

# 局在準位による散乱問題

山影 相

2013年4月2日

## 1 量子ドット

電子間相互作用のない量子ドットの電気伝導を考えよう．ハミルトニアンは

$$H = H_L + H_R + H_d + V \quad (1)$$

$$H_\alpha = \sum_k \epsilon_k c_{\alpha k}^\dagger c_{\alpha k} \quad (2)$$

$$H_d = \epsilon_d d^\dagger d \quad (3)$$

$$V = d \sum_{\alpha k} t_\alpha c_{\alpha k}^\dagger + \text{h.c.} \quad (4)$$

と与えられる．スピン自由度は無視できる（最後の答えを二倍すればよい）．ここで  $H_\alpha$  ( $\alpha = L, R$ ) はそれぞれ左側，右側のリード線内の電子を記述するハミルトニアン， $H_d$  はドット内の局在電子のハミルトニアン， $V$  はリード線の電子とドット内の電子との混成を表す．混成パラメーター  $t_\alpha$  においては運動量依存性は無視しているが，これはリード線の電子と局在電子が接触型の混成をし，空間的な拡がりは無視していることに対応する．ただし，左側のリードと右側のリードとの混成の強さは一般に異なる ( $t_L \neq t_R$ ) ことに注意．

さて，左側からバイアス電圧  $V$  が印可されている状況を考える．電流  $I(V)$  は単位時間当りの左から右のリードへの遷移確率だから，

$$I(V) = -e \sum_{kk'} [f(\epsilon_k - eV) - f(\epsilon_k)] \frac{2\pi}{\hbar} |T_{k,k'}(\epsilon_k)|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) \quad (5)$$

となる． $e > 0$  は電荷素量， $f(\omega)$  はリード線の電子の分布関数，それ以外の部分は単位時

間あたりの左側から右側への電子の遷移確率でありフェルミの黄金則（の一般化）から

$$T_{k,k'}(\omega) = \langle L, k | \hat{T}(\omega) | R, k' \rangle \quad (6)$$

$$\hat{T}(\omega) = V + VG_d(\omega)V \quad (7)$$

$$G_d(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_d + i\Gamma} \quad (8)$$

である． $\hat{T}(\omega)$  は T 行列（付録参照）である．幅  $\Gamma$  は  $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R$ ,  $\Gamma_\alpha = \pi\rho_0|t_\alpha|^2$  で定義される． $\rho_0$  はフェルミ準位における状態密度．

以上をまとめると，量子ドットの伝導度はスピンあたり，

$$G = \frac{\partial I}{\partial V} = \frac{e^2}{h} \int d\omega \left[ -\frac{\partial f(\omega - eV)}{\partial \omega} \right] \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(\omega - \epsilon_d)^2 + \Gamma^2} \quad (9)$$

となる．絶対零度を考えると

$$G \rightarrow \frac{e^2}{h} \frac{4\Gamma_L\Gamma_R}{(eV - \epsilon_d)^2 + \Gamma^2} \quad (10)$$

であり， $eV = \epsilon_d$  で共鳴トンネルが起きる．特に，左右のリードとの結合が等しいとき ( $\Gamma_L = \Gamma_R$ ) には  $G \rightarrow e^2/h$  という普遍定数を与える．

## 2 通常金属 / トポロジカル超伝導体接合

前節での取り扱いを超伝導の場合に適用することができる．通常金属 / トポロジカル超伝導体 (N/TSC) 接合を考えよう．バイアス電圧が超伝導ギャップより小さい場合には超伝導の自由度として表面状態のモードだけ考え，これが金属内の電子と混成すると仮定してもよい．電子正孔対称性をもつ系のハミルトニアンは

$$H(\mathbf{k}_\parallel) = H_N(\mathbf{k}_\parallel) + H_S(\mathbf{k}_\parallel) + H_{NS}(\mathbf{k}_\parallel) \quad (11)$$

$$H_N(\mathbf{k}_\parallel) = \sum_{k_\perp} \xi_{k_\perp}(\mathbf{k}_\parallel) c_{k_\perp}^\dagger(\mathbf{k}_\parallel) c_{k_\perp}(\mathbf{k}_\parallel) \quad (12)$$

$$H_S(\mathbf{k}_\parallel) = \epsilon_0(\mathbf{k}_\parallel) \gamma^\dagger(\mathbf{k}_\parallel) \gamma(\mathbf{k}_\parallel) \quad (13)$$

$$H_{NS}(\mathbf{k}_\parallel) = \sum_{k_\perp} \left[ t(\mathbf{k}_\parallel) c_{k_\perp}^\dagger(\mathbf{k}_\parallel) \gamma(\mathbf{k}_\parallel) - t^*(-\mathbf{k}_\parallel) c_{-k_\perp}(-\mathbf{k}_\parallel) \gamma(\mathbf{k}_\parallel) \right] \quad (14)$$

ここで  $k_\parallel$  は運動量の界面と平行な成分．また，超伝導の表面状態は 1 モードだけとし，そのエネルギーを  $\epsilon_0(\mathbf{k}_\parallel)$  とする．電子正孔対称性から  $\gamma^\dagger(\mathbf{k}) = \gamma(-\mathbf{k})$  が成り立つことに注意する．

金属内の電子はアンドレ - エフ反射されることで正孔へと変化する．このとき，電荷が  $2e$  だけ増加し，これが接合系を流れる電流になる．すなわち，アンドレーエフ反射確率を用いて，角度分解した電流が

$$I(V, \mathbf{k}_{\parallel}) = -2e \sum_{k_{\perp}, k'_{\perp}} \left[ f(\xi_{k_{\perp}}(\mathbf{k}_{\parallel}) - eV) - f(\xi_{k'_{\perp}}(\mathbf{k}_{\parallel})) \right] \times \frac{2\pi}{\hbar} |T_{k_{\perp}, e; k'_{\perp}, h}|^2 \delta(\xi_{k_{\perp}}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \xi_{k'_{\perp}}(\mathbf{k}_{\parallel})) \quad (15)$$

と与えられる． $T$  行列は付録を参照して

$$T_{k_{\perp}, e; k'_{\perp}, h} = -\frac{t(\mathbf{k}_{\parallel})t(-\mathbf{k}_{\parallel})}{\omega - \epsilon_0 + i[\Gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) + \Gamma(-\mathbf{k}_{\parallel})]} \quad (16)$$

である．幅  $\Gamma(\mathbf{k}_{\parallel})$  は  $\Gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) = \pi\rho_0|t(\mathbf{k}_{\parallel})|^2$ ． $\omega$  は小さいとし，状態密度のエネルギー依存性は無視している，すなわち， $\rho(\omega) \approx \rho(-\omega) \equiv \rho_0$ ．よって，角度分解したコンダクタンスは

$$G(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[ -\frac{\partial f(\omega - eV)}{\partial \omega} \right] \frac{4\Gamma(\mathbf{k}_{\parallel})\Gamma(-\mathbf{k}_{\parallel})}{[\omega - \epsilon_0(\mathbf{k}_{\parallel})]^2 + [\Gamma(\mathbf{k}_{\parallel}) + \Gamma(-\mathbf{k}_{\parallel})]^2} \quad (17)$$

である．

ここで得られた表式は一般的なものであるが，以下で，幾つか特別な場合を見ていく．まず， $k_{\parallel} = 0$  では絶対零度，零電圧で  $G(0) \rightarrow 2e^2/h$  である．これは，零エネルギー状態 ( $\epsilon(0) = 0$ ) は電子正孔対称性から，その波動関数における電子と正孔の重みが等しく，これらの伝導電子との混成強度も互いに等しくなるからである．局在準位に入るときと出るときの混成強度が同じであれば伝導度が  $e^2/h$  になるのは前節の量子ドットの場合にも同様であった．一方，カイラル  $p$  波超伝導の場合には，付録 A.1 から，端状態の波動関数はその電子と正孔の重みが任意のエネルギーに対して等しい．すなわち，任意の  $k_{\parallel}$  に対して  $G(k_{\parallel}) = e^2/h$  を得る．ヘリカル  $p$  波超伝導も同様である．ヘリカル  $p$  波超伝導体は二つの端状態をもつが，これらも電子と正孔の重みが任意のエネルギーにおいて等しい (付録 A.2 参照)．したがって， $G(k_{\parallel}) = 4e^2/h$  である．端状態が二つあるので因子 2 が乗じられている．

上で述べたような，「任意のエネルギーにおいて電子と正孔の重みが等しい」という対称性は普遍的なものではないことに注意．

## 付録 A グリーン関数の摂動展開

ここに摂動展開の一般論をまとめておく．ただし，電子間相互作用は考えない．まず，グリーン関数  $G(z)$  をリゾルベントとして次のように定義する．

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (18)$$

ここで  $H$  は系のハミルトニアンである．系は二つの自由度からなるとする．例えば伝導電子と局在電子があり，それらが混成するといったもの（アンダーソン模型）である．この系のハミルトニアンを

$$H = H_c + H_f + H_{\text{hyb}} \quad (19)$$

$$H_c = \sum_{ij} c_i^\dagger \epsilon_{ij} c_j \quad (20)$$

$$H_f = \sum_{ij} f_i^\dagger X_{ij} f_j \quad (21)$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{ij} c_i^\dagger V_{ij} f_j \quad (22)$$

と書く．

$H_{\text{hyb}} = 0$  のときのグリーン関数を  $g(z)$  とすると

$$G = g + gH_{\text{hyb}}g + gH_{\text{hyb}}gH_{\text{hyb}}g + \cdots = g + gH_{\text{hyb}}G \quad (23)$$

と展開できる．T 行列を

$$T = H_{\text{hyb}} + H_{\text{hyb}}gH_{\text{hyb}} + \cdots = H_{\text{hyb}} + H_{\text{hyb}}GH_{\text{hyb}} \quad (24)$$

と導入すると  $G = g + gTg$  と表すこともできる．

グリーン関数の  $c$  に関する成分は

$$G_{ij}^{cc} = g_{ij}^{cc} + g_{ik}^{cc} T_{kl}^{cc} g_{lj}^{cc} \quad (25)$$

である． $g$  は  $H_{\text{hyb}} = 0$  なので， $cf$  成分は持たないことに注意． $H_{\text{hyb}}$  は  $cf$  成分しか持たないので T 行列の  $cc$  成分は

$$T^{cc} = VG^{ff}V^\dagger \quad (26)$$

となる．なお， $V$  の  $ij$  成分が  $V_{ij}$  である． $G^{ff}$  は以下の関係式から求められる．

$$G^{ff} = g^{ff} + g^{ff}V^\dagger G^{cf} \quad (27)$$

$$G^{cf} = g^{cc}VG^{ff} \quad (28)$$

すなわち，

$$G^{ff} = g^{ff} + g^{ff}V^\dagger g^{cc}VG^{ff} = \frac{1}{(g^{ff})^{-1} - V^\dagger g^{cc}V} \quad (29)$$

である．

$f$  電子の自己エネルギー  $\Sigma = V^\dagger g^{cc}V$  は模型に依存して決まるが，簡単な場合として

$$H_c = \sum_{\mathbf{k}s} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \quad (30)$$

$$H_f = \sum_{ij} f_i^\dagger X_{ij} f_j \quad (31)$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{\mathbf{k}si} c_{\mathbf{k}s}^\dagger V_{si} f_i \quad (32)$$

を考えよう． $s = \uparrow, \downarrow$  はスピンを表す．すると

$$\Sigma_{ij}(\omega + i0) = \sum_{\mathbf{k}s} \frac{V_{si}^* V_{sj}}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + i0} = \sum_s \text{P} \int d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{V_{si}^* V_{sj}}{\omega - \epsilon} - i\pi \rho(\omega) V_{si}^* V_{sj} \quad (33)$$

となる． $\rho(\omega)$  はスピンあたりの状態密度．フェルミ準位近傍の現象を考えると，状態密度のエネルギー依存性を無視して良い．さらに，簡単のため，バンド幅が無限大とみなすと上式右辺の第一項は零になる．まとめると

$$\Sigma = -i\Gamma, \quad \Gamma = \pi \rho_0 V^\dagger V \quad (34)$$

である． $\rho_0$  はフェルミ準位における状態密度． $T$  行列は

$$T(\omega + i0) = V \frac{1}{\omega - X + i\pi \rho_0 V^\dagger V} V^\dagger \quad (35)$$

と与えられる．

## 付録 A アンドレ - エフ束縛状態

ここではトポロジカル超伝導の表面状態であるアンドレ - エフ束縛状態のエネルギー分散関係と波動関数の対称性について説明する．これらを導出する際には Mao らの方法を用いた．

## A.1 カイラル $p$ 波超伝導

例としてカイラル  $p$  波超伝導体を考えよう．ハミルトニアンは

$$H(k_y) = \xi(k_y)\tau_z + \Delta(-i\partial_x\tau_x + sk_y\tau_y) \quad (36)$$

$$\xi(k_y) = B[(-i\partial_x)^2 + k_y^2] - \mu \quad (37)$$

とし，系は  $x > 0$  の半無限に広がっているとす．  $s = \pm 1$  はカイラリティを表す．また，電子正孔対称性  $\tau_x H^*(-k_y)\tau_x = -H(k_y)$  あるいは（一般化された）カイラル対称性  $\tau_y H(-k_y)\tau_y = -H(k_y)$  から  $k_y = 0$  でエネルギー  $E$  は零である．その基本解  $\psi(k_y)e^{iqx}$  は

$$[\xi(0)\tau_z + \Delta q\tau_x]\psi(0) = 0 \quad (38)$$

という方程式の解である．両辺に  $\tau_z$  をかけると

$$[\xi(0) + \Delta qi\tau_y]\psi(0) = 0 \quad (39)$$

であり， $\psi(0)$  は  $\tau_y$  の固有ベクトルでなければならない．その固有値を  $\tau$  とすれば上の方程式が非自明な解をもつための条件式として

$$\xi(0) + \Delta qi\tau = 0 \quad (40)$$

を得る． $\xi(0) = Bq^2 - \mu$  を思い起こすと，解  $q = q_{\pm}$  が

$$q_{\pm} = -i\tau \frac{\Delta}{2B} \pm \sqrt{-\frac{\Delta^2}{4B^2} + \frac{\mu}{B}} \quad (41)$$

となる．束縛状態であるためには  $\text{Im } q_{\pm} > 0$  であるから  $\tau = -\text{sgn}(B\Delta)$ ， $\mu/B > 0$  が要請される．この  $q_{\pm}$  を用いて，零エネルギー（零運動量）のアンドレ・エフ束縛状態の波動関数  $\Psi(x, k_y = 0)$  が

$$\Psi(0) = \frac{1}{N}(e^{iq_+x} - e^{iq_-x})|\tau\rangle \quad (42)$$

と求められる．境界条件は  $\Psi(0, k_y) = 0$  である．ここで  $|\tau\rangle$  は  $\tau_y|\tau\rangle = \tau|\tau\rangle$ ， $\tau = -\text{sgn}(B\Delta)$  を満たす．規格化定数  $N$  は  $\int_0^{\infty} dx |\Psi(0)|^2 = 1$  を満たすように決める．すなわち，

$$N = \sqrt{\frac{1}{2 \text{Im } q_+} + \frac{1}{2 \text{Im } q_-} + 2 \text{Im} \frac{1}{q_+ - q_-^*}} \quad (43)$$

となる．

次に  $k_y \neq 0$  を考える．BdG 方程式は

$$[\xi(k_y)\tau_z + \Delta(q(k_y)\tau_x + sk_y\tau_y)]\psi(k_y) = E\psi(k_y) \quad (44)$$

に変わるが，再び， $\tau_y$  の固有状態を考えて良い．ハミルトニアンを  $\tau_y$  に関して対称・反対称部分に分ける ( $H = H_+ + H_-$ ,  $\tau_y H_{\pm} \tau_y = \pm H$ ) と

$$H_+(k_y) = s\Delta k_y \tau_y \quad (45)$$

$$H_-(k_y) = \xi(k_y)\tau_z + \Delta q(k_y)\tau_x \quad (46)$$

を用いて，

$$[H_+(1 \pm \tau_y) + H_-(1 \mp \tau_y)]\Psi = E(1 \pm \tau_y)\Psi \quad (47)$$

という方程式を BdG 方程式から得ることができる． $\Psi$  を  $\tau_y$  の固有ベクトルに選ぶと，上式は

$$H_+\Psi = E\Psi, H_-\Psi = 0 \quad (48)$$

と簡略化される．複素数の  $q$  に対して  $H_-$  はエルミートではないが，エネルギーは  $H_+$  のみから決まるので，実のままであることが分かる．実際， $H_+$  の具体系から， $E(k_y) = s\tau\Delta k_y$  である．エネルギーが境界条件によらずに導出されていることに注意してほしい．トポロジカルな端状態はバルクの構造のみによって決まるのである． $\tau$  は  $H_-\Psi = 0$  から決まる．この方程式に  $\tau_z$  を乗じると

$$\xi(k_y) + i\Delta q(k_y)\tau = 0 \quad (49)$$

であり， $q(k_y) = q_{\pm}(k_y)$  は次のように与えられる．

$$q(k_y) = -i\tau \frac{\Delta}{2B} \pm \sqrt{-k_y^2 - \frac{\Delta^2}{4B^2} + \frac{\mu}{B}} \quad (50)$$

$\text{Im } q_{\pm}(k_y) > 0$  という条件から  $\tau = -\text{sgn}(B\Delta)$  である．また， $0 < k_y^2 < \mu/B$  も要請される．

以上から，カイラル  $p$  波超伝導体のアンドレ - エフ束縛状態のエネルギー分散関係が  $E = -s \text{sgn}(B)|\Delta|k_y$  であり，その存在範囲は  $k_y^2 < \mu/B$  であること，また，波動関数は  $\tau_y$  の固有状態であること，すなわち，電子と正孔の重みが等しいことも分かった．

## A.2 ヘリカル $p$ 波超伝導

ヘリカル  $p$  波超伝導を考える．これは以下のハミルトニアンで記述される．

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_0(\mathbf{k}) & \Delta(k_x s_y - k_y s_x) i s_y \\ -\Delta(k_x s_y - k_y s_x) i s_y & -H_0^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (51)$$

$$H_0(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) + \lambda(k_x s_y - k_y s_x) \quad (52)$$

$$\xi(\mathbf{k}) = Bk^2 - \mu \quad (53)$$

もし  $\lambda = 0$  なら  $s_z$  が良い量子数となって2つのカイラル  $p$  波超伝導体に分解でき，前節の議論がそのまま適用される．すなわち， $\lambda = 0$  に対しては

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) & \Delta(k_x - i s k_y) \\ \Delta(k_x + i s k_y) & -\xi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \xi(\mathbf{k}) \tau_z + \Delta(k_x \tau_x + s k_y \tau_y) \quad (54)$$

と表せる． $s = \pm 1$  はスピンの  $z$  成分を表す．また，途中で  $\Delta \rightarrow -i\Delta$  と置き換えている．これはまさに，カイラリティが  $s = \pm 1$  のカイラル  $p$  波超伝導体である<sup>\*1</sup>．すなわち，スピン  $s$  の端状態のエネルギーは  $E_s(k_y) = -s \operatorname{sgn}(B) |\Delta| k_y$  であり，その波動関数  $\Psi_s(k_y)$  は (42) 式で与えられる．

次に， $\lambda \neq 0$  の場合を議論する．ハミルトニアンを  $\tau_i$  を用いて表すと

$$H(\mathbf{k}) = \xi(k_y) \tau_z + \lambda(-i \partial_x s_y \tau_z - k_y s_x) + \Delta(-i \partial_x \tau_x + k_y s_z \tau_y) \quad (55)$$

であった．前節と同様に  $\tau_y$  によって分割して考えることで問題が解ける．つまり，

$$H_+ = (-\lambda s_x + \Delta s_z \tau_y) k_y \quad (56)$$

$$H_- = \xi(k_y) \tau_z + \lambda q s_y \tau_z + \Delta q \tau_x \quad (57)$$

として， $H_+ \Psi |\tau\rangle_{\tau_y} = E \Psi |\tau\rangle_{\tau_y}$  および  $H_- \Psi |\tau\rangle_{\tau_y} = 0$  である．ここで， $\tau_y |\tau\rangle_{\tau_y} = \tau |\tau\rangle_{\tau_y}$ ．エネルギーは  $E(k_y) = \pm \sqrt{\lambda^2 + \Delta^2} k_y$  で与えられる． $H_- \Psi |\tau\rangle_{\tau_y} = 0$  を解くには，さらに  $s_y$  の固有状態を考えれば良い．その方程式は

$$\xi(k_y) + s \lambda q(k_y) + i \Delta q(k_y) \tau = 0 \quad (58)$$

である． $s = \pm 1$  は  $s_y$  の固有値．解  $q = q_{s,\pm}$  は

$$q_{s,\pm}(k_y) = -\frac{i \tau \Delta + s \lambda}{2B} \pm \sqrt{\left(\frac{i \tau \Delta + s \lambda}{2B}\right)^2 + \frac{\mu}{B} - k_y^2} \quad (59)$$

<sup>\*1</sup> これはトポロジカル結晶超伝導体 (Ueno, *et al.*, submitted to PRL) の例である．



となる． $x > 0$  の半無限空間で有界な波動関数を得るには  $\text{Im } q_{\pm} > 0$  でなければならず，これより， $\tau = -\text{sgn}(B\Delta)$  と  $\mu/B > k_y^2 > 0$  が要請される．

以上を見ると，スピンに関しては  $s_y = +1$  と  $s_y = -1$  の空間が混ざるが，依然として， $\tau_y$  の固有値は  $\tau_y = \tau = -\text{sgn}(B\Delta)$  の定まった値をとることが分かる．つまり，スピンの方向は運動量に依存しているが，任意の運動量において電子と正孔の重みが等しくなっている．

## 参考文献

- [1] 江藤幹雄「半導体量子ドットの物理学: 近藤効果を中心に」  
T 行列と伝導度の扱いに詳しい．
- [2] A. C. Hewson, “*The Kondo Problem to Heavy fermions*”  
近藤効果について一通り全て解説してある．Fermi 液体論や理論手法についても詳細に論じている．
- [3] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **251**, 4515 (1982).  
NS 接合のトンネルコンダクタンスの基本的な関係式，いわゆる BTK 公式の原論文．

本稿での NS 接合の描像は以下の論文に基づく．

- [4] C. J. Bolech and E. Demler, Phys. Rev. Lett. **98**, 237002 (2007).
- [5] J. Nilsson, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **101**, 120403 (2008).
- [6] K. T. Law, P. A. Lee, and T. K. Ng, Phys. Rev. Lett. **103**, 237001 (2009).

表面状態の導出法．

- [7] S. Mao, Y. Kuramoto, K-I. Imura, and A. Yamakage, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 124709 (2010).