

## 量子散乱状態とメゾスコピック系の電気伝導

西野 晃徳\*

### Quantum Scattering States and Electron Transport in Mesoscopic Systems

Akinori NISHINO\*

#### 1. はじめに

前世紀初頭に構築された量子力学は、今やニュートン力学を「古典」の地位へと追いやり、現代物理学を支える一本の柱となったと言ってもよいであろう。水素原子に束縛されている電子のエネルギーや角運動量が離散的な値をとるという衝撃的な結果は、電子が波の性質を持つことによって説明され得る。それでは身の回りにあふれる電化製品の中に流れる電子達は、波のように強め合ったり、打ち消し合ったりしているのだろうか？ どのような測定をすれば、電子が波であることを実感できるのだろうか？

そのような疑問に答えてくれたのが、メゾスコピック系の研究である[1-4]。文献によれば、メゾスコピック系とはマクロ（巨視的）な系と、ミクロ（微視的）な系の「中間の大きさ」の系である。原子のようなミクロな系において、電子は波の性質を持つ。一方、金属のようなマクロな系においては、電子は他の電子や格子振動のフォノンとの相互作用により散乱され、波としての干渉性（コヒーレンス）を失ってしまう。電子が波としての干渉性を保持できる距離はコヒーレンス長と呼ばれ、メゾスコピック系はこの長さより小さい系として特徴付けられる。

近年の微細加工技術の進歩により、メゾスコピック系を半導体上で作製できるようになった。典型的なデバイスのサイズは数 $\mu\text{m}$ から100nm程度で、そのような技術が現代のナノテクノロジーの礎となっていることは言うまでもない。このようなデバイスにおける電気伝導は、電子が干渉性を保持して流れるコヒーレント伝導であり、マクロな系のものとは全く違ったものとなる。リング型

のデバイスではリングを貫く磁場の変化で電気伝導度が振動し[5]、量子ポイントコンタクトと呼ばれるデバイスでは電気伝導度が離散値をとる[6]。これらは古典論では説明できない。さらに重要なことは、そのようなデバイスを実験室で自在に設計し、制御できることにある。

次々と新しい実験結果が発表される中で、メゾスコピック系の電気伝導理論にも大きな関心が寄せられている。半導体量子デバイスにおいては、電子はフォノンとの散乱が非常に少なく、バイアス電圧下では、系は線形応答領域を超えて、平衡状態とは「遠く離れた」非平衡状態にある。従って、平衡系の解析に用いられてきた手法はそのままでは使えない。メゾスコピック系の電気伝導の研究は、未だ発展途上の非平衡系の理論を育てる舞台を提供しているとも言える。

本解説では、ランダウアー公式を用いて、メゾスコピック系の電気伝導特性を調べる方法について紹介する[1-4] [7-9]。ランダウアー公式とは、ある種のメゾスコピック系の電気伝導度が電子の散乱状態の透過確率に比例する、という実に単純なものである。この公式は、最初は現象論的に導入されたが、実験による検証を経て、現在では最も「手軽な」電気伝導度の計算方法として受け入れられている。尚、オリジナルのランダウアー公式は相互作用のない場合にのみ適用されるものであったが、最近、我々は相互作用系への拡張も成功している[10-11]。

本稿の構成は以下の通りである：第2節でメゾスコピック系の電気伝導について概説する。2つの半導体量子デバイス、量子ポイントコンタクトと開放型量子ドットを紹介し、そのようなデバイスの電気伝導度を計算するためのランダウアー公式について説明する。第3節ではポテンシャル障壁の存在下で、量子力学的な散乱状態を具体的に構成し、透過確率を計算する。これにより、開放型量子ドットにおける共鳴伝導が説明される。第4節

\*准教授 物理学教室  
Associate Professor, Institute of Physics

では共鳴伝導を再現するように単純化された開放型量子ドットを導入する。この単純化を通じて、二重量子ドット、相互作用共鳴準位模型の電気伝導を議論する。

## 2. メゾスコピック系の電気伝導

### 2. 1 半導体量子デバイス

近年の微細加工技術の進歩により、量子ドット、量子細線などのメゾスコピック系を半導体上に作製できるようになった。図 1 の模式図のような半導体デバイスを考えよう。バンドギャップは異なるが、格子定数は近い半導体 GaAs と混晶半導体 (Al, Ga)As のヘテロ接合を作る。その接合界面にはポテンシャル井戸が形成されて電子が閉じ込められるため、十分低温ではこの界面を 2 次元電子系とみなすことができる。このヘテロ接合に図 1 のように電極を付け、負の電圧をかけると、2 次元電子系内にポテンシャル障壁が形成される。ここで、ポテンシャル障壁間の狭い出入り口は量子ポイントコンタクト (QPC) と呼ばれる。実験 [6] において作製された QPC のサイズは約 250nm であり、この場合に期待されるコヒーレンス長 10 $\mu$ m 程度より十分小さいため、QPC 付近ではコヒーレント伝導が実現される。実際、QPC を通過する電流の伝導度はゲート電圧に対して量子化されており [6]、これはコヒーレント伝導によって説明される。

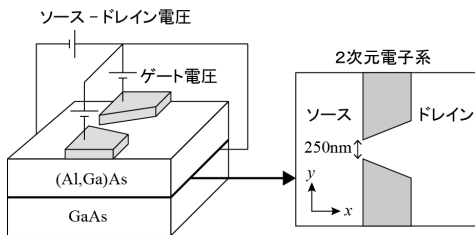


図 1 半導体ヘテロ接合の界面にできる 2 次元電子系にゲート電圧をかけて作製された量子ポイントコンタクト (QPC) の模式図 [6].

次に図 2 のような 6 つの電極 F, C, 1, 2, 3, 4 を持つデバイスを考えよう。電極 F, C, 1, 2 に負の電圧をかけることで、電子は量子ドットと呼ばれる図の中央付近の破線円で示される領域に閉じ込められる。量子ドットには電極 F と 3 あるいは電極 F と 4 によって形成される導線 (量子細線) が左右から接続されており、ソース・ドレイン電圧をかけて電流の測定ができる。実験 [12] で作製された量子ドットの半径は約 300nm であり、量子ドット付近ではコヒーレント伝導が実現される。実際、量子ドットを通過する電流には伝導度の共鳴が観測され

ている [12].

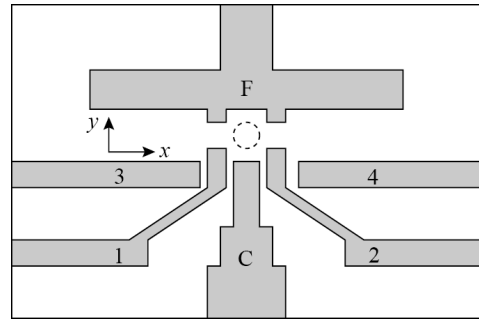


図 2 半導体ヘテロ接合の界面にできる 2 次元電子系に電圧をかけて作製された量子ドットの模式図 [12].

これら 2 つの先駆的な実験以降も、より精密な半導体量子デバイスが作製されている [13-19]. このようなデバイスの利点は様々なパラメータ領域で電気伝導を調べられることにある。例えば図 2 のデバイスにおいて、電極 C の電圧 (ゲート電圧) を調整すると、量子ドットの大きさを変化させることができる。また、電極 1, 2 の電圧を調整すれば、量子ドットと導線の間のポテンシャル障壁を変化させることができる。

### 2. 2 ランダウアー公式

上で見たようなメゾスコピック系の電気伝導度 (= 電気抵抗の逆数) の計算方法の 1 つとしてランダウアー公式が用いられる [1-4] [7-9]. ランダウアー公式が適用されるのは、図 3 のような微小な試料が導線を通じて左右の電極に接続されているような系において、相互作用が無視できる場合である。電子を量子力学的に扱うことで、コヒーレント伝導が調べられる。図 3 のようにソース・ドレイン電圧をかけたとき、ソース側から試料に向けて入射される電子の 1 つに着目しよう。デバイス (試料 + 導線) はコヒーレンス長よりも十分小さいため、電子は波動として振舞い、一部は試料付近のポテンシャル障壁で反射され、一部は試料を透過してドレイン側へ進む。この反射確率を  $R$ 、透過確率を  $T=1-R$  と表すと、電極間の電気伝導度  $G$  は

$$G = \frac{2e^2}{h} T \quad (1)$$

で与えられる。これがランダウアー公式である。ここで  $e$  は素電荷、 $h$  はプランク定数であり、因子 2 はスピン自由度による。透過確率  $T$  は  $0 \leq T \leq 1$  の値をとるため、伝導度に上限値  $G_0 = 2e^2/h$  が存在することが分かる。透過確率  $T=1$  でも電気伝導度が有限なのは、ランダウアー公式

で与えられる電気伝導度が試料と導線からなるデバイスの電気伝導度であるからである。このランダウアー公式は、QPC における伝導度の量子化や、開放型量子ドットにおける共鳴伝導を再現する。実は式(1)の係数  $G_0=2e^2/h$  が伝導度の量子化値を与える。

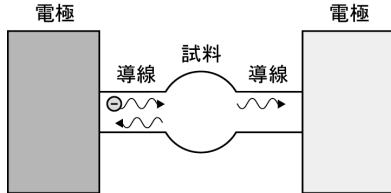


図 3 ランダウアー公式が適用される系。

電気抵抗がエネルギー散逸により現れることを思い出すと、エネルギーを保存した散乱状態が電気伝導度を決めるというランダウアー公式は奇妙に思える。それではどこでエネルギー散逸が起こっているのかと言うと、次のように解釈されている[1-2]。左右の電極は試料部分に比べて十分大きいので、試料から少々電流が流れても各々平衡状態を保つと考えられる（そのような時間スケールの測定を考える）。これは熱力学における熱浴に対応するものであり、熱だけでなく電子の出入りがあることから、電子溜と呼ぶことにする。この左右の電子溜がフェルミ分布で特徴付けられ、左右の電子溜から入射される電子はインコヒーレントであると仮定すると、各入射電子のエネルギーは各々のフェルミ分布に従っているはずである。ここで左の電子溜から入射された電子は試料を通じて右の電子溜に移動するが、この電子が再び試料に入射される際に右の電子溜のフェルミ分布に従っているためには、再入射前に右の電子溜で緩和されている必要がある。この緩和の過程でエネルギー散逸が起こる。

一般に透過確率は電子の入射エネルギーに依存するため、電気伝導度は入射エネルギー  $E$  の関数  $G(E)$  となる。左右の電子溜がフェルミ分布に従っていると仮定すれば、量子ドットを通過する電流はソースドレイン電圧  $V$  の関数として

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE T(E) (f_{eV/2}(E) - f_{-eV/2}(E)) \quad (2)$$

と与えられる[8]。ここで  $f_{\mu}(E)$  は逆温度  $\beta$ 、化学ポテンシャル  $\mu$  のフェルミ分布関数

$$f_{\mu}(E) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E-\mu)}} \quad (3)$$

である。

ここで説明したランダウアー公式は、相互作用が無視できる場合にのみ電気伝導度、電流の計算が可能であっ

た。我々の最近の研究では、量子ドット付近の電子間クーロン相互作用を考慮すべき場合も、相互作用の効果を取り入れた多電子散乱状態を用いて同様の電流計算が可能であることを明らかにした[10-11]。これについては第4節で説明する。

### 3. ポテンシャル障壁による散乱状態

#### 3. 1 単一のポテンシャル障壁

前節の議論から、電気伝導度の計算には電子の散乱状態を調べるのが重要であることが分かる。電子が単一のポテンシャル障壁に対してどのように振る舞うかを考えよう。最初に、図4のようなポテンシャル障壁による散乱問題を考える[20]。これは図1のQPCのx軸方向の運動に対応する。運動エネルギー  $E$  を持つ電子が、高さ  $V_g$  のポテンシャル障壁に向かって、左から入射されたとする。電子が古典力学に従う古典粒子であるとすれば、エネルギー保存則により、 $E > V_g$  の場合には透過確率は1となり、 $0 < E < V_g$  の場合には透過確率が0となるはずである。しかし、電子を量子力学的に扱うと異なる結果が得られる。

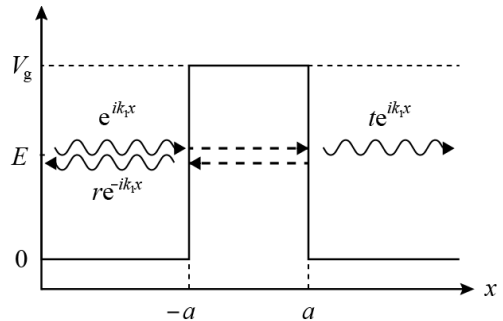


図 4 ポテンシャル障壁による散乱。

電子の質量を  $m$ 、また  $\hbar = h/(2\pi)$  とすると、電子の定常状態（＝エネルギーが一定の状態）を記述する波動関数  $\psi(x)$  は次のシュレディンガー方程式に従う：

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x). \quad (4)$$

ここでポテンシャル  $V(x)$  は図4に従って

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| > a) \\ V_g & (|x| < a) \end{cases} \quad (5)$$

と設定する。このシュレディンガー方程式の解は、ポテンシャルが一定の領域内では、一定の（実数あるいは純虚数の）波数を持つ右向きと左向きの平面波の重ね合わせで与えられる。従って、エネルギー  $E$  の自由電子平面波を左から入射した場合の波動関数は  $r, t, A, B$  を未知係数として

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + r e^{-ik_1x} & (x < -a) \\ A e^{ik_2x} + B e^{-ik_2x} & (-a < x < a) \\ t e^{ik_1x} & (a < x) \end{cases} \quad (6)$$

の形をとる。ここで

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_g)}}{\hbar} \quad (7)$$

である。左から入射したために、領域  $a < x$  には右向きの平面波のみが現れることに注意。  $E - V_g > 0$  の場合は  $k_2$  が実数となるため波動関数は平面波になるが、  $E - V_g < 0$  の場合は  $k_2$  が純虚数となるため波動関数は指数関数的になる。

未知係数  $r, t, A, B$  は波動関数  $\psi(x)$  とその導関数  $\psi'(x)$  の境界  $x = -a, a$  での連続性により決定される：

$$\begin{aligned} \psi(\pm a - 0) &= \psi(\pm a + 0), \\ \psi'(\pm a - 0) &= \psi'(\pm a + 0). \end{aligned} \quad (8)$$

これらは4つの未知変数  $r, t, A, B$  に対する連立1次方程式

$$\begin{aligned} e^{-ik_1a} + r e^{ik_1a} &= A e^{-ik_2a} + B e^{-ik_2a}, \\ k_1(e^{-ik_1a} - r e^{ik_1a}) &= k_2(A e^{-ik_2a} - B e^{-ik_2a}), \\ A e^{ik_2a} + B e^{-ik_2a} &= t e^{ik_1a}, \\ k_2(A e^{ik_2a} - B e^{-ik_2a}) &= k_1 t e^{ik_1a} \end{aligned} \quad (9)$$

を与え、これは手計算で扱えるレベルである。結果として、反射係数  $r$  と透過係数  $t$  は

$$\begin{aligned} r &= \frac{(k_1^2 - k_2^2) e^{-2ik_1a} \sin(2k_2a)}{(k_1^2 + k_2^2) \sin(2k_2a) + 2ik_1k_2 \cos(2k_2a)}, \\ t &= \frac{2ik_1k_2 e^{-2ik_1a}}{(k_1^2 + k_2^2) \sin(2k_2a) + 2ik_1k_2 \cos(2k_2a)} \end{aligned} \quad (10)$$

と得られる。

この散乱状態の透過確率  $T(E)$  は透過係数を  $t$  を入射エネルギー  $E$  の関数  $t(E)$  として

$$T(E) = |t(E)|^2 \quad (11)$$

と計算される。図5は  $\hbar = 1, 2m = 1, V_g = 10$  で障壁の厚み  $2a$  を変化させたときの透過確率  $T(E)$  である。入射エネルギーが  $E > V_g$  の場合にも、古典粒子のように透過確率は1とはならず、電子の一部は反射されていることが分かる。 $0 < E < V_g$  の場合には、電子の一部が障壁を通り抜けて透過する。これがトンネル効果である。トンネル効果でポテンシャル障壁を通り抜ける電流は、当然、障壁が薄いほど大きい。

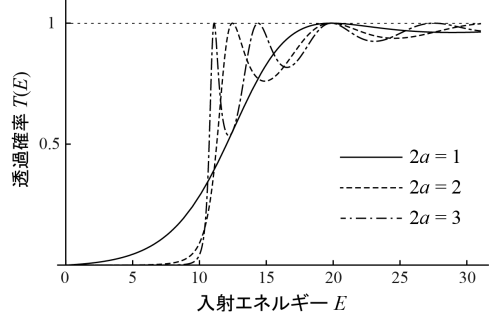


図5 単一ポテンシャルに対する散乱状態の透過確率。  $\hbar = 1, 2m = 1, V_g = 10$  で障壁の厚みが  $2a = 1, 2, 3$  の3つの場合。

実際に QPC の伝導度を再現するには、図1の  $y$  方向の運動も考慮し、多チャンネルの効果を取り入れる必要がある。QPC 付近では  $y$  方向の閉じ込めポテンシャルにより、 $y$  方向の運動は離散的なエネルギー固有値をとる。同じ入射エネルギーであっても、この  $y$  方向の運動が異なるエネルギーに対応する場合は、別のチャンネルとして区別する。入射エネルギーを固定して、ゲート電圧を下げると寄与するチャンネル数も増加する。1チャンネルあたりの伝導度への寄与の最大値は  $G_0 = 2e^2/h$  であるから、十分薄いポテンシャル障壁の場合を考えると、チャンネル数の増加に伴って、伝導度は段階的に増加する。これが伝導度の量子化である[6]。

### 3. 2 二重障壁ポテンシャル

次に、二重障壁ポテンシャル下での電子の散乱問題を考えよう。図6のような二重障壁ポテンシャルを考えれば図2の開放型量子ドットの  $x$  軸方向の運動を調べることができる。

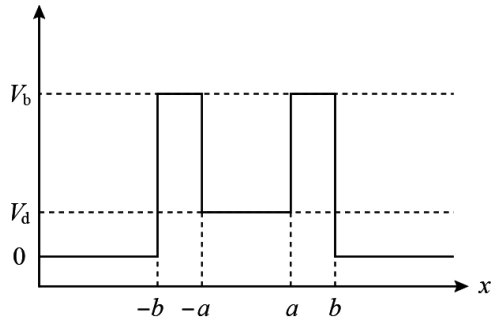


図6 二重障壁ポテンシャル。

ポテンシャル障壁が1つの場合と同様に、電子の定常状態を記述する波動関数  $\psi(x)$  に対するシュレディンガー

方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (12)$$

で与えられる。ここでポテンシャル  $V(x)$  は図 6 に従って

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| > b) \\ V_b & (a < |x| < b) \\ V_d & (|x| < a) \end{cases} \quad (13)$$

と設定する。波動関数  $\psi(x)$  は

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1 x} + r e^{-ik_1 x} & (x < -b) \\ A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} & (-b < x < -a) \\ A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} & (-a < x < a) \\ A_4 e^{ik_4 x} + B_4 e^{-ik_4 x} & (a < x < b) \\ t e^{ik_1 x} & (b < x) \end{cases} \quad (14)$$

の形をとる。ここで

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_b)}}{\hbar}, \quad k_3 = \frac{\sqrt{2m(E-V_d)}}{\hbar} \quad (15)$$

とする。8つの未知係数  $r, t, A_2, A_3, A_4, B_2, B_3, B_4$  は波動関数  $\psi(x)$  とその導関数  $\psi'(x)$  の連続性を要請することにより決定される。これらの係数の具体形は複雑なので数式処理ソフト (Mathematica) で扱うことにする。図 7 は  $\hbar=1, 2m=1, a=1.8, b=2.0, V_b=10$  の場合にゲート電圧  $V_d$  を変化させたときの透過確率  $T(E)$  である。入射エネルギー  $E < V_b$  では、ポテンシャル障壁が 1 つの場合と同様にトンネル効果が起こるが、さらに入射エネルギーの特殊値で透過確率のピークが現れるのが分かる。

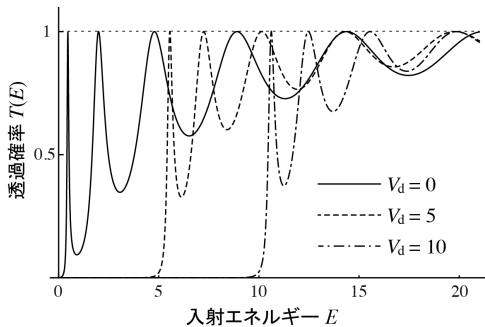


図 7 二重障壁ポテンシャルに対する散乱状態の透過確率。  $\hbar=1, 2m=1, a=1.8, b=2.0, V_b=10$  でゲート電圧が  $V_d=0, 5, 10$  の 3 つの場合。

透過確率のピークは以下のように説明される。二重障壁ポテンシャルが無限に高い場合 ( $V_b \rightarrow \infty$ ) には、電子は障壁間に閉じ込められ、いくつかの離散的なエネルギー

固有値  $E_0, E_1, E_2, \dots$  のみを取り得る束縛状態となる。

ポテンシャル  $V_b$  を下げていくと、エネルギー  $E > V_b$  では連続スペクトルをとる散乱状態が現れ、エネルギー  $E < V_b$  の束縛状態はトンネル効果により障壁の外へしみ出していく。同時に二重障壁の外にあった散乱状態も障壁内にしみ込んでくるが、その際、エネルギー固有値  $E_0, E_1, E_2, \dots$  に近いエネルギーを持つ散乱状態ほどしみ込み易い。結果として、透過確率  $T(E)$  は  $E_0, E_1, E_2, \dots$  付近でピークを持つ。ランダウアー公式により、これらの透過確率のピークは電気伝導度のピークを与える。このような電気伝導は共鳴伝導と呼ばれる。図 7 のように、ゲート電圧  $V_d$  を調整することでこの共鳴伝導の準位 (共鳴準位) を動かすことができる。

透過確率  $T(E)$  のエネルギー  $E=E_r$  でのピークは、透過係数  $t(E)$  の複素平面上での極  $E_r - i\Gamma_r$  に対応する (この極を共鳴極と呼ぶ)。実際、透過係数  $t(E)$  を共鳴極  $E=E_r - i\Gamma_r$  の近傍で

$$t(E) \cong \frac{c}{E - E_r + i\Gamma_r} \quad (16)$$

と展開すると、透過確率がブライト-ウィグナー型 (あるいはローレンツ型) のピークを与えることが分かる：

$$T(E) = |t(E)|^2 \cong \frac{|c|^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma_r^2}. \quad (17)$$

透過係数  $t(E)$  の虚部  $\text{Im}(t(E))$  は量子ドットの状態密度を意味する。量子ドットと導線に接続することで、状態密度  $\text{Im}(t(E))$  は共鳴準位  $E=E_r$  を中心に大きさ  $\Gamma_r$  程度の幅を持つため、 $\Gamma_r$  は準位幅と呼ばれる。

## 4. 様々な開放型量子ドットの電気伝導

### 4.1 模型の単純化

様々なタイプの開放型量子ドットを調べるために、前節で扱った模型を単純化する。前節のポテンシャル障壁による散乱状態の具体形を書き下すと非常に複雑な形になる。さらに相互作用を考慮すると、多電子散乱状態の具体形は数値的に扱うことさえ困難であろう。ポイントは共鳴伝導をいかに単純に再現するかにある。

そこで共鳴準位模型と呼ばれる最も単純な開放型量子ドットを導入する。まず、スピン自由度は無視することにする (従ってランダウアー公式の因子は  $G_0 = e^2/h$  となる)。図 8 のように、2本の導線を折り曲げて配置し、その間に量子ドットを置く。各導線の原点付近で量子ドットに最も接近するように  $x$  座標系をとる。

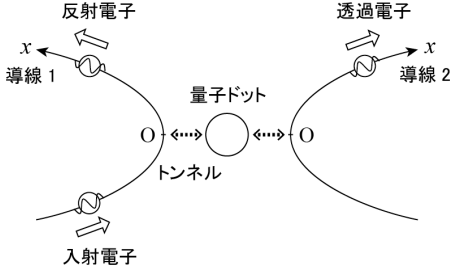


図 8 共鳴準位模型における量子ドットと導線 1, 2 の配置。導線の分散関係を線形化したため、電子は各導線上を正の向きのみに進む。

#### 量子ドットの単純化

量子ドットは十分小さく、ドット内に存在する共鳴準位の間隔は十分広いと仮定する。低温では共鳴準位のうち 1 つだけを考慮すれば十分である。ここで前節のようなゲート電圧ではなく、ドット内にできた共鳴準位  $\varepsilon_d$  そのものを系のパラメータとする。

#### 導線の単純化

各導線内で電子は自由電子として振舞うとし、導線内の 1 チャンネルのみを考慮する。このとき分散関係  $\varepsilon(k)$  は図 9 のように与えられる。散乱による各電子のエネルギー変化がフェルミエネルギー  $E_F$  より十分小さいとすれば、分散関係をフェルミエネルギー  $E_F$  付近で線形近似することができる：

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \hbar v_F (k - k_F) + E_F. \quad (18)$$

ここで  $v_F$  はフェルミ速度である。以下、 $\hbar v_F = 1$ ,  $k_F = 0$ ,  $E_F = 0$  ととることとする。この線形近似により、導線上を  $x$  軸の正の向きに移動する電子のみを考慮していることになる。

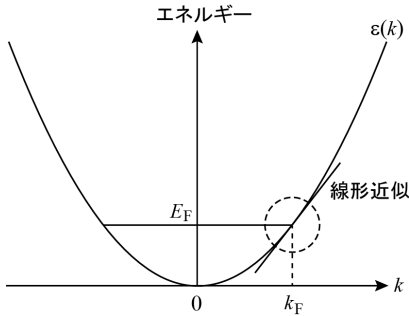


図 9 導線の分散関係をフェルミエネルギー付近で線形近似する。

#### 量子ドットと導線の接続

量子ドットと各導線の原点  $x = 0$  をポテンシャル障壁

を挟んで接続する。電子はポテンシャル障壁をトンネル効果で透過するとし、ドットと各導線の原点  $x = 0$  の間の飛び移りの行列要素を  $t$  とする。 $t$  は一般に複素数であり、電子の入射エネルギーに依存するが、ここでは実数の定数と仮定する。導線の線形分散により、電子は各導線上を  $x$  軸の正の向きにしか移動しないため、散乱状態を考える際には注意が必要である。導線 1 から電子が入射される場合を考えると、電子の入射波は導線 1 の  $x < 0$  の部分を正の向きに進み、原点  $x = 0$  にある量子ドットで散乱される。散乱後の電子は導線 1, 2 の  $x < 0$  の部分には戻らず、 $x > 0$  の部分へ進む。つまり、導線 1 の  $x > 0$  の部分に存在する電子波は反射波、導線 2 の  $x > 0$  の部分に存在する電子は透過波と解釈される。

#### 4.2 共鳴準位模型

単純化した共鳴準位模型に対して散乱状態を構成し、ランダウアー公式により電気伝導度を計算する[10-11]。第 2 量子化されたハミルトニアンを書くと

$$H = \sum_{\ell=1,2} \int dx c_{\ell}^{\dagger}(x) \frac{d}{dx} c_{\ell}(x) + \varepsilon_d d^{\dagger} d + t \sum_{\ell=1,2} (c_{\ell}^{\dagger}(0) d + d^{\dagger} c_{\ell}(0)) \quad (19)$$

となる。第 1 項が導線、第 2 項が量子ドット、第 3 項が導線と量子ドットの接続を表すハミルトニアンである。スピン自由度は考えないことにする。ここで  $c_{\ell}^{\dagger}(x)$ ,  $c_{\ell}(x)$  は導線の座標  $x$  に電子を生成、消滅させる演算子で、 $d^{\dagger}$ ,  $d$  は量子ドットに電子を生成、消滅させる演算子で反交換関係

$$\begin{aligned} \{c_{\ell}(x), c_m^{\dagger}(y)\} &= \delta_{\ell m} \delta(x - y), \\ \{c_{\ell}(x), c_m(y)\} &= \{c_{\ell}^{\dagger}(x), c_m^{\dagger}(y)\} = 0, \\ \{d, d^{\dagger}\} &= 1, \{d, d\} = \{d^{\dagger}, d^{\dagger}\} = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

を満たす。ここで  $\{A, B\} = AB + BA$  である。

この系に対して、散乱状態を構成し、電気伝導を調べよう。導線 1, 2 の電子を記述する固有関数を  $g_1(x)$ ,  $g_2(x)$ , 量子ドット内の電子の固有関数を  $e$  で表すと、固有状態は

$$|E\rangle = \left( \sum_{\ell=1,2} \int dx g_{\ell}(x) c_{\ell}^{\dagger}(x) + e d^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (21)$$

と書ける。ここで  $|0\rangle$  は真空状態である。固有関数を  $g_1(x)$ ,  $g_2(x)$ ,  $e$  を決めるためにはシュレディンガー方程式

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{i} \frac{d}{dx} - k \right) g_{\ell}(x) + t \delta(x) e &= 0, \quad (\ell = 1, 2) \\ (\varepsilon_d - k) e + t(g_1(0) + g_2(0)) &= 0 \end{aligned} \quad (22)$$

を解けばよい。ここで  $\delta(x)$  はディラックのデルタ関数である。導線の分散関係を線形化したために  $g_{\ell}(x)$  に対する 1 階微分の項が現れた。この分散関係の線形化のおか



げで、前節の式(9)に対応する未知変数と条件式の数が増半になり、容易に解くことができる。このテクニックは相互作用を考慮した場合にも有効である。

導線 1 から波数  $k$  を持つ自由電子平面波を入射、という散乱境界条件

$$g_1(x) = e^{ikx}, \quad g_2(x) = 0, \quad (x < 0) \quad (23)$$

の下でこのシュレディンガー方程式を解く。式(22)の第 1 式により、 $x \neq 0$  では

$$\left( \frac{1}{i} \frac{d}{dx} - k \right) g_i(x) = 0 \quad (24)$$

であるので、 $g_i(x)$  は波数  $k$  を持つ自由電子平面波 (の定数倍) であるが、デルタ関数項のため  $x=0$  で不連続性を持つ。実際、式(22)の第 1 式を  $x=0^-$  から  $x=0^+$  まで積分すると、不連続性の条件

$$g_i(0+) - g_i(0-) = -ite \quad (25)$$

を得る。不連続点での値  $g_i(0)$  はシュレディンガー方程式からは決まらないので、物理的要請から

$$g_i(0) = \frac{1}{2}(g_i(0+) + g_i(0-)) \quad (26)$$

で決めることにする。式(25)と式(26)を式(22)の第 2 式に適用し、散乱境界条件(23)を用いると

$$\begin{aligned} (\varepsilon_d - k) e &= -\frac{t}{2} \sum_i (g_i(0+) + g_i(0-)) \\ &= -\frac{t}{2} \sum_i (2g_i(0-) - ite) \\ \therefore (k - \varepsilon_d + it^2) e &= t \sum_i g_i(0-) = t \\ \therefore e &= \frac{t}{k - \varepsilon_d + it^2} \end{aligned} \quad (27)$$

となる。さらにこれを式(25)に適用して

$$\begin{aligned} g_1(0+) &= g_1(0-) - ite = \frac{k - \varepsilon_d}{k - \varepsilon_d + it^2}, \\ g_2(0+) &= g_2(0-) - ite = \frac{-it^2}{k - \varepsilon_d + it^2}. \end{aligned} \quad (28)$$

結果をまとめると、導線 1 から波数  $k$  を持つ自由電子平面波を入射した場合の散乱状態は

$$\begin{aligned} g_{1,k}(x) &= \left( \theta(-x) + \frac{k - \varepsilon_d}{k - \varepsilon_d + it^2} \theta(x) \right) e^{ikx}, \\ g_{2,k}(x) &= \frac{-it^2}{k - \varepsilon_d + it^2} \theta(x) e^{ikx}, \\ e_k &= \frac{t}{k - \varepsilon_d + it^2} \end{aligned} \quad (29)$$

と与えられる。ここで  $\theta(x)$  は

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 1/2 & (x = 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (30)$$

で与えられる階段関数である。導線 2 から自由電子平面波を入射する場合は添え字 1 と 2 を入れ替えればよい。

結果として、反射係数  $r(k)$ 、透過係数  $t(k)$  は、導線 1, 2 のいずれから入射する場合も

$$\begin{aligned} r(k) &= \frac{k - \varepsilon_d}{k - \varepsilon_d + it^2}, \\ t(k) &= \frac{-it^2}{k - \varepsilon_d + it^2} \end{aligned} \quad (31)$$

で与えられる。

ランダウアー公式により、電気伝導度は  $G(k)$  は

$$G(k) = \frac{1}{2\pi} |t(k)|^2 = \frac{1}{\pi} \frac{t^4}{(k - \varepsilon_d)^2 + t^4} \quad (32)$$

となり、前節で見たブライトローウィグナー型 (あるいはローレンツ型) の共鳴伝導を見事に再現する。ここで  $\hbar = 2\pi\hbar = 2\pi$  としている。この共鳴伝導は透過係数  $t(k)$  の下半平面の極  $k = \varepsilon_d - it^2$  に対応していることが直ちに分かる。このように散乱状態の具体形を見ることで、散乱状態の共鳴極と伝導度の共鳴ピークの対応が明白になる。

電流電圧特性は

$$I(V) = \frac{1}{\pi} \int dk \frac{t^4}{(k - \varepsilon_d)^2 + t^4} (f_{V/2}(k) - f_{-V/2}(k)) \quad (33)$$

と与えられる。特に絶対零度においては、フェルミ分布が階段関数  $f_\mu(E) = \theta(\mu - E)$  になるから、容易に積分が実行でき、

$$I(V) = t^2 \left( \arctan\left(\frac{V + 2\varepsilon_d}{2t^2}\right) + \arctan\left(\frac{V - 2\varepsilon_d}{2t^2}\right) \right) \quad (34)$$

が得られる。共鳴準位が  $\varepsilon_d = 0$  の場合の電流電圧特性を図 10 にプロットした。共鳴伝導ではこのような非線形の電流電圧特性が現れる。

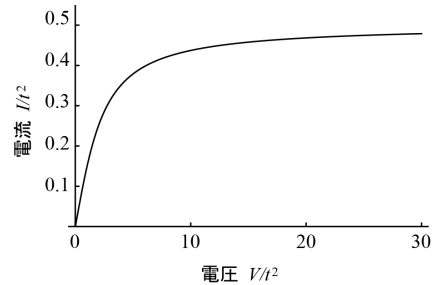


図 10 共鳴準位模型の電流電圧特性。共鳴準位を  $\varepsilon_d = 0$  とした場合。

#### 4.3 二重量子ドット模型

共鳴準位模型を拡張して、左右の導線間に 2 つの量子ドットが存在する場合を考える。量子ドットを 1 つから 2 つに増やただけであるが、図 11 に示されているように並列二重量子ドット[15][18]、直列二重量子ドット[17]、T 型二重量子ドット[19]など、様々な量子ドットの配置が可能であることが分かる。実際、これらの異な

る配置は、異なる電気伝導特性を与える。これら全ての配置を統一的に扱うために、一旦、図 11 の下半分にあるような一般的な二重量子ドットを考えることにする[21]。ここで量子ドット  $\alpha$  ( $\alpha=1, 2$ ) 内の共鳴準位を  $\epsilon_{d\alpha}$  とし、導線  $\ell$  ( $\ell=1, 2$ ) と量子ドット  $\alpha$  の間の飛び移りの行列要素を  $t_{\ell\alpha}$  と書いた。

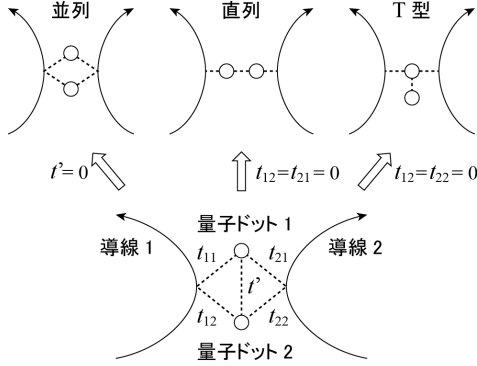


図 11 二重量子ドットの配置。飛び移りの行列要素  $t_{\ell\alpha}$  を特殊値にとることで様々な 2 重量子ドットが再現される：(i) 並列二重量子ドット： $t'=0$ ；(ii) 直列二重量子ドット： $t_{12}=t_{21}=0$ ；(iii) T 型二重量子ドット： $t_{12}=t_{22}=0$ 。

前節と同様に、散乱状態を

$$|E\rangle = \left( \sum_{\ell=1,2} \int dx g_{\ell}(x) c_{\ell}^{\dagger}(x) + \sum_{\alpha=1,2} e_{\alpha} d_{\alpha}^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (35)$$

と置く。ここで  $d_{\alpha}^{\dagger}$ ,  $d_{\alpha}$  は量子ドット  $\alpha$  に電子を生成、消滅させる演算子である。シュレディンガー方程式は

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{i} \frac{d}{dx} - k \right) g_{\ell}(x) + \delta(x) \sum_{\alpha} t_{\ell\alpha} e_{\alpha} &= 0, \quad (\ell=1, 2) \\ (\epsilon_{d\alpha} - k) e_{\alpha} + \sum_{\ell} t_{\ell\alpha} g_{\ell}(0) + t' e_{3-\alpha} &= 0, \quad (\alpha=1, 2) \end{aligned} \quad (36)$$

となる。これは共鳴準位模型の場合と同じ手法で解くことができる。結果として、導線 1 から波数  $k$  の自由電子平面波を入射した場合の散乱状態の反射係数  $r(k)$  と透過係数  $t(k)$  は

$$\begin{aligned} r(k) &= 1 - \frac{i \sum_{\alpha} ((k - \epsilon_{d\alpha} + i\Gamma_{\alpha\alpha}^-) t_{1\alpha} - (i\Gamma_{\alpha\alpha}^- - t') t_{1\alpha}^-) t_{1\alpha}}{(k - \epsilon_{d1} + i\Gamma_{11}^-)(k - \epsilon_{d2} + i\Gamma_{22}^-) - (i\Gamma_{12}^- - t')(i\Gamma_{21}^- - t')}, \\ t(k) &= - \frac{i \sum_{\alpha} ((k - \epsilon_{d\alpha} + i\Gamma_{\alpha\alpha}^-) t_{1\alpha} - (i\Gamma_{\alpha\alpha}^- - t') t_{1\alpha}^-) t_{2\alpha}}{(k - \epsilon_{d1} + i\Gamma_{11}^-)(k - \epsilon_{d2} + i\Gamma_{22}^-) - (i\Gamma_{12}^- - t')(i\Gamma_{21}^- - t')}, \\ \Gamma_{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} \sum_{\ell} t_{\ell\alpha} t_{\ell\beta}, \quad \bar{\alpha} = 3 - \alpha \end{aligned} \quad (37)$$

で与えられる。一見、複雑な形をしているが、二重障壁ポテンシャルの散乱状態の計算と比べるとはるかに易しい。図 11 で挙げた 3 つの二重量子ドットの場合の電気伝導度  $G(k)/G_0$  を図 12, 図 13, 図 14 にプロットした

(ここで導線の分散関係を線形近似し  $k_F=0$ ,  $E_F=0$  ととっていることに注意)。

#### (i) 並列二重量子ドット (図 12)

2 つの量子ドットの共鳴準位に対応する 2 つの共鳴ピークが現れる。左右の導線をつなぐ経路が 2 本あるため、共鳴準位の差が大きくても 2 つの共鳴ピークのピーク値は 1 に保たれる。一方、2 つ共鳴準位の中間のエネルギー (図 12 の  $k=0$  に対応) では、2 経路からの電子の波が打ち消し合い、伝導度が 0 となる。

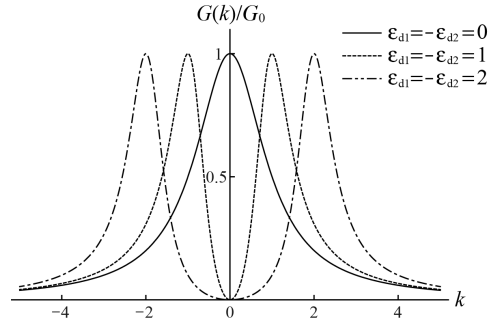


図 12 並列二重量子ドットの電気伝導度。  $t_{11}=t_{12}=t_{21}=t_{22}=1/\sqrt{2}$ ,  $t'=0$  と置いた。

#### (ii) 直列二重量子ドット (図 13)

2 つの共鳴ピークが現れる。左右の導線をつなぐ経路は一本しかないので、共鳴準位の差が大きくなるにつれてそれぞれの共鳴ピークのピーク値は減少する。

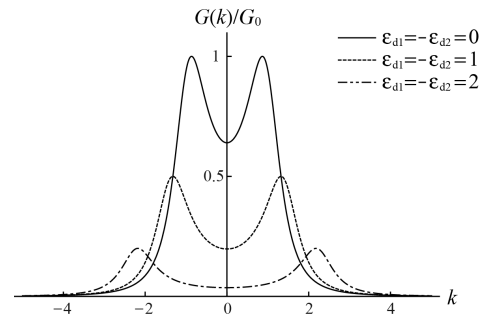


図 13 直列二重量子ドットの電気伝導度。  $t_{11}=t_{22}=t'=1$ ,  $t_{12}=t_{21}=0$  とおいた。

#### (iii) T 型二重量子ドット (図 14)

2 つの量子ドットの共鳴準位の差を大きくするに従って、ファノ型の非対称共鳴ピークが現れる。これは 2 経路 (量子ドット 2 を通過する経路と通過しない経路) の干渉効果である[22-23]。



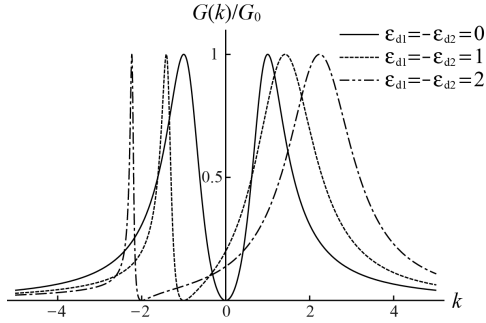


図 14 T 型二重量子ドットの電気伝導度.  $t_{11}=t_{21}=t'=1$ ,  $t_{12}=t_{22}=0$  とおいた.

#### 4.4 相互作用共鳴準位模型

量子ドット付近に電子間クーロン相互作用が存在する場合を考える. 共鳴準位模型において, 各導線の原点  $x=0$  と量子ドットに同時に電子が存在する場合にのみ, 大きさ  $U$  のクーロン反発を感じるとし, 式(19)のハミルトニアンに次の相互作用項を加える:

$$H_U = U \sum_{\ell=1,2} c_{\ell}^{\dagger}(0) c_{\ell}(0) d^{\dagger} d. \quad (38)$$

このような場合にも, 相互作用の効果を含んだ多電子散乱状態の厳密解を構成することができる [10–11] [24–25]. さらに, この多電子散乱状態を「ランダウアー公式の拡張」に適用することで, 電流電圧特性が調べられる. 相互作用パラメータ  $U$  の 1 次まで計算することで得られた電流電圧特性が図 15 である [10–11]. ここで, 相互作用を考慮した場合には, 線形近似された分散関係の低エネルギーカットオフに対して, 電流が発散してしまうため, 繰り込み群の手法による処理が必要になる. その際現れるエネルギースケールを特徴づけるパラメータを  $T_K$  と置いた. 図 15 より, 相互作用が大きくなるにつれて, 負性微分伝導度が現れていること, すなわち, 電圧を上げると逆に電流が減少してしまうことが分かる.

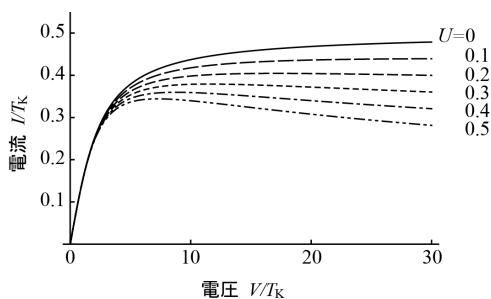


図 15 相互作用共鳴準位模型の電流電圧特性. 相互作用パラメータ  $U$  の 1 次まで計算したもの. ここで  $T_K$  は系のエネルギースケールを特徴付けるパラメータ.

ここで用いた「ランダウアー公式の拡張」は, オリジナルのランダウアー公式よりも強い仮定を必要とする. 左右から入射された多数の電子達は, 量子ドット付近の相互作用により多体状態を形成し, 反射あるいは透過して左右の電子溜に移動する. 実際, 厳密解の構成から, 電子達は相互作用により多体束縛状態を形成することが分かる. これらの電子達が, 左右の電子溜のフェルミ分布に従うように自由電子状態に緩和されてから再入されると仮定している. この「ランダウアー公式の拡張」が, 標準的に用いられている非平衡グリーン関数の方法と等価であるかどうかは自明ではないが, 図 15 で得られた電流電圧特性は非平衡グリーン関数を用いて得られた  $U$  の 1 次の結果 [26–27] と一致している.

#### 5. まとめに代えて

まとめに代えて, 本文で扱えなかったメソスコピック系の電気伝導理論の発展に関して, いくつか挙げておきたい.

##### フィッシャー—リー関係式

電子の透過確率はグリーン関数を用いて表現することができる [28]. この手法は, 複雑な格子構造を持つ試料 (例えばカーボンナノチューブ [29]) に導線が接続されている系に対して, 数値的に透過確率を計算する場合に, 特に威力を発揮する. ここで, 無限系のグリーン関数の計算は一般には困難であるが, 相互作用が無視できる場合は, 導線の効果を自己エネルギーとして (有限次元の) 有効ハミルトニアンに取り込む方法が知られている [2] [23].

##### ケルディシュ形式

ランダウアー公式のミクロな導出は, 量子ポイントコンタクトや開放型量子ドットのような系に対しては, ケルディシュ形式の非平衡グリーン関数を用いてなされている [30–36]. ここで得られた電流公式は相互作用がある場合にも適用され, 非平衡近藤効果の解析で威力を発揮している. ただし, 相互作用の存在する場合に, 無限系のグリーン関数の計算は非常に困難であり, 相互作用に関する摂動計算 [35–38], スレイブボソン平均場理論 [21] [39–42], あるいは量子モンテカルロ法 [43] 等が用いられている.

##### マスター方程式

インコヒーレント伝導をランダウアー公式で扱うためには, 透過確率をマスター方程式を用いて計算する方法が有効である [44]. ここで, 各状態間の遷移率はフェルミの黄金則によって計算する. アンダーソン模型におけるクーロン閉塞等はこの方法で説明される.

## 謝辞

本稿の研究成果の一部は羽田野直道准教授（東京大学生産技術研究所）、今村卓史助教（東京大学先端技術研究センター）、Gonzalo Ordonez 准教授（Butler University）との共同研究によるものです。本稿の研究成果の一部はJSPS 科研費若手研究(B)23740301 の助成を受けたものです。

## 参考文献

- [1] Y. Imry, Introduction to Mesoscopic Physics (Oxford Univ. Pr., 2002), 2nd ed.
- [2] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems (Cambridge University Press, 1995).
- [3] 川畑有郷, 新物理学シリーズ31「メゾスコピック系の物理学」(培風館, 1997).
- [4] 勝本信吾, 朝倉物性物理シリーズ2「メゾスコピック系」(朝倉書店, 2003).
- [5] R. A. Webb et al., Phys. Rev. Lett. **54**, 2696 (1985).
- [6] B. J. van Wees et al., Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988).
- [7] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
- [8] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [9] P. F. Bagwell and T. P. Orlando, Phys. Rev. B **40**, 1456 (1989).
- [10] A. Nishino, T. Imamura, and N. Hatano, Phys. Rev. Lett. **102**, 146803 (2009).
- [11] A. Nishino, T. Imamura, and N. Hatano, Phys. Rev. B **83**, 035306 (2011).
- [12] L. P. Kouwenhoven et al., Z. Phys. B Condens. Matter **85**, 367 (1991).
- [13] D. Goldhaber-Gordon et al., Nature (London) **391**, 156 (1998).
- [14] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, Science **281**, 540 (1998).
- [15] W. G. van der Wiel et al., Science **289**, 2105 (2000).
- [16] S. De Franceschi et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 156801 (2002).
- [17] H. Jeong, A. M. Chang, and M. R. Melloch, Science **293**, 2221 (2001).
- [18] K. Kobayashi et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 256806 (2002).
- [19] K. Kobayashi et al., Phys. Rev. B **70**, 035319 (2004).
- [20] Y. V. Nazarov and Y. M. Blanter, Quantum Transport (Cambridge University Press, 2009).
- [21] Y. Tanaka and N. Kawakami, Phys. Rev. B **72**, 085304 (2005).
- [22] U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- [23] K. Sasada, N. Hatano, and G. Ordonez, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 104707 (2011).
- [24] T. Imamura, A. Nishino, and N. Hatano, Phys. Rev. B **80**, 245323 (2009).
- [25] A. Nishino, T. Imamura, and N. Hatano, J. Phys.: Conf. Ser. **343**, 012087 (2012).
- [26] B. Doyon, Phys. Rev. Lett. **99**, 076806 (2007).
- [27] A. Golub, Phys. Rev. B **76**, 193307 (2007).
- [28] D. S. Fisher and P. A. Lee: Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [29] J. Nygard, D. H. Cobden, and P. E. Lindelof, Nature **408**, 342 (2000).
- [30] C. Caroli et al., J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, 916 (1971).
- [31] J. Rammer and H. Smith, Rev. Mod. Phys. **58**, 323 (1986).
- [32] H. Haug and A. P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, 2007), 2nd ed.
- [33] Y. Meir, N. S. Wingreen, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **66**, 3048 (1991).
- [34] Y. Meir and N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [35] S. Hershfield, J. H. Davies, and J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **67**, 3720 (1991).
- [36] S. Hershfield, J. H. Davies, and J. W. Wilkins, Phys. Rev. B **46**, 7046 (1992).
- [37] N. S. Wingreen and Y. Meir, Phys. Rev. B **49**, 11040 (1994).
- [38] T. Fujii and K. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 127 (2005).
- [39] T. Aono, M. Eto, and K. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1860 (1998).
- [40] B. Dong and X. L. Lei, J. Phys.: Condens. Matter **13**, 9245 (2001).
- [41] B. Dong and X. L. Lei, Phys. Rev. B **63**, 235306 (2001).
- [42] R. López, R. Aguado, and G. Platero, Phys. Rev. Lett. **89**, 136802 (2002).
- [43] P. Werner, T. Oka, and A. J. Millis, Phys. Rev. B **79**, 035320 (2009).
- [44] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991).