

論文内容の要旨

論文題目 Numerical studies of nonequilibrium transport
in strongly correlated electron systems
(強相関電子系における非平衡輸送現象の数値的研究)

氏名 桐野 俊輔

非平衡状態における電子相関効果は近年注目を集めているトピックである。非平衡現象の理論的記述には Keldysh Green 関数によるダイアグラム展開があるが、多体効果を適切に取り込んだ計算を行うことは一般には極めて難しい。一方で、近年の実験技術の進歩によって、非平衡下での電子相関効果が特異な性質を生む状況を作り出すことが可能になってきている。その代表的な例が量子ドット系であり、線型応答領域を超える大きなバイアス電圧を印加した状況における近藤効果について、理論・実験双方で活発な研究が続けられている。我々は以前、単一量子ドット系における非平衡輸送現象に対し、比較的新しい数値計算手法である時間依存密度行列繰り込み群法 (TdDMRG) を適用し、この手法によって高い精度で非平衡定常状態の性質を計算可能であることを示した。これをもとに本研究では、以下の三つの系における非線型電流・電圧特性を TdDMRG を用いて正確に求め、非平衡定常状態における多体効果の影響について議論する。

1 直列二重量子ドット系

直列二重量子ドット系は、各ドットが奇数個の電子を持つとき、近藤効果と2つのドット間の交換相互作用との競合が現れることが知られている。特に、両者の競合のクロスオーバー領域で線型コンダクタンスが $2e^2/h$ となることがスレーブボゾン平均場理論及び数値繰り込み群法によって明らかにされている。また共鳴幅と比べてドット間のホッ

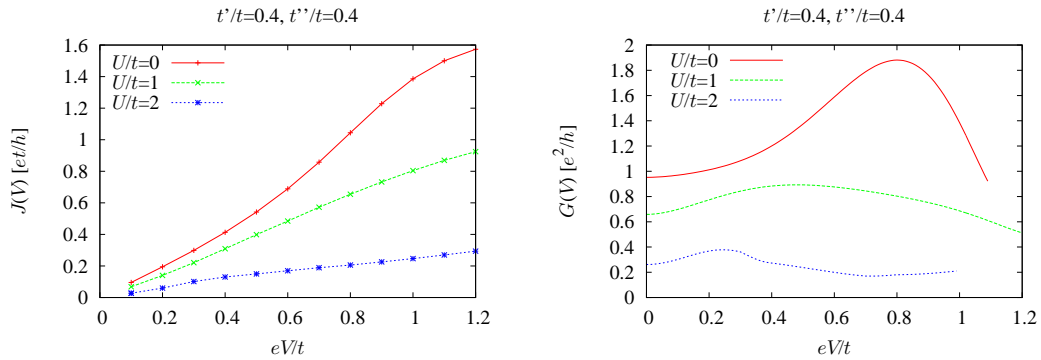


図 1: 直列二重量子ドット系の電流・電圧特性 (左) 及び微分コンダクタンス (右)。 t, t', t'' はそれぞれリード内の隣接する 2 サイト間、ドット・リード間およびドット・ドット間のホッピング、 U はドットにおけるオンサイト相互作用、 V はリード間の電位差を表す。

ピングが大きいとき、各ドット・リードの近藤一重項の間に結合・反結合状態が形成され、微分コンダクタンスにこれを反映したダブルピーク構造が現れることが noncrossing approximation (NCA) などによって指摘されている。我々は直列二重量子ドット系について TdDMRG 計算を実行し、このピーク分裂が TdDMRG から支持されることを示した。また、ピーク分裂の位置はオンサイト相互作用 U に強く依存しており、 U によって低バイアス側にシフトすることを見出した。この傾向は NCA による $U \rightarrow \infty$ の結果と定性的に一致している。一方で NCA によるとこのピークの高さは $2e^2/h$ を大きく超える場合があることが示されていたが、TdDMRG から微分コンダクタンスが $2e^2/h$ を超えるものは見られなかった。

共鳴幅に対してドット間のホッピングが小さいと、基底状態は弱く結合した二つの近藤一重項になる。この場合微分コンダクタンスにはピーク分裂は見られないが、一方でドット間のスピン相関関数がバイアス電圧によって強められることがわかった。

2 Mott 絶縁体の絶縁破壊

強い電子相関効果と非平衡性がともに本質的である現象として、電子相関によって絶縁体となっている状態の絶縁破壊がある。本研究では、一次元 Hubbard 模型の half-filling での基底状態によって記述される Mott 絶縁状態に局所的な電位差をかけることで絶縁破壊を起こし、到達する定常状態の電流を計算した。その結果、電圧が電荷ギャップを超えると絶縁破壊が起こるという直感的な結果を得た。一次元 Mott 絶縁体に一様電場がかかった状況では、Landau-Zener 理論に基づいて、閾値電場は電荷ギャップの二乗に比例することが岡らによって指摘されており、電位分布の設定によって様々な物理が現れうることをわかる。さらに、閾値以上の電圧をかけたとき、電流は電荷ギャップだけでスケールされることが明らかになった (図 2)。一次元鎖に交替ポテンシャルを加えたバンド絶縁体のモデルでも同様に単一のパラメータでスケールされることが示せるが、一次元

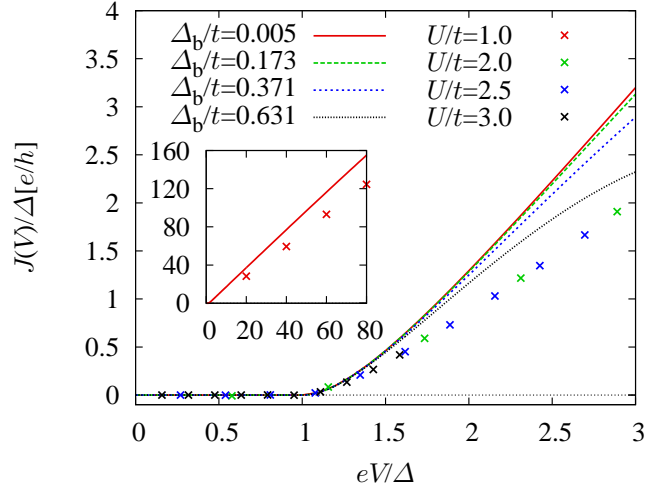


図 2: 一次元 Hubbard 模型及び一次元バンド絶縁体の電流・電圧特性。 U は Coulomb 斥力の強さ、 Δ_b はバンドギャップを表す。電荷ギャップまたはバンドギャップでスケールすると、低バイアス領域においては異なるパラメータの結果が同一の曲線に乗ることがわかる。

Hubbard 模型の $U = 0$ での特異性を反映して両者は異なる曲線を形成する。

また、一次元引力 Hubbard 模型の half-filling での基底状態は電荷ギャップを持たず、スピンギャップが有限になることが知られている。我々はこの Luther-Emery 液体についても TdDMRG 計算を行い、斥力の場合とは対照的にコンダクタンスは $|U|$ に依らず完全伝導 ($2e^2/h$) を示すことを明らかにした。このことは $\pm U$ のモデルを結びつけるス波変換と、朝永-Luttinger 液体の理論によって説明できる。

3 近藤絶縁体の絶縁破壊

近藤絶縁体は重い電子系の低温領域で現れる特異な絶縁状態である。ここでは一次元周期的 Anderson 模型の half-filling での基底状態に局所的な電位差をかけ、絶縁破壊のプロセスを TdDMRG でシミュレートして電流・電圧特性を計算した。絶縁破壊後の電流は、 $U = 0$ では 2 バンドのモデルとしての性質から大きい値を取るものの、有限の U によって強く抑えられることがわかった。この強い抑制は U を加えることによって電荷ギャップが 5% ほど増加することと比べて顕著であり、 f 電子の局在化、伝導電子と f 電子の局所的な singlet 形成及び電荷励起の群速度の減少による複合的な効果と考えることができる。また、前節で扱った Mott 絶縁体とバンド絶縁体の場合に低バイアス領域で見られた電流のスケールリングはそのままの形では成り立たないが、もうひとつパラメータ

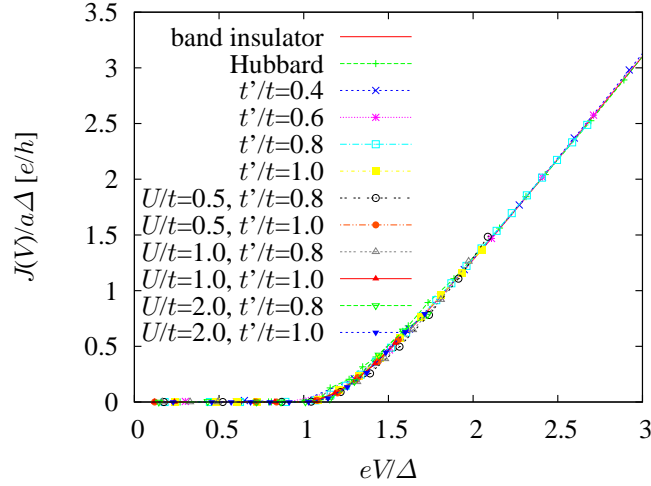


図 3: 前節で扱ったバンド絶縁体、Mott 絶縁体及び一次元周期的 Anderson 模型で記述される近藤絶縁体の電流・電圧特性。\$U\$ は Coulomb 相互作用、\$t'\$ は混成項の強さを表す。電圧を電荷ギャップで、電流を適切なパラメータでスケールすると、今回の範囲で得られたデータは同一の曲線に乗る。

を導入すれば

$$\frac{J_{\text{band}}(\Delta_b, V)}{\Delta_b} =: \tilde{J}\left(\frac{eV}{\Delta_b}\right) \quad (1)$$

$$\frac{J_{\text{Hubbard}}(U, V)}{\Delta_c(U)} = a_{\text{Hubbard}} \tilde{J}\left(\frac{eV}{\Delta_c(U)}\right) \quad (2)$$

$$\frac{J_{\text{PAM}}(t', U, V)}{\Delta_c(t', U)} = a_{\text{PAM}}(t', U) \tilde{J}\left(\frac{eV}{\Delta_c(t', U)}\right) \quad (3)$$

のように同一の電圧依存性を持つことが数値計算の範囲で示された (図 3)。この共通性は、今の場合の一次元近藤絶縁体が indirect なギャップを持っていること、可積分ではないことなど、一次元 Hubbard 模型の Mott 絶縁相と大きく異なっていることを考えると非常に興味深いものとなっている。

以上のように、非線型電流は強相関係の特徴を反映して多様な振る舞いを見せるが、我々の TdDMRG 計算は単純なポテンシャル分布という制限はあるものの、その仮定の下では各系の性質を捉えることに成功している。この点において、以上の研究を通じて我々は一次元強相関電子系における非平衡輸送を取り扱う新たな方法論を確立したと言える。