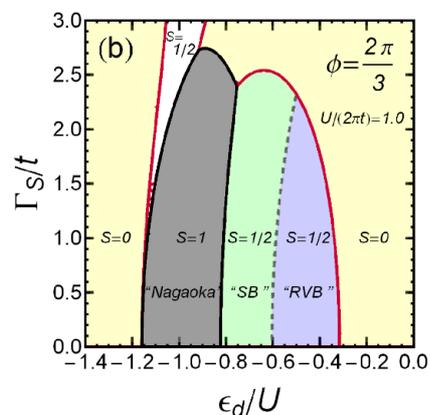
さらに、我々はコンダクタンスの温度依存性の計算を行った。その結果、有限温度においても、磁場中の SU(4)から SU(2)近藤状態へのクロスオーバーに関する実験で見られた傾向を説明できることを確認した。また、スペクトル関数など他の物理量についても詳細な計算を行い、国内外の学会で発表を行った。

(4) 高バイアス極限の厳密解
 我々は、以前の研究[A.Oguri and R.Sakano,

Phys. Rev.B 88, 155424 (2013)]において、スピン自由度のみを持つ通常の不純物 Anderson 模型の高バイアス極限、および高温極限における Green 関数の解析的な厳密解を得ていた。我々の方法は、Keldysh 形式と等価である熱的場の理論による定式化を用いたものである。我々は、高エネルギー極限で特に有効であることに注目した。本課題研究において、我々はスピンと軌道を含めて N 個の量子準位に対応する内部自由度を持つ場合へ拡張し、より一般的な解析解を任意の整数 N に対して導出した[雑誌論文]。論文では、さらに Green 関数の温度依存性について、斥力 U が有限な場合の非交差近似(NCA)による解析も行い、高温極限の厳密解との比較検討を行った。下図は、 $N=4$ の場合の比較の例である： >0 の領域では、電子数が 2-3 個への励起に対応する高いピークと、3-4 個へ励起の場合の低いピークが高温では現れる。



(5) 超伝導接合系における電子相関
 Josephson 接合に超伝導リードに接続された三角形三重量子ドットは、三角形を周回する軌道運動と電子間斥力のために誘起される長岡強磁性機構による高スピン状態と超伝導近接効果が競合する興味深い系である。我々は基底状態の Josephson 位相 による変化を厳密対角化と数値くりこみ群を用いて占有電子数の異なる広いゲート電圧の範囲で調べた[雑誌論文]。下図は、占有数が 2-4 個に相当するゲート電圧における基底状態の相図であり、縦軸の Γ_S が大きいほど超伝導近接効果が増強されスピン $S=0$ の状態が安定になる。電子数が 4 個のあたり $S=1$ 高スピン相、3 個の場合に性質の異なるスピン状態間のクロスオーバー が Josephson 位相の影響により起こっている。



また、我々は本課題研究期間中、超伝導体に接合した量子ドットのスペクトル関数の振る舞いに関する研究を進めた。スペクトル関数からは、近藤効果と超伝導の競合が、エネルギーギャップ内に形成される Andreev 束縛状態の振る舞い、およびその影響を受けたギャップより大きな領域の重みの変化などに現れる。我々は、数値くりこみ群を用いて、その詳細を系統的に調べ、国内外の学会で発表を行った。膨大な結果の蓄積があり、現在、論文準備中である。

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 9 件)

A.Oguri and A.C.Hewson, Higher-order Fermi-liquid corrections for an Anderson impurity away from half-filling, *Phys.Rev.Lett.* **120**, 126802-1 ~ 126802-6 (2018), 査読有, Doi:10.1103/PhysRevLett.120.126802

A.Oguri and A.C.Hewson, Higher-order Fermi-liquid corrections for an Anderson impurity away from half-filling: Equilibrium properties, *Phys.Rev.B* **97**, 045406-1 ~ 045406-17 (2018), 査読有, Doi: 10.1103/PhysRevB.97.045406

A.Oguri and A.C.Hewson, Higher-order Fermi-liquid corrections for an Anderson impurity away from half-filling: Nonequilibrium transport, *Phys.Rev.B* **97**, 035435-1 ~ 035435-19 (2018), 査読有, Doi: 10.1103/PhysRevB.97.045406

R.Sakano, A.Oguri, Y.Nishikawa, and E.Abe, Current cross-correlation in the Anderson impurity model with exchange interaction, *Phys.Rev.B* **97**, 045127-1 ~ 045127-13 (2018), 査読有, Doi: 10.1103/PhysRevB.97.045127

M.Ferrier, T.Arakawa, T.Hata, R. Fujiwara, R.Delagrance, R. Deblock, Y.Teratani, R.Sakano, A.Oguri, and K.Kobayashi, Quantum Fluctuations along Symmetry Crossover in Kondo-correlated Quantum Dot, *Phys.Rev.Lett.* **118**, 196803-1 ~ 196803-5 (2017), 査読有, Doi: 10.1103/PhysRevLett.118.196803

Y.Teratani, R.Sakano, R.Fujiwara, T. Hata, T.Arakawa, M.Ferrier, K.Kobayashi and A.Oguri, Field-enhanced Kondo correlations in a half-filling nanotube

dot: evolution of an SU(N), *J.Phys.Soc.Jpn.* **85**, 094718-1 ~ 094718-18 (2016), 査読有, Doi:10.7566/JPSJ.85.094718

M.Ferrier, T.Arakawa, T.Hata, R. Fujiwara, R.Delagrance, R.Weil, R. Deblock, R.Sakano, A.Oguri, and K.Kobayashi, Universality of Non-equilibrium Fluctuations in Strongly Correlated Quantum Liquids, *Nature Physics* **12**, 230-235 (2016), 査読有, Doi: 10.1103/PhysRevLett.118.196803

A.Oguri and R.Sakano, Exact Green's function for a multi-orbital Anderson impurity at high bias voltages, *Phys. Rev. B* **91**, 115429-1 ~ 115429-14 (2015), 査読有, Doi:10.1103/PhysRevB.91.115429

A.Oguri, I.Sato, M.Shimamoto, and Yoichi Tanaka, Ground-state properties of a triangular triple quantum dot connected to superconducting leads, *J.Phys.: Conference Series* **592**, 012143-1 ~ 012143-6 (2015), 査読有, Doi:10.1088/1742-6596/592/1/012143

[学会発表](計 55 件)

小栗章, 寺谷義道, 多軌道・電子 - 正孔非対称 Anderson 不純物に対する高次 Fermi 液体補正, 日本物理学会 (2018.3, 東京理科大)

寺谷義道, 小栗章, 非平衡 SU(4) 近藤効果の高次 Fermi 液体補正の局在電数依存性: 数値くりこみ群による研究, 日本物理学会 (2018.3, 東京理科大)

樋口裕太, 寺谷義道, 小栗章, 田中洋一, 量子ドット - ジョセフソン接合系の磁性 doublet 相における Andreev 束縛状態の性質 日本物理学会 (2018.3, 東京理科大)

A.Oguri, and A.C.Hewson, Higher-order Fermi-liquid corrections for an Anderson impurity away from half-filling, American Physical Society March Meeting (March 2017, Los Angeles, USA).

Y.Teratani, and A.Oguri, Temperature dependence of an SU(4) to SU(2) Kondo crossover in a half-filling carbon nanotube quantum dot, American Physical Society March Meeting (March 2017, Los Angeles, USA).

小栗章, 磁場中の非平衡 Anderson 模型における Fermi 液体補正, 日本物理学会 (2017.9, 岩手大学)

寺谷義道, 小栗章, 磁場中のカーボンナノチューブ量子ドットにおける近藤効果: NRG によるコンダクタンスとスペクトル関数の温度依存性, 日本物理学会 (2017.9, 岩手大学)

樋口裕太, 寺谷義道, 小栗章, 田中洋一, 2つの超伝導リードに接続された量子ドットのスペクトル関数および Andreev 束縛状態に関する研究 II, 日本物理学会 (2017.9, 岩手大学)

阪野壘, 小栗章, 秦徳郎, 寺谷義道, Meydi Ferrier, 荒川智紀, 小林研介, 結合非対称な近藤ドットの電流ノイズ, 日本物理学会 (2017.9, 岩手大学)

阪野壘, 小栗章, 軌道縮退不純物アンダーソン模型の繰り込まれた摂動論, 日本物理学会 (2017.9, 岩手大学)

寺谷義道, 小栗章, 阪野壘, M. Ferrier, 荒川智紀, 秦徳郎, 小林研介, 磁場による SU(4) から SU(2) 近藤状態へのクロスオーバー: NRG による有限温度の解析, 日本物理学会 (2017.3, 大阪大学)

松本龍太, 小栗章, 田中洋一, 2つの超伝導リードに接続された量子ドットのスペクトル関数および Andreev 束縛状態に関する研究, 日本物理学会 (2017.3, 大阪大学)

城谷将矢, 寺谷義道, 小栗章, 田中洋一, 超伝導/3 角形 3 重量子ドット/常伝導系の量子相転移とクロスオーバー, 日本物理学会 (2017.3, 大阪大学)

A.Oguri, M. Shirovani, Y. Nakata, Y. Teratani, and Yoichi Tanaka, Competition between Kondo and Josephson effects in a triangular triple quantum dot connected to normal and superconducting leads, American Physical Society March Meeting (March 2017, New Orleans, USA).

Y. Teratani, A. Oguri, R. Sakano, M. Ferrier, T. Hata, T. Arakawa, and K. Kobayashi, NRG study of field induced crossover from SU(4) to SU(2) Kondo state in a carbon nanotube quantum dot, American Physical Society March Meeting (March 2017, New Orleans, USA).

R. Sakano, A. Oguri, Y. Nishikawa, and E. Abe, Bell pair creation in current of Kondo-correlated dot, American Physical Society March Meeting (March 2017, New Orleans, USA).

寺谷義道, 小栗章, 阪野壘, M. Ferrier, 荒川智紀, 秦徳郎, 小林研介, カーボンナノチューブ量子ドットにおける近藤効果: スピン軌道相互作用と Hund 結合の影響, 日本物理学会 (2016.9, 金沢大学)

小栗章, 寺谷義道, 阪野壘, Meydi Ferrier, 荒川智紀, 秦徳郎, 小林研介, SU(N)-M 電子 近藤 singlet 状態の局所電子分布, 日本物理学会 (2016.9, 金沢大学)

阪野壘, 小栗章, 西川裕規, 阿部英介, 局所フェルミ流体のベル相関と完全計数統計, 日本物理学会 (2016.9, 金沢大学)

城谷将矢, 寺谷義道, 小栗章, 田中洋一, 超伝導および常伝導リードに接続された 3 角形 3 重量子ドットにおける近藤効果と Josephson 効果の競合 II, 日本物理学会 (2016.9, 金沢大学)

⑲ 松本龍太, 小栗章, 田中洋一, Josephson 接合に埋め込まれた量子ドットのスペクトル関数: 数値くりこみ群による研究 II, 日本物理学会 (2016.9, 金沢大学)

⑳ 寺谷義道, 小栗章, 阪野壘, M. 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磁場と軌道分裂の効果 II, 日本物理学会 (2016.3, 東北学院大学)

㉑ 小池章高, 小栗章, 田中洋一, Josephson 接合に埋め込まれた量子ドットのスペクトル関数: 数値くりこみ群による研究, 日本物理学会 (2016.3, 東北学院大学)

㉒ 中田幸宏, 寺谷義道, 小栗章, 田中洋一, 超伝導および常伝導リードに接続された 3 角形 3 重量子ドットにおける近藤効果と Josephson 効果の競合, 日本物理学会 (2016.3, 東北学院大学)

㉓ R. Sakano, A. Oguri, and Y. Nishikawa, Full counting statistics for current through each channel of orbital degenerate Anderson impurity with exchange interactions, American Physical Society March Meeting (March 2016, Baltimore, USA).

㉔ 寺谷義道, 小栗章, 阪野壘, 吉井涼輔, M. 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磁場と軌道分裂の効果, 日本物理学会 (2015.9, 関西大学)

㉕ 小栗章, 中田幸宏, 小池章高, 田中洋一, 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 II, 日本

物理学会 (2015.9, 関西大学)

⑳ A.Oguri, Rui Sakano, R.Yoshii, M.Ferrier, T.Arakawa, T.Hata, R. Fujiwara, and K.Kobayashi, Effects of orbital splitting on the Kondo effect in a two-orbital quantum dot, 21st International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (July 2015, Sendai, Japan).

㉑ A.Oguri, Some new analytical and numerical approaches to an SU(N) impurity Anderson model, International Workshop on New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (June 2015, Kashiwa, Japan).

⑳ Y.Teratani, and A.Oguri, Kondo effect in a carbon nanotube quantum dot with a finite orbital splitting and a magnetic field, International Workshop on New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (June 2015, Kashiwa, Japan).

㉒ 小栗章, 阪野塁, 吉井涼輔, M.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 (2015.3, 早稲田大学)

㉓ A.Oguri and R.Sakano, $1/(N-1)$ expansion, NRG, NCA, and exact T limit for the Green's function of an SU(N) Anderson impurity, American Physical Society March Meeting (March 2015, San Antonio, USA).

㉔ A.Oguri, M.Awane, and R.Sakano, Green's function for an SU(N) Anderson impurity: a comprehensive study with $1/(N-1)$ expansion, NRG, NCA, and exact high-temperature limit, Workshop on Recent Developments in the Kondo Problem (January 2015, Kashiwa, Chiba).

㉕ 小栗章, 阪野塁, 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 (2014.9, 中部大学)

㉖ 阪野塁, 小栗章, M.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 (2014.9, 中部大学)

36 A.Oguri, I.Sato, M.Shimamoto, and Yoichi Tanaka, Ground-state properties of a triangular triple quantum dot connected

to superconducting leads, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (July 2014, Grenoble, France).

37 ~ 55 他 19 件 .

〔その他〕

ホームページ等

『近藤果の対称性と量子ゆらぎの挙動を明らかに』

<http://www.osaka-cu.ac.jp/ja/news/2017/170428-2>

『～物理学の未踏領域へ～ 世界初! 不思議な量子液体の挙動を明らかに!』

<http://www.osaka-cu.ac.jp/ja/about/pr/p/ress/2015/151124>

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: 1 0 2 0 4 1 6 6

(3) 連携研究者

阪野 塁 (SAKANO RUI)

東京大学・物性研・助教

研究者番号: 0 0 6 2 5 0 2 2

(4) 研究協力者

田中 洋一 (TANAKA YOICHI)

株式会社先端力学シミュレーション研究所・主任

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

寺谷 義道 (TERATANI YOSHIMICHI)

大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

中田 幸宏 (NAKATA YUKIHIRO)

大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

小池 章高 (KOIKE NORITAKA)

大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

松本 龍太 (MATSUMOTO RYUTA)

大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

城谷 将矢 (MATSUMOTO MASAYA)

大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生

樋口 裕太 (MATSUMOTO YUTA)

大阪市立大学・大学院理学研究科・大学院生