

論文内容の要旨

論文題目

Theory of Fano-Kondo effect in quantum dot systems

(量子ドット系におけるファノ・近藤効果の理論的研究)

氏名：丸山 勲

本論文において、有限温度密度行列繰り込み群 (FT-DMRG) の方法によりゼロバイアス下のコンダクタンスを調べ、T型量子ドットにおけるファノ・近藤効果を研究した。以下にその詳細を述べる。

近年、量子ドット系の輸送現象における近藤効果を実験的に観測することが可能となってきた。横型ドットでは、様々な幾何学的配置の量子ドットが作成されているが、その最も簡単な形状となっているのが埋め込まれた量子ドットである。そのコンダクタンスは高温側で、ゲート電圧の関数として周期的ピーク構造を持つ。これはゲート電圧を走査してドット内の粒子数がちょうど変化する状況になった時に電子がドットを通過していくためであり、クーロン振動ピークと呼ばれる。それ以外のゲート電圧ではドット内の粒子数がクーロンエネルギーにより変化しないためコンダクタンスはゼロになっている。しかし、ドット内の粒子数が奇数の場合には低温で近藤効果がおこり、コンダクタンスはユニタリティ極限の $2e^2/h$ という値を持つ。これは奇数個の電子が磁性不純物の役割をしているためである。この近藤効果によるユニタリティ極限は最近、実験的にも観測された。一方、T型量子ドットとはリードに横からドットを結合させた幾何学的配置を持つものである。この場合ドットを介さなくても電子が流れていくことが可能であり、一般的にはクーロン振動ピークは変更され、非対称なピーク構造を持つ。これはファノ・ピーク構造と呼ばれファノ非対称パラメーター q で特徴付けられる。この

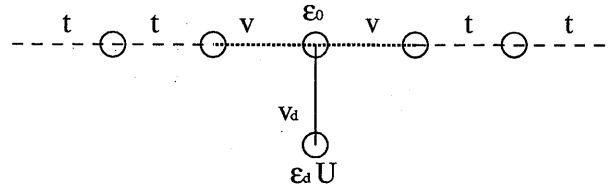


図 1: T 型量子ドットの理論的模型

ファノ効果は一般的な現象であり、実際、コンダクタンスのファノ・ピークも埋め込まれた量子ドットでも観測されており、さらにアハラノフ・ボームリングに結合した量子ドット系ではそのピーク構造がリングを貫く磁束により変化することも理論・実験の両面で観測されている。また、T 型量子ドットでの近藤効果としてはファノ構造の一部であるディップ構造 ($q = 0$) が見えている領域での近藤効果が観測されているが、一般的なファノ構造を持つ場合における近藤効果、ファノ・近藤効果はまだ観測されていない。

T 型量子ドットにおけるファノ・近藤効果を調べるために、最も簡単な理論的模型 (図 1) を用いて研究した。 d サイトが量子ドットを表しており、このサイトのみクーロンエネルギー U_d を持つ。この模型の特徴は、 ϵ_0 がドットの上のサイトに入っているために、ゲート電圧 ϵ_d を変化させるとコンダクタンスのピーク構造がファノ形状になることである。これはコンダクタンスの表式がドット部分の局所グリーン関数と、ファノ非対称パラメーター q で書かれる事から理解できる。コンダクタンスがドット部分のグリーン関数と、 q で書かれる事は T 型量子ドットの模型だけでなく、量子ドットの幅広い模型についても、正しい事が示せる。コンダクタンスの高温、低温での定性的振舞いは単純な解析から求められて、高温領域ではコンダクタンスは二つのファノ的なピーク構造で特徴付けられるが、低温領域になると近藤効果により一つのファノ構造の中にプラトーを持つようになる。これをファノ・近藤プラトーと呼ぶ。中間温度では近藤温度 T_K 以上の高温領域から、低温領域へのクロスオーバーになる。このようなファノ・近藤効果の理論研究の多くは絶対ゼロ度やクーロンエネルギーが大きい極限に限られており、特に T 型量子ドットに対応する模型では $q = 0$ の場合しか考慮されていない。この論文は有限のクーロンエネルギーと有限のファノパラメーター q の場合のコンダクタンスの温度依存性を FT-DMRG の方法を用いて数値的に議論するものである。

量子ドットなどの不純物系での FT-DMRG の計算は、左右のリードの部分に対する計算と、その結果を用いた不純物部分の最終的な計算という二段階のステップからなっている。様々な不純物に対しては、例えばゲート電圧を変化させた場合などは、不純物部分の量子転送行列の期待値をとるだけで良い。これが本手法の利点の一つである。さらに、コンダクタンスは FT-DMRG の方法を用いて以下のように計算される。まず FT-DMRG の方法を用いて、温度グリーン関数を計算することが出来る。この温度グリーン関数を数値的解析接続することで ω 空間のグリーン関数が求められる。解析接続の際には最大エントロピー法とパデ近似を併用している。これらには数値的解析接続特有の困難が表

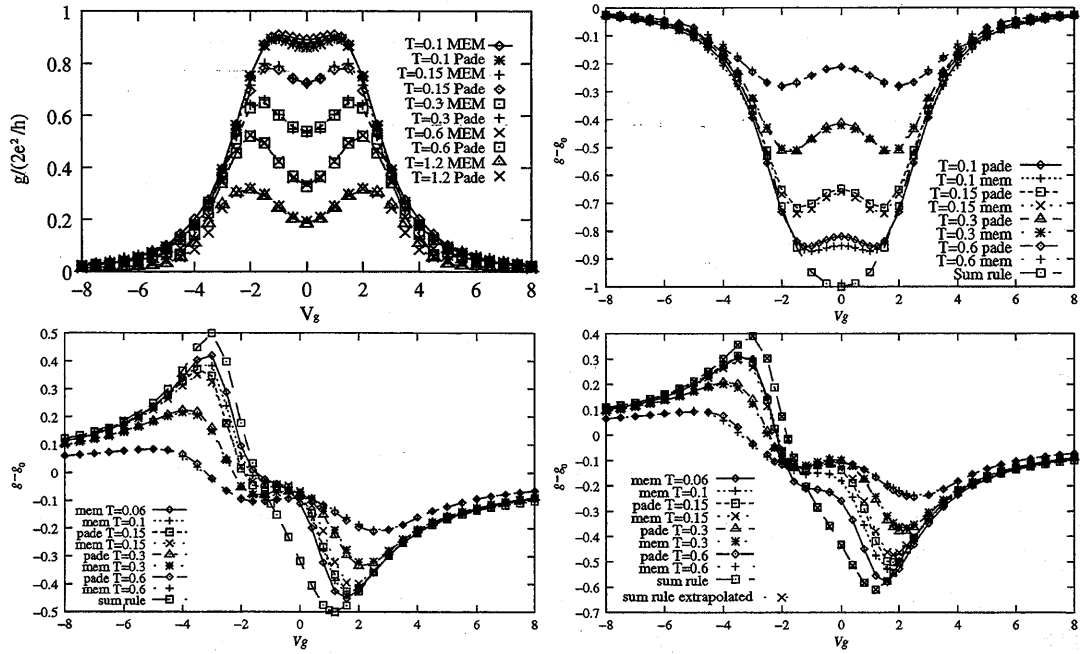


図 2: 横軸をゲート電圧としたコンダクタンスの温度依存性。それぞれ $q = \infty$ (左上)、 $q = 0$ (右上)、 $q = -1$ (左下)、 $q = -0.8$ (右下) に対応。

れるものの、状態密度の積分量として定義されるコンダクタンスに関しては数値的に安定な振舞いをするのが解る。このようにグリーン関数をドット部分について計算することで、コンダクタンスを求めることが出来る。本研究で用いた FT-DMRG は、数値繰り込み群 (NRG) とは異なり比較的高温部分に限られるため低温領域に到達するためにはパラメタをうまく選ぶ必要がある。このため、まず低温での帯磁率の逆数から見積もられる近藤温度を幅広いパラメタ領域に対して求めた。これは予想されていた概念的な相図を定量的に再現している。その後、適切なパラメタ領域を選ぶことで求めたコンダクタンスから量子ドットでの近藤効果による典型的な振舞いを見ることが出来る。つまり、高温側でのクーロン振動ピークと低温でのユニタリティ極限を本手法の到達可能な温度範囲で見ることが出来る。さらに、この振舞いはコンダクタンスとチャージ及びスピン帯磁率を比較することでより明確に観測することが出来る。

様々なファノ非対称パラメター q を持っている場合の、コンダクタンスにおけるファノ・近藤効果の温度依存性を図 2 に示す。近藤温度 T_K を大きくするために、クーロンエネルギーをドット-リードの結合 Δ_d に比べて小さくしたことから、 $q = -1$ 、 -0.8 におけるファノ・近藤プラトーは明瞭ではなくなっている。しかし、近藤効果を見るためにピークの重なりが大きい領域を調べるといのは実験でも同じ状況であると考えられる。また、図 2 を見てもわかるように、 $0 < q < \infty$ の場合には低温領域での振舞いは一見して複雑なものになる。図 2 とその他のデータを合わせて得た定性的な振舞いの主

要な点をまとめると以下のようなになる。

- 粒子数が 0、2 の領域のコンダクタンスが収束する温度は比較的高温 ($T \sim \Delta_d$) だが、粒子数が 1 の領域では特徴的温度は近藤温度となり、これは指数関数的に小さい。
- 低温にいくにつれて、コンダクタンスの極大点、極小点はそれぞれ近付いていく。 $q = -1, -0.8$ の場合には極大点、極小点はそれぞれ二つずつであり、極低温では内側二つは消えて、ファノ・近藤プラトーが形成される。
- ピークのシフトだけでなく、ファノ・ピーク形状の変化も一般の q の場合には $q = 0, \infty$ に比べて特徴的になる。

以下では特に 3 つ目の点、つまり多体効果によるファノ・ピーク形状の変化に注目する。コンダクタンスのピーク構造から多体効果を定量的に評価するために、ファノの関数形を用いてフィッティングを行なった。そこで得られたフィッティングパラメータの内、ファノ非対称パラメーター q_T は多体効果を強く反映するものであると言える。比較的高温で、つまり近藤温度が小さ過ぎてその温度領域に到達できない場合でも、フィッティングパラメータの温度依存性を見ることでファノ・近藤効果の前兆現象を捉え得ると考えられる。

また、補章においては、近藤効果と関連して、強相関電子系での局在モーメントの形成という問題を研究している。不純物アンダーソン模型の研究でアンダーソン自身が行ったハートリー・フォック近似による計算では絶対ゼロ度で磁性・非磁性の相転移が存在する。しかしその後の研究で、いわゆる近藤効果により低温に向かって局在モーメントは消滅することがわかっている。つまり、絶対ゼロ度で磁性状態は存在せず、シングレットの基底状態となっている。ここで対象とする問題は、バルクが金属ではなく、チャージギャップやスピンギャップがある系の場合にこの局在モーメントの形成条件はどのようになるかという問題である。その結果、金属中の磁性不純物が近藤効果により絶対ゼロ度で磁気モーメントが消失してしまう事とは異なり、一次元近藤絶縁体中ではチャージギャップやスピンギャップを反映して磁性状態と非磁性状態が絶対ゼロ度でも安定に存在するという結果が得られる。さらに一次元モット絶縁体中ではスピンがギャップレスであるものの、チャージギャップがあることから、粒子数の異なる相が存在する。さらに一次元近藤絶縁体でも一次元モット絶縁体でも同じように、得られた相境界は U が負の方向にずれるという興味深い結果を得た。