相互作用のある電子系の透過係数:量子ドット系への応用

大阪市立大学 理学部 物質科学科　**小栗 章**

近年の技術の進歩により、量子ドット、ナノメータサイズの原子鎖など様々な微細な系が作成され、クーロンブロッケイド、近藤効果のような電子間相互作用の効果が本質的である現象が観測されてきている。このような系の輸送的性質をメゾスコッピク系における電子相関という観点から考えてみると、干渉効果、励起スペクトルに対する多体効果、および非弾性散乱が複雑に関係するため、電気伝導度を評価する理論式自身がそれほど自明ではない。我々の目的は、電子相関のあるメゾスコピック系の輸送理論を Kubo 公式に基づき整理し、実際の系へ応用することにある。

我々が考える系の概要を図 1 に示す: 中央に有限自由度の多体系があり、その左右に相互作用のない無限自由度のリザーバーが接続されている。この系のコンダクタンスは Kubo 公式により電流-電流相関関数と関連づけられるが、Hamiltonian が時間反転対称性を持つ場合、相関関数の解析的性質 [1] からの帰結として、コンダクタンスを $g = (2e^2/h)\int d\epsilon\,(-\partial f/\partial\epsilon)\,\mathcal{T}(\epsilon)$ と Landauer 型の表式に書くことができる [2]。ここで、$f(\epsilon)$ は Fermi 分布関数。透過確率 $\mathcal{T}(\epsilon)$ は vertex 関数、または電流の 3 点相関関数を用いて定義される。以下では、この概略について解説する。

全系の Hamiltonian は次の通り、$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \;+\; \mathcal{H}_C^{(I)}$;

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}_0 &= \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_R + \mathcal{H}_C^{(0)} + \mathcal{H}_{\rm mix} \quad = \quad \sum_{\sigma}\sum_{ij}\Big(t_{ij} - \mu\,\delta_{ij}\Big)\,c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}\ , \\
\mathcal{H}_{\rm mix} &= -\sum_{\sigma}\Big(v_L\,c^{\dagger}_{1\sigma}c_{0\sigma} \;+\; v_R\,c^{\dagger}_{N+1\sigma}c_{N\sigma} \;+\; {\rm H.c.}\Big)\ , \\
\mathcal{H}_C^{(I)} &= \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\{j\}\in C} U_{j_4j_3:j_2j_1}\,c^{\dagger}_{j_4\sigma}c^{\dagger}_{j_3\sigma'}c_{j_2\sigma'}c_{j_1\sigma}\ .
\end{aligned}
$$

ここで、$\mathcal{H}_0$ は全 Hamiltonian の一体部分。そのうち、$\mathcal{H}_L$ ($\mathcal{H}_R$) は左 (右) のリード線内の Hamiltonian、特に $\mathcal{H}_{\rm mix}$ はリード線と試料の接続を表す。中央の試料の領域 (C) には N 個の量子準位があり、$\mathcal{H}_C^{(0)}$ は一体部分、$\mathcal{H}_C^{(I)}$ は相互作用部分を表

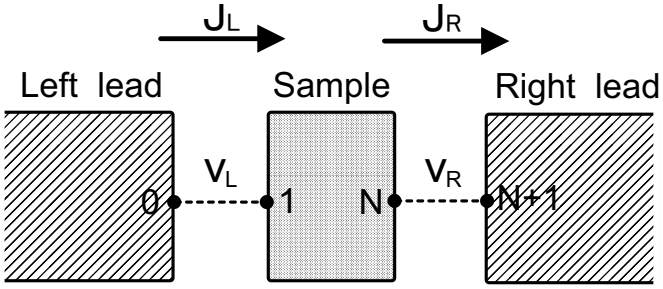

図 1: 全系の構成

す。試料内の各準位間の連結は任意だが、左 (右) のリードと混成する軌道を “1” (“N”) と番号づける。また、t_{ij} と $U_{43:21}$ については時間反転対称性を仮定する。コンダクタンスの定義は久保公式より, $g \equiv \lim_{\omega\to 0}\,[\,K_{\alpha\alpha'}(\omega+i0^+) - K_{\alpha\alpha'}(i0^+)\,]\,/(i\,\omega)$;

$$K_{\alpha\alpha'}(i\nu_n) \;=\; \int_0^\beta d\tau\,\langle\, T_\tau\, J_\alpha(\tau)\, J_{\alpha'}(0)\,\rangle\, e^{i\,\nu_n\tau}\;, \qquad\qquad (\alpha,\alpha' = L,R)\;,$$

左側の連結部の電流は $J_L = \sum_\sigma i\,e\,v_L\left(c^\dagger_{1\sigma}c_{0\sigma} - c^\dagger_{0\sigma}c_{1\sigma}\right)$, 右側の電流 J_R も同様に定義される。遅延関数 $K_{\alpha\alpha'}(\omega+i0^+)$ は解析接続により得られるが [3]、そのためには試料内部の相互作用 $\mathcal{H}_C^{(I)}$ による vertex 関数 $\Gamma^{\sigma\sigma'}_{j_1j_2;j_3j_4}(i\varepsilon, i\varepsilon'; i\nu)$ の 3 変数の複素関数としての解析性的性質を知る必要がある (図 2 参照)。1 粒子 Green 関数 $G_{jj'}(z)$ の場合、z の実軸に不連続があり上下半面の 2 つの解析的な領域に分けられるが、vertex 関数の場合は図 3 に示した線により 16 個の領域に分けられる [1,4]。

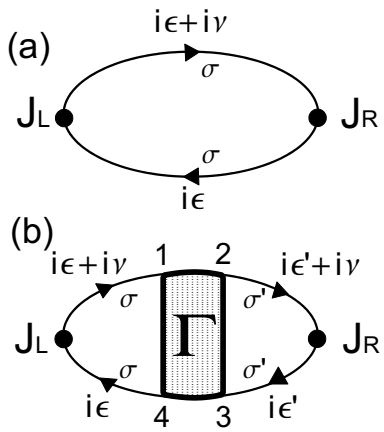

図 2: $K_{RL}(i\nu)$ の Feynman 図

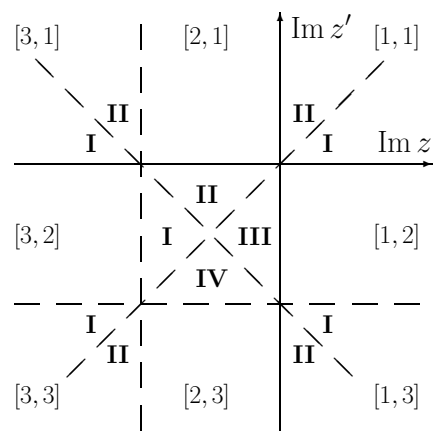

図 3: $\Gamma^{\sigma\sigma'}_{j_1j_2;j_3j_4}(z,z';w)$ の解析的領域

$K_{\alpha\alpha'}(i\nu)$ の解析接続には、さらに図 2 中に ● で記された電流演算子 J_α の vertex 部分, $\lambda_\alpha(i\varepsilon, i\varepsilon+i\nu)$, の性質が反映される。いま $\mathcal{H}_L$ は 2 次形式で書かれているため、図 2 における J_L の寄与は、試料内の左端の準位 “1”における local な 3 点 vertex として、$\lambda_L(i\varepsilon, i\varepsilon+i\nu) = -i\,e\,v_L^2\,[\,g_L(i\varepsilon+i\nu) - g_L(i\varepsilon)\,]$ と書くことがきる。ここで、$g_L(i\varepsilon)$ は $\mathcal{H}_L$ によって決定される左リードの連結部の Green 関数である。右リードに関しても同様に、J_R の寄与は試料右端の準位 “N”における local な vertex として、$\lambda_R(i\varepsilon, i\varepsilon+i\nu) = i\,e\,v_R^2\,[\,g_R(i\varepsilon+i\nu) - g_R(i\varepsilon)\,]$ と表される。

コンダクタンスは $\mathrm{Im}\,K_{\alpha\alpha'}(\omega+i0^+)$ の ω に関する 1 次の展開係数に対応するが、以上の性質から解析接続の結果はつぎのようにまとめられる;

$$g \;=\; \frac{2e^2}{h}\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\,\left(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}\right)\,\mathcal{T}(\epsilon)\;.$$

透過確率の表式を図 2 の (a)(b) の寄与に分けて記すと、$\mathcal{T}(\epsilon) = \mathcal{T}^{(a)}(\epsilon) + \mathcal{T}^{(b)}(\epsilon)$;

$$\mathcal{T}^{(a)}(\epsilon) \;=\; 4\,\Gamma_L(\epsilon)\,G^-_{1N}(\epsilon)\,\Gamma_R(\epsilon)\,G^+_{N1}(\epsilon)$$

$$\mathcal{T}^{(b)}(\epsilon) = \sum_{\substack{\{j\}\in C\\ \sigma'}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon'}{2\pi i}\, 4\,\Gamma_L(\epsilon) G^{+}_{j_1 1}(\epsilon) G^{-}_{1 j_4}(\epsilon)\, \mathcal{L}^{\sigma\sigma'[22]}_{j_1 j_2;\, j_3 j_4}(\epsilon,\epsilon';0)\, G^{-}_{j_3 N}(\epsilon') G^{+}_{N j_2}(\epsilon') \Gamma_R(\epsilon')\ ,$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{\sigma\sigma'\,[22]}_{j_1 j_2;\, j_3 j_4}(\epsilon,\epsilon';0) \ &= \ [\, f(\epsilon') \,+\, \mathcal{P}\, b(\epsilon'-\epsilon)\,] \Big[\ \Gamma^{\sigma\sigma'[22;\,\mathrm{II}]}_{j_1 j_2;\, j_3 j_4}(\epsilon,\epsilon';0) \,-\, \Gamma^{\sigma\sigma'[22;\,\mathrm{III}]}_{j_1 j_2;\, j_3 j_4}(\epsilon,\epsilon';0)\ \Big] \\ &\quad + [\, f(\epsilon') \,+\, \mathcal{P}\, b(\epsilon'+\epsilon)\,] \Big[\ \Gamma^{\sigma\sigma'[22;\,\mathrm{III}]}_{j_1 j_2;\, j_3 j_4}(\epsilon,\epsilon';0) \,-\, \Gamma^{\sigma\sigma'[22;\,\mathrm{IV}]}_{j_1 j_2;\, j_3 j_4}(\epsilon,\epsilon';0)\ \Big]\,.\end{aligned}$$

ここで、$G^{\pm}_{jj'}(\omega) = G_{jj'}(\omega \pm i0^+)$、遅延 (+)・先進 (−) Green 関数を表す。$\Gamma_L(\epsilon) = -\,v_L^2\,\mathrm{Im}\, g_L(\epsilon + i0^+)$、$\Gamma_R(\epsilon) = -\,v_R^2\,\mathrm{Im}\, g_R(\epsilon + i0^+)$。Fermi 分布 $f(\epsilon)$、および Bose 分布関数 $b(\epsilon)$ は、図 2 の松原振動数の和から表れる。$\mathcal{P}$ は Cauchy の主値。$\Gamma^{[22;\,\mathrm{I}]}$, ..., $\Gamma^{[22;\,\mathrm{IV}]}$ は、それぞれ図 3 の中央の正方形の領域 [2,2] の中で、斜線によって分けられた領域 (I, II, III, IV) において解析接続された vertex 関数を表わす。つまり $\mathcal{L}^{\sigma\sigma'\,[22]}_{12;\,34}(\epsilon,\epsilon';0)$ は、斜線における vertex 関数の虚数部のとびの大きさに相当している。

また、透過確率は次のようにも書き表わされる; $\mathcal{T}(\epsilon) = 2\,\Gamma_L(\epsilon)\,\Phi^{[2]}_{R;11}(\epsilon,\epsilon)$,

$$\Phi_{R:jj'}(i\varepsilon, i\varepsilon + i\nu) \ = \ \frac{1}{\beta}\int_0^{\beta} d\tau\, d\tau_1 \mathrm{d}\tau_2\, e^{i\nu\tau}\, e^{i\varepsilon\tau_1}\, e^{-i(\varepsilon+\nu)\tau_2}\ \Big\langle T_\tau\, J_R(\tau)\, c_{j\sigma}(\tau_1)\, c^{\dagger}_{j'\sigma}(\tau_2)\Big\rangle\,,$$

$$\Phi^{[2]}_{R:jj'}(\epsilon, \epsilon+\omega) \ = \ \Phi_{R:jj'}(i\varepsilon, i\varepsilon + i\nu)\Big|_{i\varepsilon+i\nu\to\epsilon+i0^+,\ \ i\varepsilon\to\epsilon-i0^+}\ .$$

つまり 3 点相関関数 $\Phi^{[2]}_{R:11}(\epsilon,\epsilon+\omega)$ は、対応する松原関数 $\Phi_{R:11}(i\varepsilon, i\varepsilon+i\nu)$ を振動数が $\varepsilon+\nu > 0$, かつ $\varepsilon < 0$ である領域において解析接続することにより得られる。この 3 点相関関数による表式を用いると、数値くりこみ群、厳密対角化、量子モンテカルロ法等の摂動によらない計算法で $\mathcal{T}(\epsilon)$ を求めることも原理的に可能であり、$\Phi^{[2]}_{R:11}(\epsilon,\epsilon)$ の Lehmann 表示も与えられている [2]。

我々は、量子ドットへの応用として、摂動的な計算も行っている [2]。具体的には、直列に連結された Anderson 不純物かなる系において、self-energy と vertex 関数を斥力 U の 2 次摂動で計算し、透過確率のエネルギー依存性、温度依存性を調べた。得られた $\mathcal{T}(\epsilon)$ は、低温では、低エネルギー部に共鳴ピーク、高エネルギー部に atmoic な Hubbard band を持ち、多体系の励起スペクトルの構造を強く反映している。低エネルギーの共鳴ピークの構造は、温度の上昇するにしたがい徐々に消失する。この温度依存性には vertex 補正の効果が重要に効いているが、我々の計算では Ward の恒等式が満され、電子相関によるスペクトルの変化と非弾性散乱による damping の効果と電流の保存が矛盾なく取り入れられている。

[1] G. M. Eliashberg: JETP **14** (1962) 886.

[2] A. Oguri: J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 2666.

[3] 試料内の電子数 $\rho_C = e\sum_\sigma \sum_{j\in C} c^{\dagger}_{j\sigma} c_{j\sigma}$ との間の保存則, $\partial\rho_C/\partial t + J_R - J_L = 0$ のため、g の値は α, α' の選び方に依らない。

[4] 図 3 の破線は, $\mathrm{Im}\,(z-z') = 0$, $\mathrm{Im}\,(z+z'+w) = 0$, $\mathrm{Im}\,(z'+w) = 0$, $\mathrm{Im}\,(z+w) = 0$.