

論文内容の要旨

Spectrum Analysis of the Conductance of Open Quantum Dots

ト開放量子ドットにおける伝導現象の固有値解析

氏名 笹田 啓太

本研究の目的は、以下に述べる開放 N 準位ドットのコンダクタンスを固有値解析することである。第一に、我々はその系に対して非常に簡潔なコンダクタンス公式

$$G_{\alpha \rightarrow \beta}(E) = \frac{e}{\pi} J_{\alpha \rightarrow \beta}^{\max} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - \left(\frac{\rho_{\text{eigen}}(E)}{\rho_{\text{leads}}(E)} \right)^2} \right\} \quad (1)$$

を導出した。但し、 e は電気素量、 $J_{\alpha \rightarrow \beta}^{\max}$ は導線 α から β への最大電流であり、符号 \pm はドットの内部構造による。量子ドットと導線の接続サイト d_0 での離散固有状態の局所状態密度 $\rho_{\text{eigen}}(E)$ と導線の分岐点による局所状態密度 $\rho_{\text{leads}}(E)$ は、以下のように定義した：

$$\rho_{\text{eigen}}(E) \equiv \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{2N} \frac{\langle d_0 | \psi_n \rangle \langle \tilde{\psi}_n | d_0 \rangle}{E - E_n}, \quad (2)$$

$$\rho_{\text{leads}}(E) \equiv \frac{1}{\pi t^2 \sqrt{4t^2 - E^2}}. \quad (3)$$

但し $t^2 = \sum_{\alpha} (t_{\alpha}/t)^2$ で、 t は導線内のホッピングエネルギー、 t_{α} は導線 α とドットの間ホッピングエネルギーである。また、離散固有状態の固有値 E_n 、右固有関数 $|\psi_n\rangle$ と左固有関数 $\langle \tilde{\psi}_n|$ は、束縛状態、共鳴状態、反共鳴状態の総称である。共鳴状態の寄与をあらわに表現したのが公式 (1) の大きな特徴である。

第二に、上記のコンダクタンス公式 (1) から、コンダクタンスピークの対称性が共鳴状態と共鳴状態の干渉や、共鳴状態と束縛状態の干渉で生じることを示した。コンダクタンス公式 (1) には離散固有状態の局所状態密度の二乗を含んでいるため、離散固有状態同士の干渉項が存在する。これを使って、非対称なファノコンダクタンスピークが生じる原因を、従来までの現象論ではなく離散固有状態の局所状態密度から微視的に記述できた。

第三に、コンダクタンスピークの対称性を決定づけるファノパラメータは、共鳴状態間の干渉による非対称パラメータ q^{res} と共鳴状態と束縛状態の干渉による非対称パラメータ q に分解できることを議論した。この二つの非対称パラメータの間には、定性的な差異が存在することを明らかにした。

最後に、上記の議論は量子ドットでの議論であるが、フラールレンの任意のサイトに導線を接続した系でも非対称パラメータを微視的に議論できることを示した。以下にもう少し詳しく述べる。

我々は単一電子系の N 準位 Friedrichs 模型 (図 1)

$$H = H_d + \sum_{\alpha} (H_{\alpha} + H_{d,\alpha}) \quad (4)$$

を考えた。但し、量子ドットのハミルトニアン H_d 、導線 α のハミルトニアン H_{α} 、導線とドットのホッピングエネルギー $H_{d,\alpha}$ は、各々

$$\begin{cases} H_d & \equiv \sum_{i=0}^{N-1} \epsilon_i |d_i\rangle \langle d_i| - \sum_{0 \leq i < j \leq N-1} (v_{ij} |d_i\rangle \langle d_j| + \text{h.c.}), \\ H_{\alpha} & \equiv -t \sum_{x_{\alpha}=0}^{\infty} (|x_{\alpha} + 1\rangle \langle x_{\alpha}| + \text{h.c.}), \\ H_{d,\alpha} & \equiv -t_{\alpha} (|x_{\alpha} = 0\rangle \langle d_0| + \text{h.c.}). \end{cases} \quad (5)$$

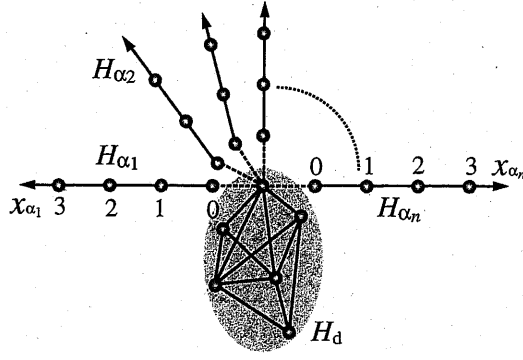


図 1: 多数の導線を接続した開放 N 準位量子ドット。

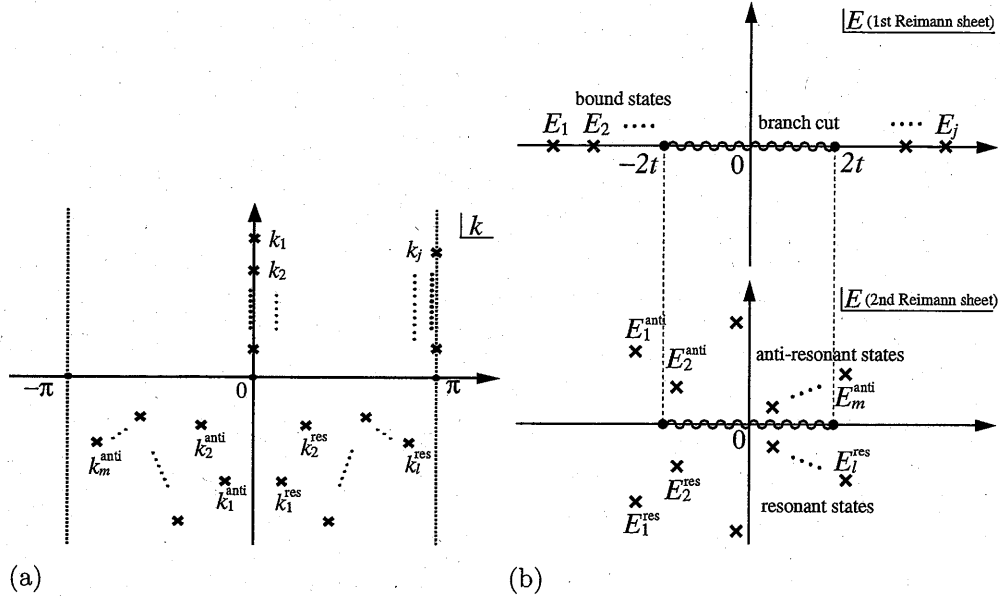


図 2: (a) 複素波数平面上での束縛状態の固有波数 k_j 、共鳴状態の固有波数 k_i^{res} と反共鳴状態の固有波数 k_m^{anti} の分布。(b) 複素エネルギー平面上での束縛状態の固有値 E_j 、共鳴状態の固有値 E_i^{res} と反共鳴状態の固有値 E_m^{anti} の分布。複素エネルギー平面は 2 枚のリーマン面から成り、 $-2t \leq E \leq 2t$ にある分岐線でつながっている。

である。全ての導線がドットの一箇所に接続していなければならないのは、以降の議論における技術的な理由による。

離散固有状態は、ハミルトニアン (4) に対して

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (6)$$

$$\langle\tilde{\psi}_n|H = E_n\langle\tilde{\psi}_n| \quad (7)$$

と定義される。離散固有値 E_n は、束縛状態の固有値 $E_j \in \mathbb{R}$ 、共鳴状態 $E_i^{\text{res}} \equiv E_{i,l}^{\text{res}} + iE_{i,l}^{\text{res}} \in \mathbb{C}$ と反共鳴状態 $E_m^{\text{anti}} = (E_m^{\text{res}})^*$ の集合である。また、導線の分散関係 $E_n = -2t \cos k_n$ より、固有波数 k_n も束縛状態の固有波数 k_j 、共鳴状態 $k_i^{\text{res}} \equiv k_{i,l}^{\text{res}} + ik_{i,l}^{\text{res}} \in \mathbb{C}$ と反共鳴状態 $k_m^{\text{anti}} = -(k_m^{\text{res}})^*$ に分けられる。離散固有値と離散固有関数を複素平面上に描くと図 2 のようになる。

離散固有値 E_n に対応する右固有関数 $|\psi_n\rangle$ は、導線を指数的に減衰する定在波である束縛状態の固有関数 $|\psi_j\rangle$ (図 3 (a))、遠方で発散する外向波である共鳴状態の固有関数 $|\psi_i^{\text{res}}\rangle$ (図 3 (b)) と遠方で発散する内向波である反共鳴状態の固有関数 $|\psi_m^{\text{anti}}\rangle$ (図 3 (c)) の集合である。また、左固有関数 $\langle\tilde{\psi}_n|$ も束縛状態の固有関数 $\langle\psi_j|$ 、共鳴状態の固有関数 $\langle\tilde{\psi}_i^{\text{res}}|$ として反共鳴状態の固有関数 $\langle\tilde{\psi}_m^{\text{anti}}|$ の集合である。以上の離散固有状態がコンダクタンス公式 (1) の中の局所状態密度 (2) に寄与する。

次に、コンダクタンス公式 (1) から、ファノコンダクタンスピークが生じる原因は、離散固有状態の干渉である

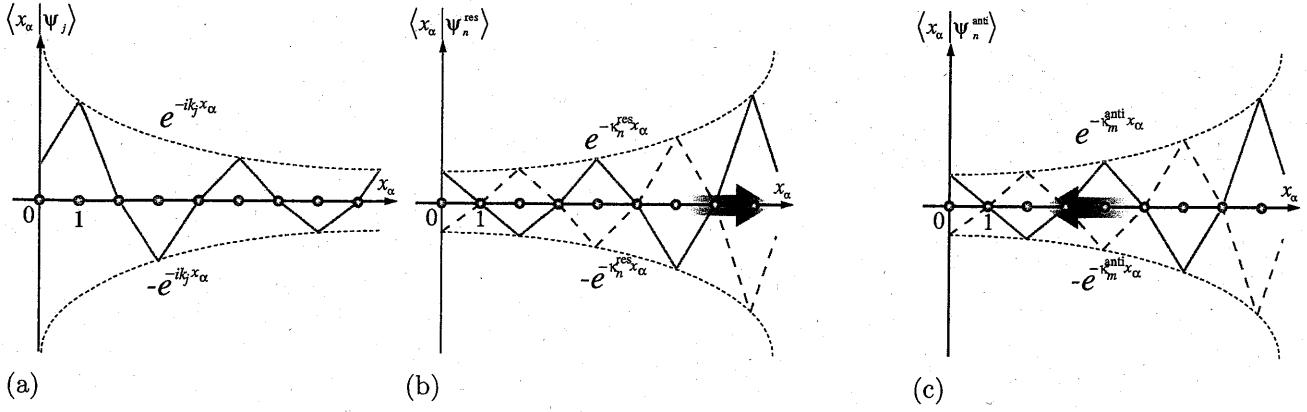


図 3: 導線 α における束縛状態の固有関数 (a)、共鳴状態の固有関数 (b)、反共鳴状態の固有関数 (c) の概念図。実線は各々固有関数の実部を示し、破線は固有関数の虚部を示している。

ことを示す。コンダクタンス公式 (1) は、離散固有状態の局所状態密度

$$\begin{aligned} \rho_{\text{eigen}}(E) &= \frac{1}{2\pi} \left(\sum_j \frac{\langle d_0 | \psi_j \rangle \langle \psi_j | d_0 \rangle}{E - E_j} + \sum_l \frac{\langle d_0 | \psi_l^{\text{res}} \rangle \langle \tilde{\psi}_l^{\text{res}} | d_0 \rangle}{E - E_l^{\text{res}}} + \sum_m \frac{\langle d_0 | \psi_m^{\text{anti}} \rangle \langle \tilde{\psi}_m^{\text{anti}} | d_0 \rangle}{E - E_m^{\text{anti}}} \right) \\ &= \sum_j \rho_j(E) + \sum_l \rho_l^{\text{res}}(E) + \sum_m \rho_m^{\text{anti}}(E) = \sum_j \rho_j(E) + \sum_l \rho_l^{\text{pair}}(E) \end{aligned} \quad (8)$$

の二乗の関数である。但し、共鳴状態 l と反共鳴状態 l の和による局所状態密度を共鳴状態対 l の局所状態密度 $\rho_l^{\text{pair}}(E)$ と定義し、一方、束縛状態 j の局所状態密度も $\rho_j(E)$ と定義した：

$$\rho_l^{\text{pair}}(E) \equiv |\tilde{N}_l| \frac{(E - E_{rl}^{\text{res}}) \cos \theta_l + E_{il}^{\text{res}} \sin \theta_l}{(E - E_{rl}^{\text{res}})^2 + E_{il}^{\text{res}^2}}, \quad (9)$$

$$\rho_j(E) \equiv \frac{\tilde{N}_j}{E - E_j}. \quad (10)$$

なお、各々の係数は $|\tilde{N}_l| e^{i\theta_l} \equiv \langle d_0 | \psi_l^{\text{res}} \rangle \langle \tilde{\psi}_l^{\text{res}} | d_0 \rangle / \pi$ 、 $\tilde{N}_j \equiv \langle d_0 | \psi_j \rangle \langle \psi_j | d_0 \rangle / \pi$ である。

コンダクタンス公式には、共鳴状態対 l と共鳴状態対 l' の干渉項や共鳴状態対 l と束縛状態 j の干渉項

$$\rho_l^{\text{pair}}(E) \times \rho_{l'}^{\text{pair}}(E) \quad (11)$$

$$\rho_l^{\text{pair}}(E) \times \rho_j(E) \quad (12)$$

が存在する。まず、共鳴状態 l のエネルギー $E \sim E_{rl}$ 近傍での共鳴状態対同士の干渉項 (11) は、規格化エネルギー $\varepsilon \equiv (E - E_{rl}) / E_{il}$ を用いて、以下のように近似できる：

$$\begin{aligned} \rho_l^{\text{pair}}(E) \times \rho_{l'}^{\text{pair}}(E) &\sim \frac{|\tilde{N}_l| / E_{il}^{\text{res}} (\cos \theta_l \varepsilon + \sin \theta_l)}{\varepsilon^2 + 1} \left(\rho_{l'}^{\text{pair}}(E_{rl}^{\text{res}}) + E_{il}^{\text{res}} \rho_{l'}^{\text{pair}'}(E_{rl}^{\text{res}}) \varepsilon \right) \\ &\sim \frac{p^{\text{res}} \varepsilon^2 + q^{\text{res}} \varepsilon + r^{\text{res}}}{\varepsilon^2 + 1}. \end{aligned} \quad (13)$$

ここで係数は、以下のように定義した：

$$p^{\text{res}} \equiv |\tilde{N}_l| \cos \theta_l \rho_{l'}^{\text{pair}'}(E_{rl}^{\text{res}}), \quad (14)$$

$$q^{\text{res}} \equiv |\tilde{N}_l| \left(\frac{\rho_{l'}^{\text{pair}}(E_{rl}^{\text{res}}) \cos \theta_l}{E_{il}^{\text{res}}} + \rho_{l'}^{\text{pair}'}(E_{rl}^{\text{res}}) \sin \theta_l \right), \quad (15)$$

$$r^{\text{res}} \equiv |\tilde{N}_l| \frac{\rho_{l'}^{\text{pair}}(E_{rl}^{\text{res}}) \sin \theta_l}{E_{il}^{\text{res}}}. \quad (16)$$

一方、共鳴状態対 l と束縛状態 j の干渉項 (12) も以下のように近似できる：

$$\begin{aligned} \rho_l^{\text{pair}}(E) \times \rho_j(E) &\sim \frac{|\tilde{N}_l| / E_{il}^{\text{res}} (\cos \theta_l \varepsilon + \sin \theta_l)}{\varepsilon^2 + 1} \left(\rho_j(E_{rl}^{\text{res}}) + E_{il}^{\text{res}} \rho_j'(E_{rl}^{\text{res}}) \varepsilon \right) \\ &\sim \frac{p \varepsilon^2 + q \varepsilon + r}{\varepsilon^2 + 1}. \end{aligned} \quad (17)$$

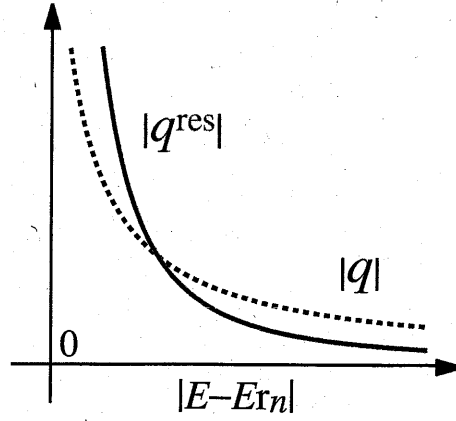


図 4: ファノ非対称パラメータ q と q^{res} の概念図。

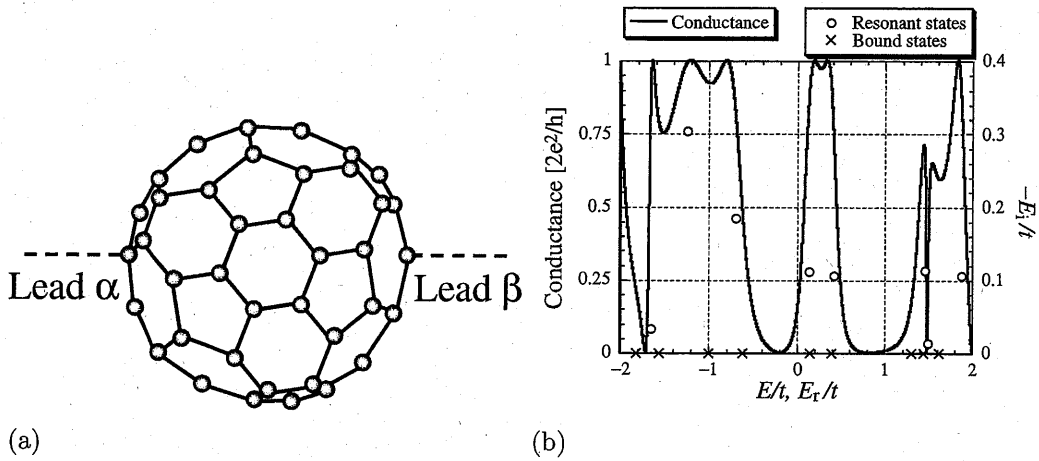


図 5: (a) 二本の導線を接続したフラーレン。(b) コンダクタンスのエネルギー依存性 (左の縦軸) とその共鳴状態 (右の縦軸)。白丸は共鳴状態を示し、 \times は束縛状態を表している。但し反共鳴状態は共鳴状態の複素共役なので省略した。

その係数は、

$$p \equiv |\tilde{N}_l| \cos \theta_l \rho'_j(E_{rl}^{\text{res}}), \quad (18)$$

$$q \equiv |\tilde{N}_l| \left(\frac{\rho_j(E_{rl}^{\text{res}}) \cos \theta_l}{E_{il}^{\text{res}}} + \rho'_j(E_{rl}^{\text{res}}) \sin \theta_l \right), \quad (19)$$

$$r \equiv |\tilde{N}_l| \frac{\rho_j(E_{rl}^{\text{res}}) \sin \theta_l}{E_{il}^{\text{res}}} \quad (20)$$

である。式 (13) 及び式 (17) にある ε の線型項の係数 q, q^{res} は、コンダクタンスピークの対称性を決定する。すなわち、これまで現象論的に定義されてきたファノ非対称パラメータである。

次に、ファノ非対称パラメータ q と q^{res} の間にある定性的な違いについて議論する (図 4)。非対称パラメータ q は、束縛状態による局所状態密度 $(E - E_j)^{-1}$ に依存している。一方、非対称パラメータ q^{res} は、共鳴状態対 l' の局所状態密度であるローレンツ分布 $[(E - E_{rl'}^{\text{res}})^2 + E_{il'}^{\text{res}2}]^{-1}$ に依存する。共鳴状態対 l' が共鳴状態対 l の近傍にいる時、共鳴状態対 l' の寄与は大きくなる、すなわちパラメータ q^{res} はパラメータ q より支配的になる。しかし共鳴状態対 l' が共鳴状態対 l から離れてしまうと、共鳴状態対 l' の寄与は $(E - E_{rl'}^{\text{res}})^{-2}$ で減衰する。すなわち、パラメータ q^{res} は、パラメータ q より速く減衰し、パラメータ q が支配的になる。以上のように、従来までは現象論的に議論されてきたファノパラメータを、離散固有状態の局所状態密度の観点から微視的に解析できた。フラーレンの任意のサイトに導線を接続した系でも、定性的にはあるが同様の議論ができ、非対称パラメータを微視的に議論できる (図 5)。