

量子ドット：閉じ込めと開放の物理学

2022.11.30 Lecture 2

15:10 – 16:40

Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

Shingo Katsumoto

第2章 ランダムポテンシャル

1. 準位統計とランダム行列
2. 金属超微粒子の久保効果
3. 量子カオスと準位統計
4. 量子カオスのScar波動関数

1. ランダム行列と準位統計
2. 金属超微粒子の久保効果

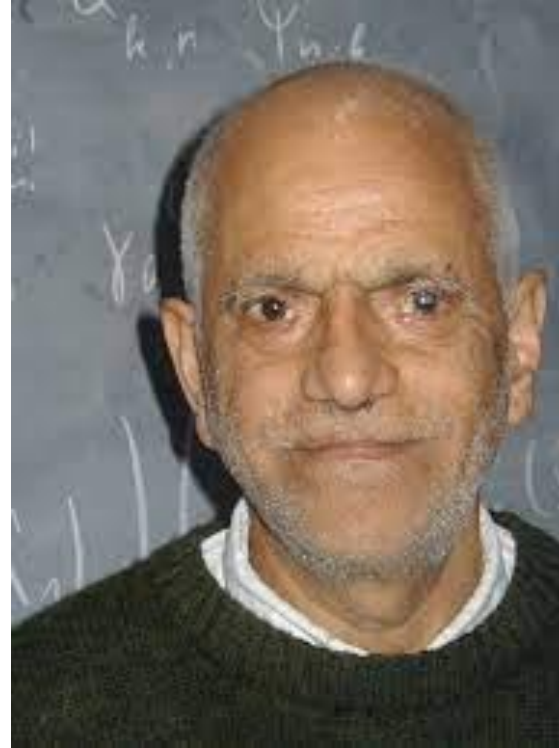
久保亮五
(1920-1995)



Eugene Paul Wigner
(1902- 1995)



Freeman J. Dyson
(1923–2020)



Madan Lal Mehta
(1932-2006)



Walter D. Knight
(1919-2000)

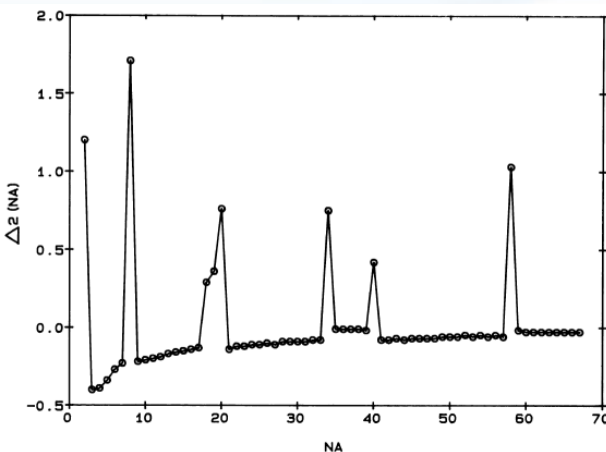
ランダムな量子ドットの集合：金属超微粒子

金属超微粒子： 粒径1 nm～500 nm (更に大きなものをこう呼ぶ場合もある)

真空蒸着，ガス中蒸着等様々な製法

金属クラスター： 2個～百個程度の金属原子のかたまり

- 真空中やすり掛け→質量分析 など，様々な製造方法
- 原子間結合はバルクとは異なる
- 電気伝導は絶縁体
- 原子数によりクラスターが安定化する
「魔法数」(magic number)が存在
- 触媒などへの広汎な応用

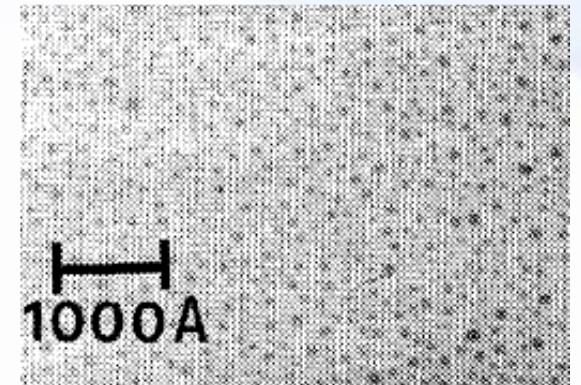
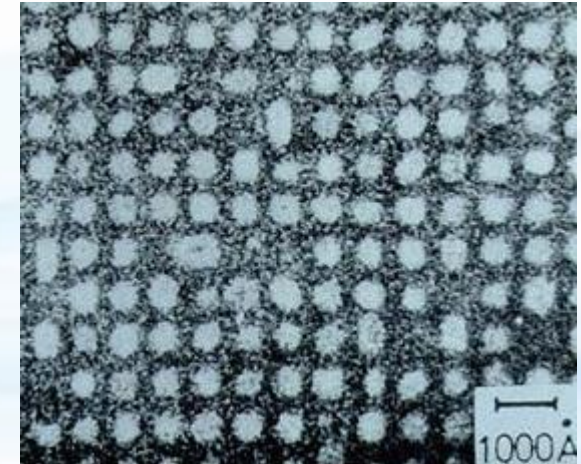


Li クラスターの2次エネルギー(原子数変化に対する原子当たりのエネルギー変化)

Harbola, PNAS **89**, 1036 (1112).

格子状に配列した塩化カリウムの超微粒子

(ERATO 林超微粒子プロジェクト 1981-86)



ガラス基板上Sn微粒子

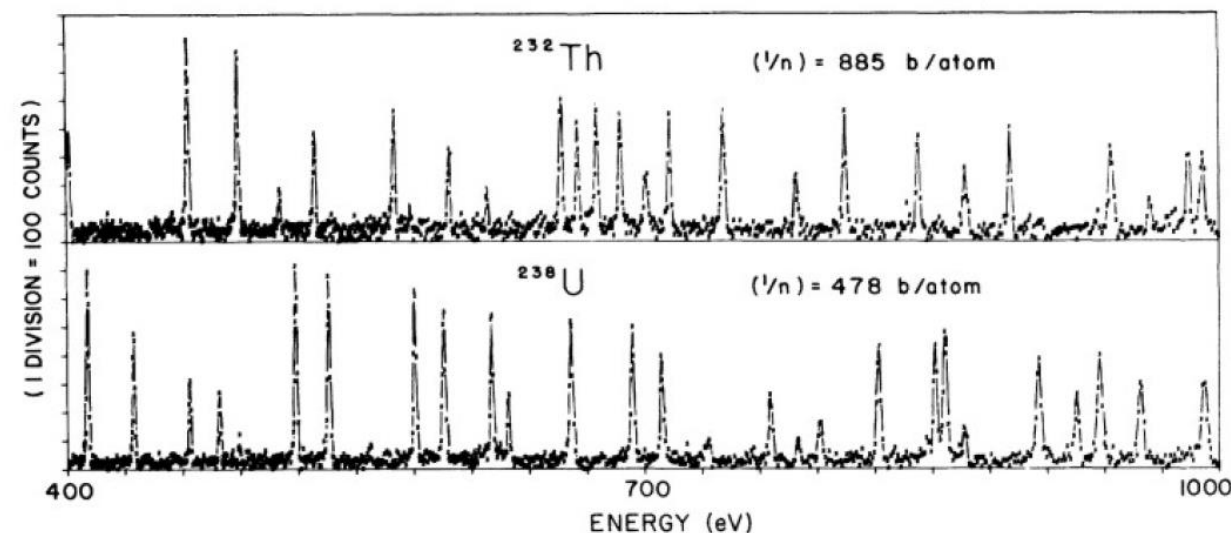
Fukagawa et al. JPSJ **51**, 1095 (1982).

質量数の大きな原子核

核力ポテンシャル中に多数の核子準位：
詳細の把握が困難

→ **準位統計**：分布の特徴から性質を
議論する

ランダム行列：Wigner, Dyson, Mehta, ...



中性子共鳴散乱 ^{232}Th , ^{238}U Rahn et al. Phys. Rev. C6, 1869 (1972)

金属超微粒子：形状は概ね丸いが球ではなく不定形，大きさにばらつきあり

→ **準位統計**：微粒子内の多数のエネルギー準位の間隔分布

エネルギーの異なる電子からはポテンシャル形状は違って見える



多数のポテンシャルに対する少数準位間隔の統計と同値

準位間反発，ランダム行列

あるポテンシャル： $V(\mathbf{r})$ ， 離散固有状態： $\{|k\rangle\}$

ポテンシャル変化： $V'(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \delta V(\mathbf{r})$ ランダムポテンシャルシフト

固有エネルギーのシフト： $\delta E_k = \underbrace{\langle k | \delta V | k \rangle}_{\text{ランダムなシフト}} + \underbrace{\sum_{j \neq k} \frac{|\langle j | \delta V | k \rangle|^2}{E_k - E_j}}_{E_j, E_k \text{ が近い時に大きくなる準位間反発項}}$

ランダム行列：確率変数を要素とする行列

最も簡単な例 $\mathcal{H}_w = \begin{pmatrix} x_1 & x_3 \\ x_3 & x_2 \end{pmatrix}$ $x_1, x_2 \sim N(0, 1)$ (平均0, 分散1のガウス分布)
 $x_3 \sim N(0, 1/2)$

固有値とその差 $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(x_1 + x_2 \pm \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + 4x_3^2} \right), \quad \delta\lambda = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + 4x_3^2}$

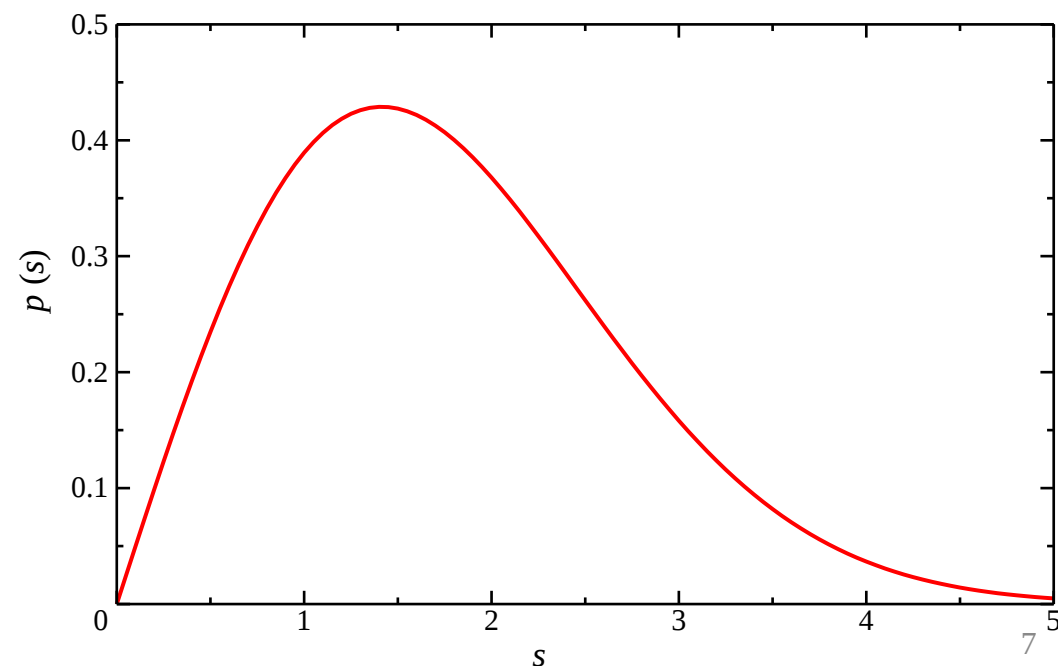
$s \equiv \delta\lambda$ の分布 $p(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 \frac{e^{-x_1^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-x_2^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-x_3}}{\sqrt{\pi}} \delta \left[s - \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + 4x_3^2} \right]$

変数変換 $\begin{cases} x_1 - x_2 = r \cos \theta \\ 2x_3 = r \sin \theta \\ x_1 + x_2 = \psi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = (\psi + r \cos \theta)/2 \\ x_2 = (\psi - r \cos \theta)/2 \\ x_3 = r \sin \theta/2 \end{cases}$ ヤコビアン $-\frac{r}{4}$

$$\begin{aligned} p(s) &= \frac{1}{8\pi^{3/2}} \int_0^\infty dr r \delta(s - r) \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^\infty d\psi \\ &\quad \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\psi + r \cos \theta}{2} \right)^2 + \left(\frac{\psi - r \cos \theta}{2} \right)^2 + \frac{r^2 \sin^2 \theta}{2} \right] \right\} \\ &= \frac{\sqrt{4\pi}s}{8\pi^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\theta \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{s^2 \cos^2 \theta}{2} + \frac{s^2 \sin^2 \theta}{2} \right) \right] \\ &= \frac{s}{2} e^{-s^2/4}. \quad \text{準位間反発のため } p(0) = 0. \end{aligned}$$

スケール変換 $\bar{p}(s) \equiv \langle s \rangle p(\langle s \rangle s), \quad \langle s \rangle \equiv \int_0^\infty s p(s) ds$

Wigner surmise, Wigner分布



$N \times N$ 行列に拡張

$$\rho(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{N,\beta}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 \right) \prod_{j < k} |x_j - x_k|^\beta \quad \mathcal{Z}_{N,\beta} = (2\pi)^{N/2} \prod_{j=1}^N \frac{\Gamma(1 + j\beta/2)}{\Gamma(1 + \beta/2)}$$

$\beta = 1, 2, 4$ Dyson index

1: ガウス型直交集合 (Gaussian Orthogonal Ensemble, GOE)

電子系：時間反転対称性, Kramers縮退, スピン軌道相互作用なし

2: ガウス型ユニタリー集合 (Gaussian Unitary Ensemble, GUE)

電子系：時間反転対称性がない, スピン軌道相互作用はなし

4: ガウス型シンプレクティック集合 (Gaussian Symplectic Ensemble, GSE)

電子系：時間反転対称性, 強いスピン軌道相互作用, $2N \times 2N$

cf. 相転移のユニバーサリティクラス

相転移の臨界指数は系の詳細によらず, 対称性などによるユニバーサリティクラスで決まる

金属超微粒子：軌道準位離散化，電子数固定 ➡ 久保効果

Kubo, JPSJ **17**, 976 ('62), Kawabata & Kubo JPSJ **21**, 1765 ('66), Kubo et al., Ann. Rev. Mat. Sci. **14**, 1457 ('77)

電子比熱
(低温)
 $\delta \ll k_B T$

平均電子エネルギー

$$\bar{E} = \int P(\epsilon) \epsilon \exp \left[-\frac{\epsilon}{k_B T} \right] d\epsilon$$

(各微粒子の基底状態をゼロ，第一励起状態のみ考慮)

これより電子比熱は

$$C = \frac{d\bar{E}}{dT} = k_B \int P(\epsilon) \left[\frac{\epsilon}{k_B T} \right]^2 \exp \left[-\frac{\epsilon}{k_B T} \right] d\epsilon$$

低準位間隔領域で

$$P(\epsilon) \approx \frac{\epsilon^n}{\delta^{n+1}} \quad n: \text{Dyson factor}$$

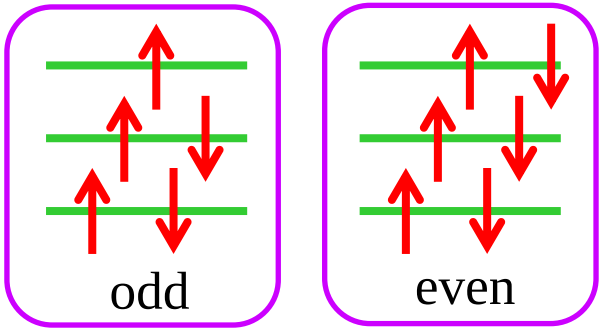
低温電子比熱： $C \approx k_B \left(\frac{k_B T}{\delta} \right)^{n+1}$

- $(k_B T)^n$ 倍小さい. すなわち金属性を失う
- 温度依存性からDyson factorが求まる？

Stewart PRB **15**, 1143 ('77) Pt 微粒子で比熱の縮みを確認

電子スピン帯磁率 { N が奇数の微粒子：基底状態 スピン1/2
 N が偶数の微粒子：基底状態 スピン0

第1励起状態 スピン三重項 $0, \pm 1$



奇数微粒子帯磁率 $\chi_{\text{odd}} = \frac{\mu_B^2}{V k_B T} \left[\mu_B = \frac{e \hbar}{2m} \text{ ボーア磁子} \right]$

Curie 則で低温に向けて発散

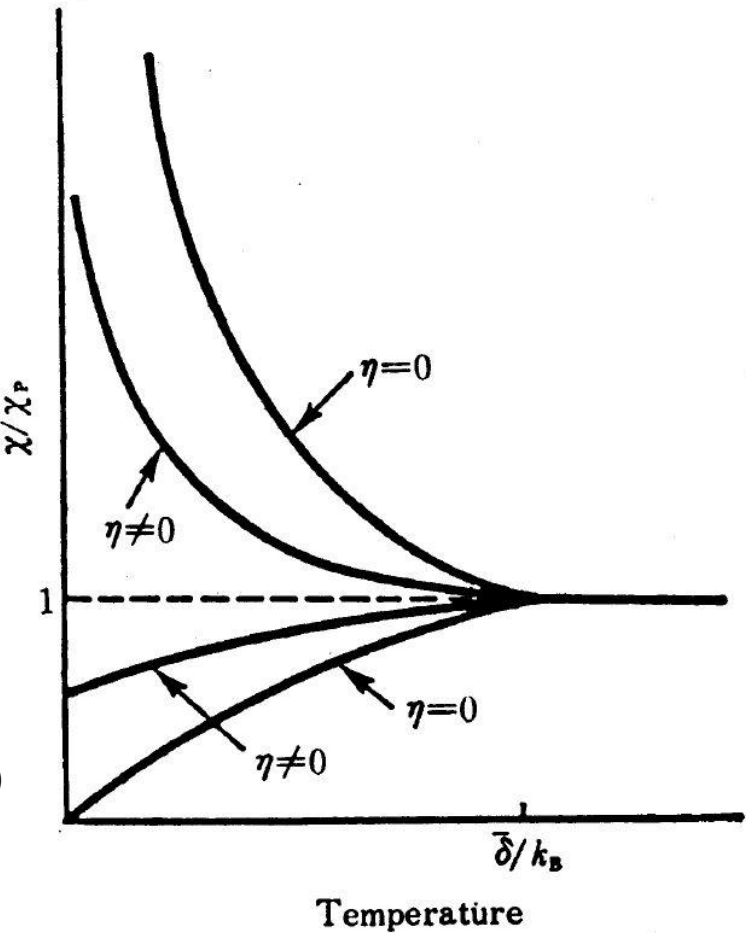
偶数微粒子帯磁率 $\chi_{\text{even}} = \frac{2}{V k_B T} \int P(\epsilon) \exp \left(-\frac{\epsilon}{k_B T} \right) d\epsilon$
 $\approx \frac{\mu_B^2 k_B T}{\delta^2}$ GOEの場合

Dyson factor に応じて低温で縮小

ただし、
スピン軌道パラメーター $\eta = \frac{\pi \hbar}{\tau_{\text{so}} \delta}$

Sone, JPSJ 42, 1457 ('77)

に応じて発散・縮小は緩和



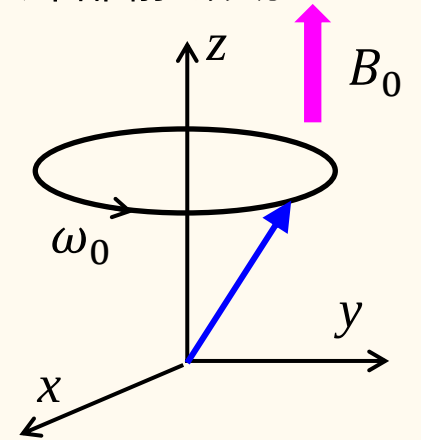
スピン共鳴：ゼーマン分裂による電磁波の共鳴吸収

Zeeman term $\mathcal{H}_Z = \hbar\gamma \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_0$ γ : 磁気回転比, $\mathbf{J}$: スピン, $\mathbf{B}_0$: 外部静磁場

Heisenberg 運動方程式 $\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_Z, \mathbf{J}] = \frac{i}{\hbar} [\hbar\gamma \mathbf{J} \cdot \mathbf{B}_0, \mathbf{J}]$

角運動量交換関係 $[J_j, J_k] = iJ_l$ より $\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \gamma \mathbf{B}_0 \times \mathbf{J}$

Larmor振動数 $\omega_0 = \gamma B_0$ での歳差運動を表す

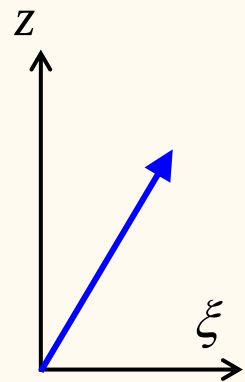


角速度 ω_0 の回転座標系 ($\xi - \zeta$)に乗って見る $\Rightarrow$ スピンは静止

磁場の効果が回転座標に繰り込まれた

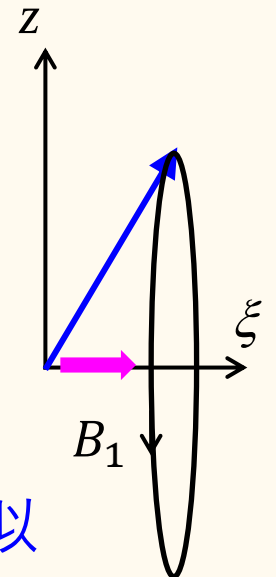
ξ 軸に沿って, 新たに磁場 B_1 を印可 $\Rightarrow$ スピンは B_1 の周りに歳差運動

スピンを任意の確度に傾けることができる

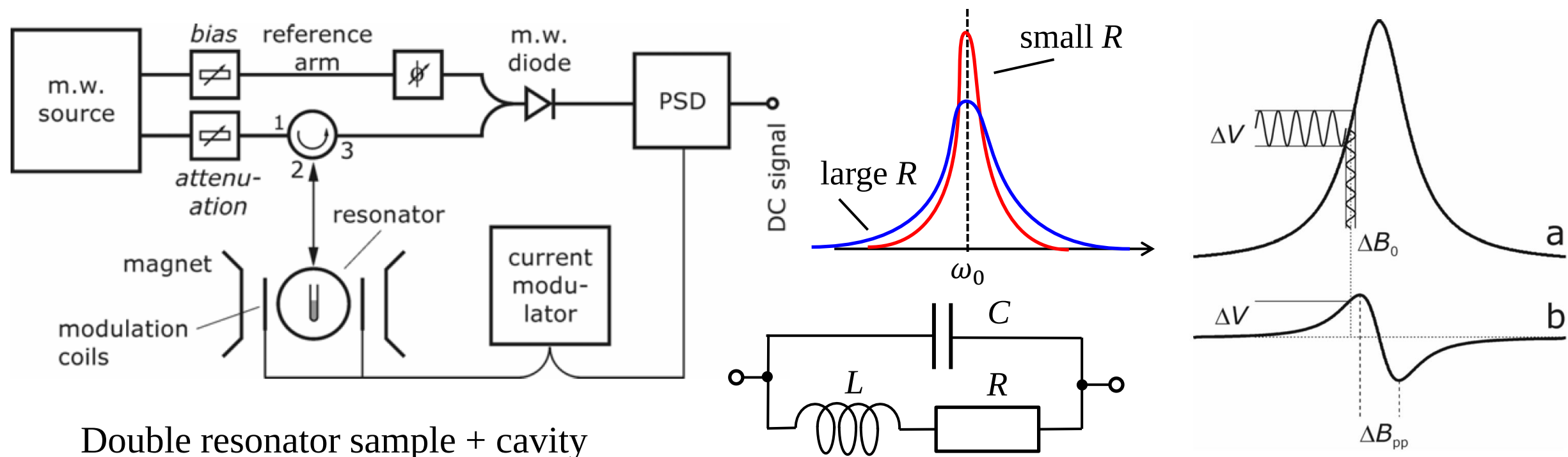


$$e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t} = 2 \cos(\omega_0 t)$$

ω_0 の振動磁場を $\pm\omega_0$ の回転磁場の重ね合わせと見る $\Rightarrow$ $-\omega_0$ の回転磁場を無視: 回転波近似



Electron paramagnetic resonance (EPR) experimental setup



Continuous wave (CW) measurement: detection of resonance dissipation

Pulse, Fourier transform measurement: detection of magnetic field due to the precession of magnetic moment

久保効果の検証 スピン帯磁率：核磁気共鳴

電子スピン帯磁率の測定法：静帯磁率, 電子スピン共鳴, 他
核磁気共鳴 (nuclear magnetic resonance, NMR)による電子ス
ピン帯磁率の検出

NMR共鳴周波数 $\nu = \nu_{\text{dia}} + \Delta\nu$

参照物質の共鳴周波数 周波数シフト

Knight shift $K \equiv \frac{\Delta\nu}{\nu_{\text{dia}}} \approx K_s$ フェルミ準位付近電子
スピンの寄与

$$K_s = \frac{8\pi}{3} \langle |\phi_k(0)|^2 \rangle_F \chi_{\text{spin}}$$

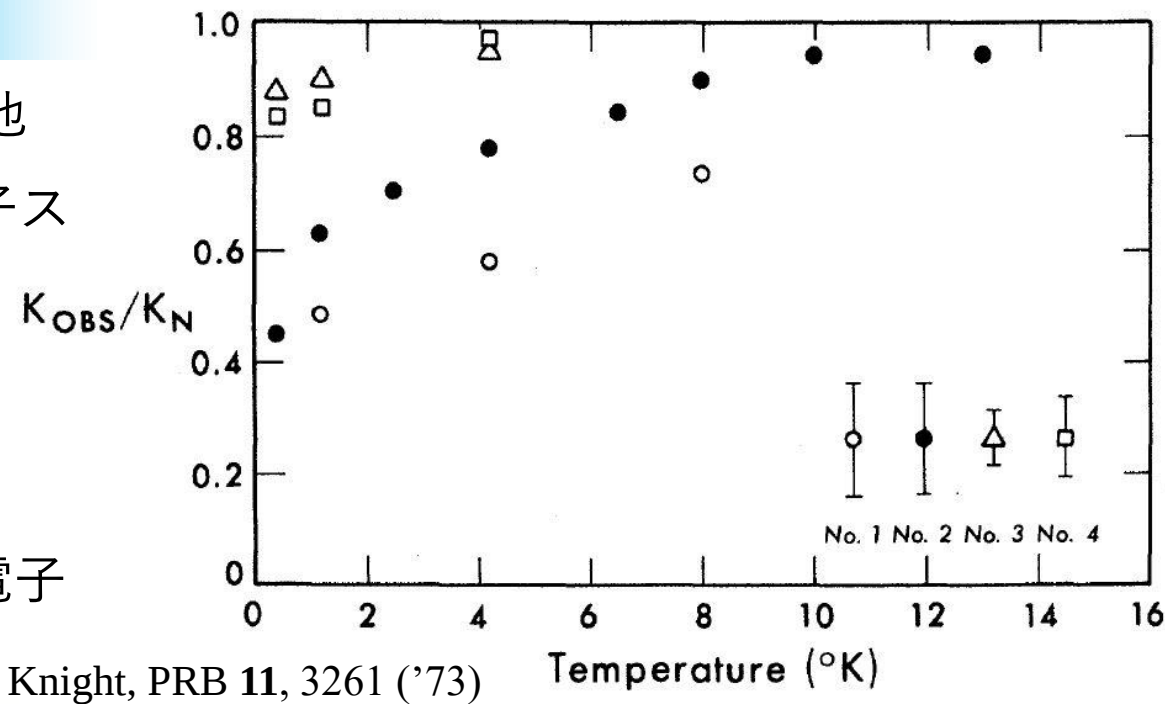
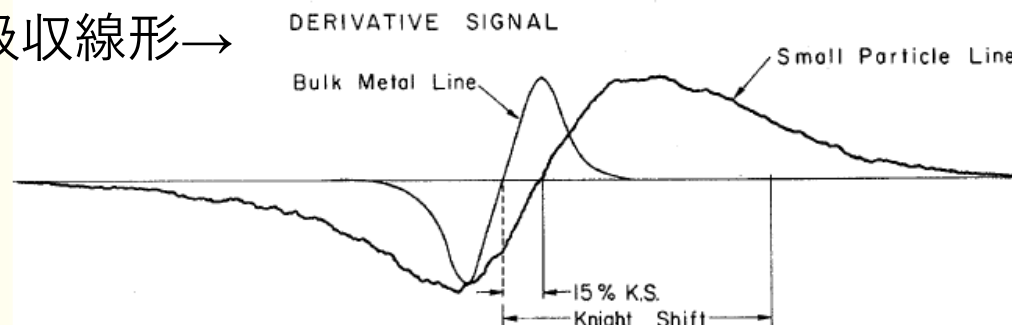
Yee & Knight, PRB 11, 3261 ('73)

核位置存在確率のフェルミ面平均 電子スピン帯磁率

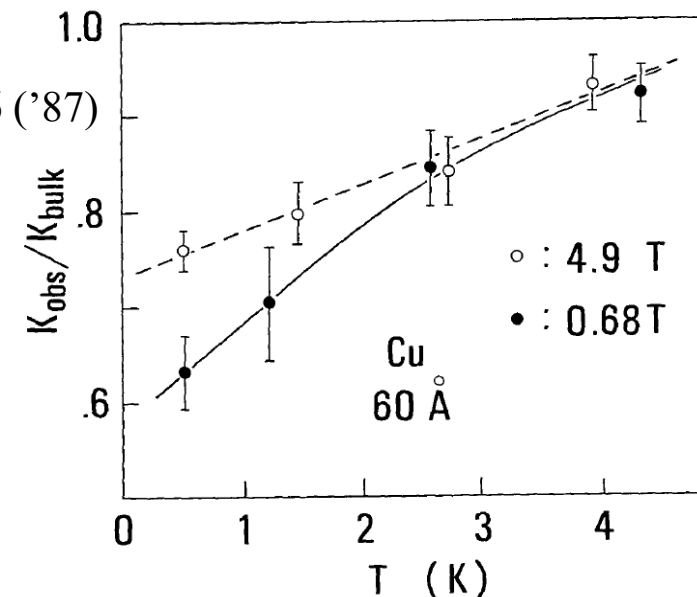
奇数電子スピン帯磁率はナイトシフトでは測定されない

偶数電子の場合の吸収線形→

奇数電子スピンは1粒子
当たり1/2のため, $\langle \dots \rangle_F$
のばらつきが大きい



Kobayashi &
Katsumoto
JPSJ 56, 2256 ('87)



3. 量子カオスと準位統計



カオス(chaos)とは?

力学系：支配法則と初期条件によってその後の時間発展(運動)が決定 (cf. マスター方程式)

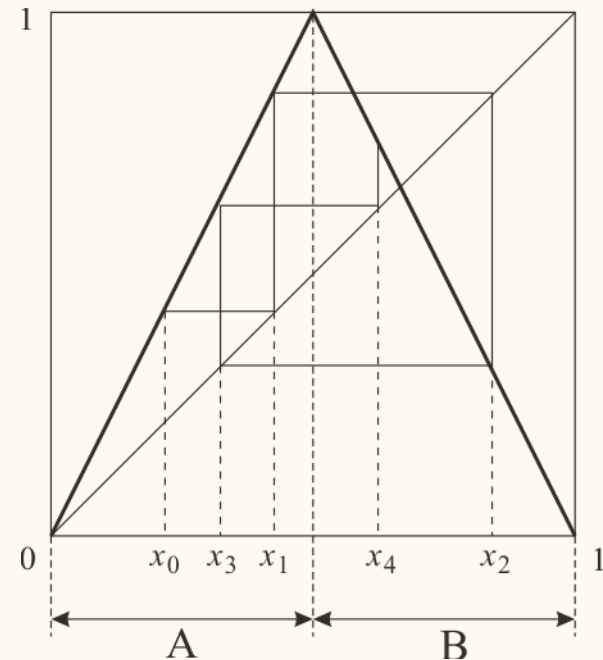
テント関数力学系

$$x_n = \varphi(x_{n-1})$$

$$\varphi(x) = T(x) = \begin{cases} 2x & 0 \leq x \leq 1/2, \\ 2 - 2x & 1/2 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

$$A: x_n \in [0, 1/2]$$

$$B: x_n \in (1/2, 1]$$



決定論 → 非決定論的結果：カオス

可積分・非可積分

Hamilton力学系 (Energy積分が存在) f 自由度系の力学変数 p, q

Liouvilleの定理 $\frac{d}{dt} \rho(p(t), q(t), t) = 0$ $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial \rho}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} = \{H, \rho\} = 0$

運動の恒量 $F_i(p, q) = c_i$ f 個：可積分, f 個より少ない：非可積分

(この場合でも, 決定論的)

カオスの簡単な定義

小さな差を持つ初期値から時間発展により大きな差が生じるような力学系

Ex) テント関数力学系

$x \in (0, 1)$ で, 2進有理数 (2^n を分母に持つ分数) ではないとする

$f^{[n]}$ 関数 f を n 回作用させる

Tent function: $|T(x + \epsilon) - T(x)| \approx 2\epsilon$ and $|T^{[2]}(x + \epsilon) - T^{[2]}(x)| \approx 2^2\epsilon$

General n $|T^{[n]}(x + \epsilon) - T^{[n]}(x)| \approx 2^n\epsilon$

$$|(T^{[n]})'(x)| = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left| \frac{T^{[n]}(x + \epsilon) - T^{[n]}(x)}{\epsilon} \right| = 2^n$$

Generalization Assume existence of $\lambda(x)$ such as $|f^{[n]}(x + \epsilon) - f^{[n]}(x)| \approx [e^{\lambda(x)}]^n \epsilon$

$$\lambda(x) = \frac{1}{n} \ln |(f^{[n]})'(x)|$$

リャプノフ指数 (Lyapunov index) $\lambda(x) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |(f^{[n]})'(x)|$

リャプノフ指数が正なら, n の増加と共に解は指数関数的に離れる $\rightarrow$ カオスの判定

量子カオス (quantum chaos) の概念

古典カオスとの類推から期待する量子カオス

$$\text{Schrödinger 方程式} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \psi$$

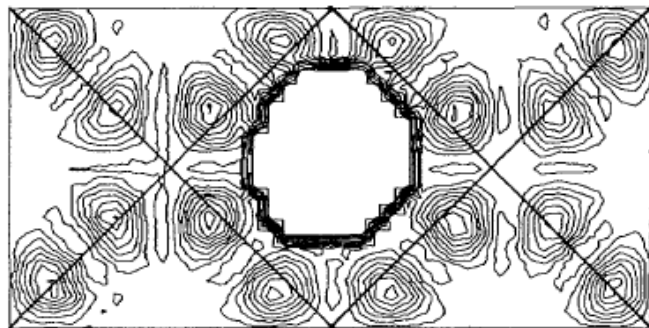
初期状態で、わずかに異なる波動関数 $\varphi_1(\mathbf{r}), \varphi_2(\mathbf{r})$

時間 t に対して指数関数的に波動関数がずれていく場合：量子カオス (?)

このような系は存在しない：Schrödinger 方程式が線形であるため

量子カオス Ehrenfestの定理による対応原理によって古典極限をとった場合にカオスを示すような力学系を考え、これを量子化

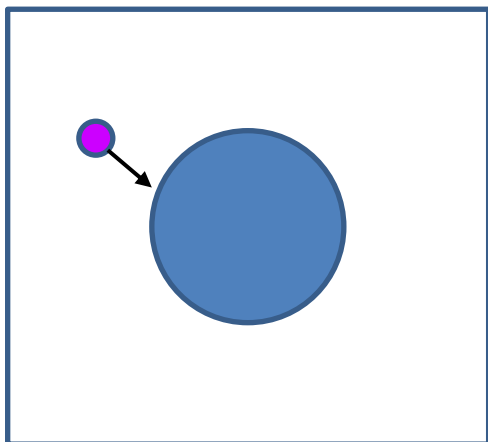
➡ **波動カオス** 古典的波動でも同じ．コヒーレント光，水面波，マイクロ波，音波 …



Ex) マイクロ波キャビティでのSinaiビリヤード Scar固有状態の観測

Sridhar, Phys. Rev. Lett. **67**, 785 (1991).

カオス系の例：単一シナイビリヤード



シナイビリヤード

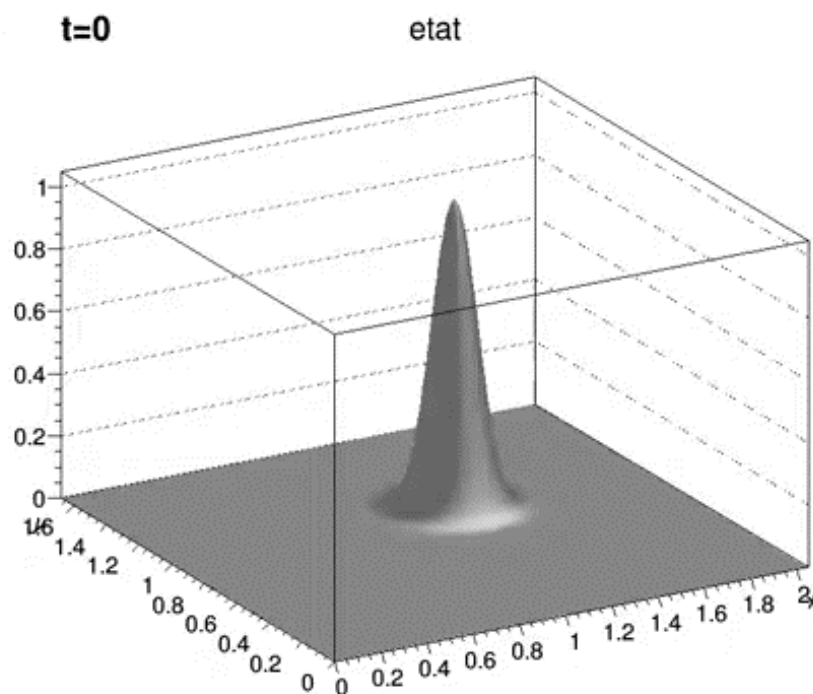
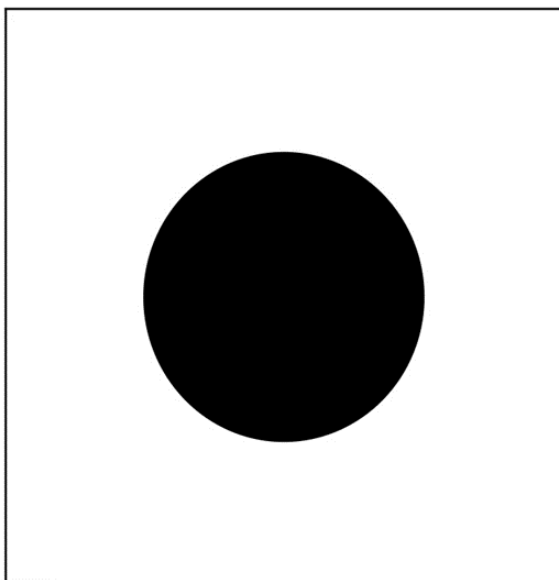
- 滑らかで平らな台上
- 弾道的な球(回転を無視)
- 長方形の閉じ込め(弾性反射)
- 円状の反射体

古典系

➤ カオス

➤ ergodic

Sinai, Russian Mathematical Surveys **25**, 137 (1970).



可積分性と量子系の準位統計の関係

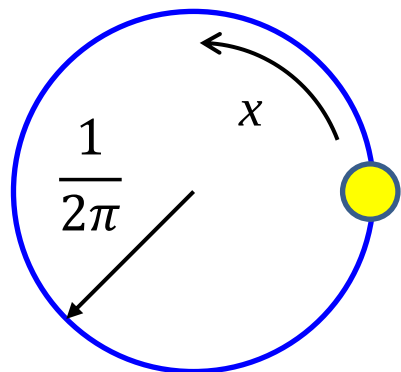
Theorem: 自由度2以上の力学系が古典的に完全可積分 $\Rightarrow$ 量子系の準位統計は
Poisson 分布

Berry & Tabor Proc. Royal Soc. London, Ser. A **356**, 375 (1977).

Conjecture: 力学系が古典的にergodic $\Rightarrow$ 量子系の準位統計は RMTに従う

Bohigas, Gianonni, Schmidt Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).

Semi-Classical Proof: Müller et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 014103 (2004).



撃力回転子 (Kicked rotor)

- リングの上に束縛され滑らかに動く物体
- 周期的な撃力

物体質量：単位質量
リング半径： $(2\pi)^{-1}$
撃力周期：単位時間

ハミルトニアン $H(x, p) = \frac{p^2}{2} + V(x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n)$

撃力 $V(x) \quad x \in [0, 1) \quad V(0) = V(1)$

条件より最も簡単なもの $V(x) = -\frac{K}{4\pi^2} \cos(2\pi x)$

$t = n$: (x_n, p_n) 古典系 $p_{n+1} = p_n - \partial V / \partial x|_{x=x_n},$

Mapping $(x_n, p_n) \rightarrow (x_{n+1}, p_{n+1}) \quad x_{n+1} = x_n + p_{n+1}$

量子系 $t \in [n, n+1)$ の時間発展演算子 $\hat{U} \quad \varphi(x; t = n+1-0) = \hat{U} \varphi(x; t = n-0)$

リング系：周期境界条件により量子化した基底 $\{|m\rangle\}$

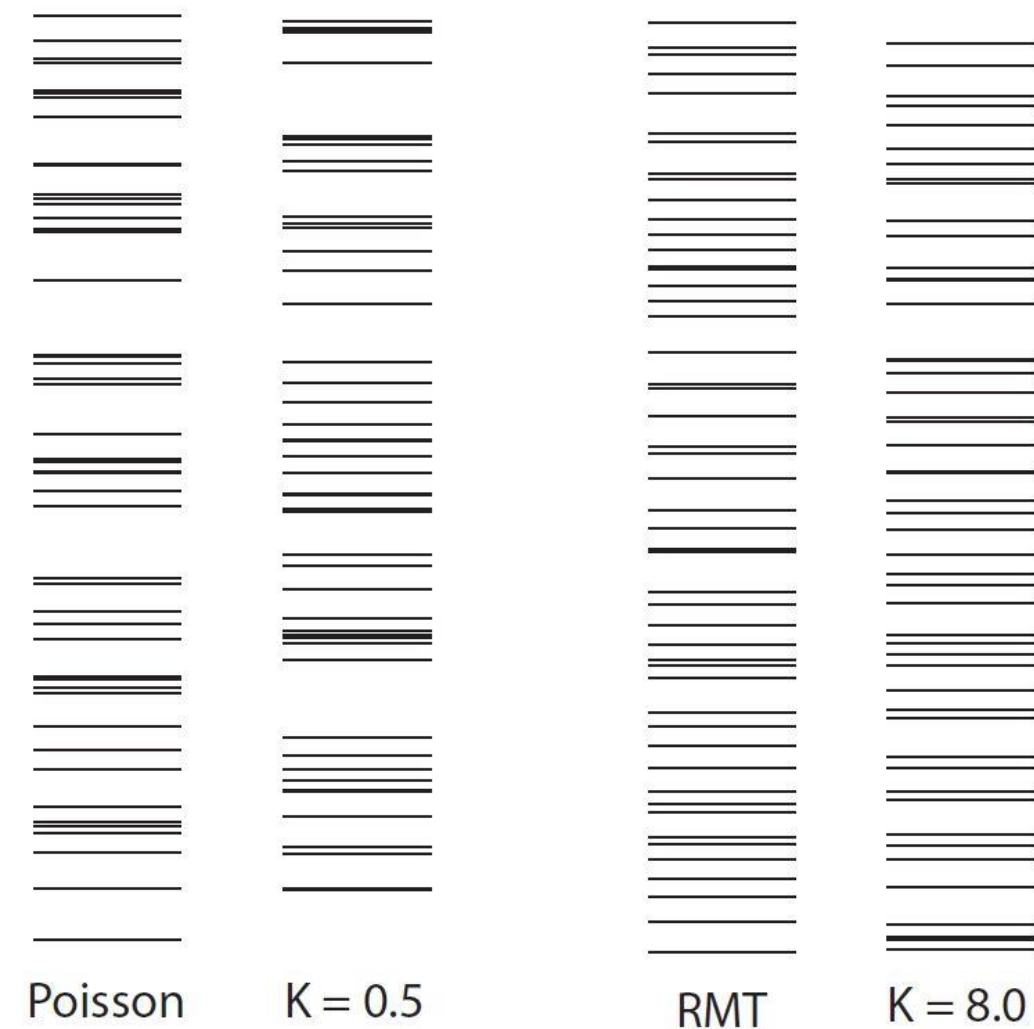
$\hat{U}$ の次元 M $\langle m | \hat{U} | m' \rangle = \frac{1}{\sqrt{iM}} \exp \left[i\pi \frac{(m - m')^2}{M} \right] \exp \left[i \frac{KM}{2\pi} \cos \frac{2\pi(m + 1/2)}{M} \right]$

Kicked rotor (2)

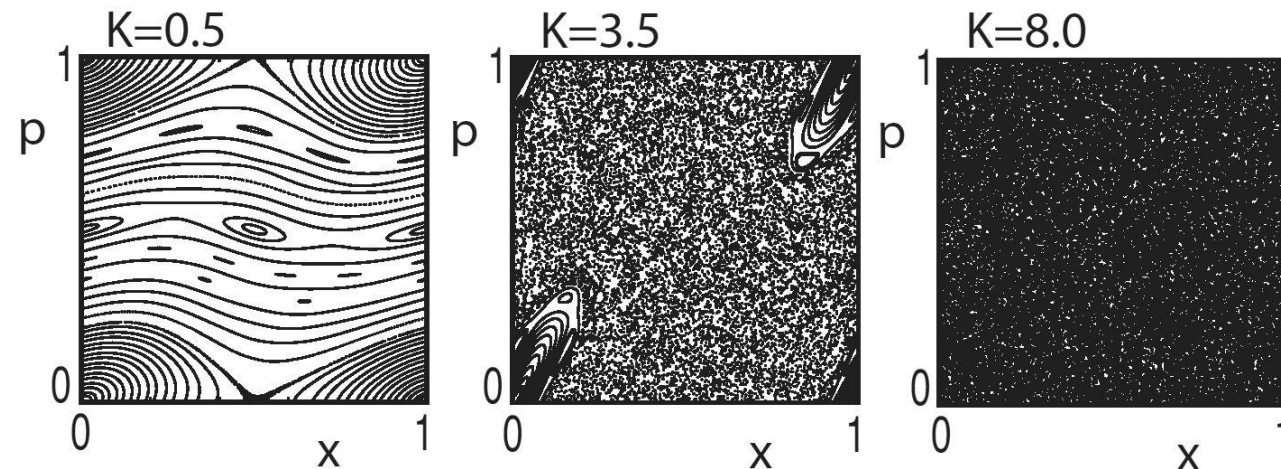
古典Kicked rotorのポアンカレ切断面

量子Kicked rotorの伏見関数

Kicked rotorの「準」エネルギー準位



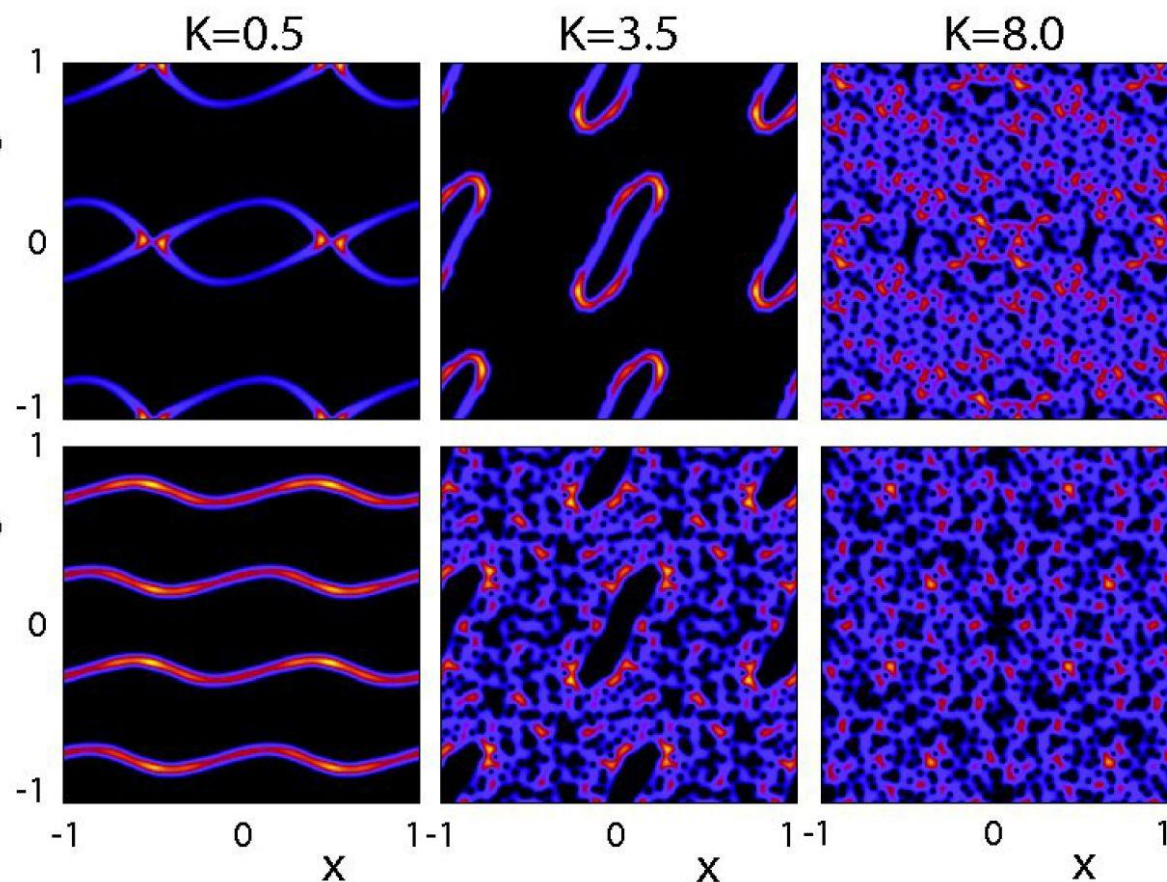
古典

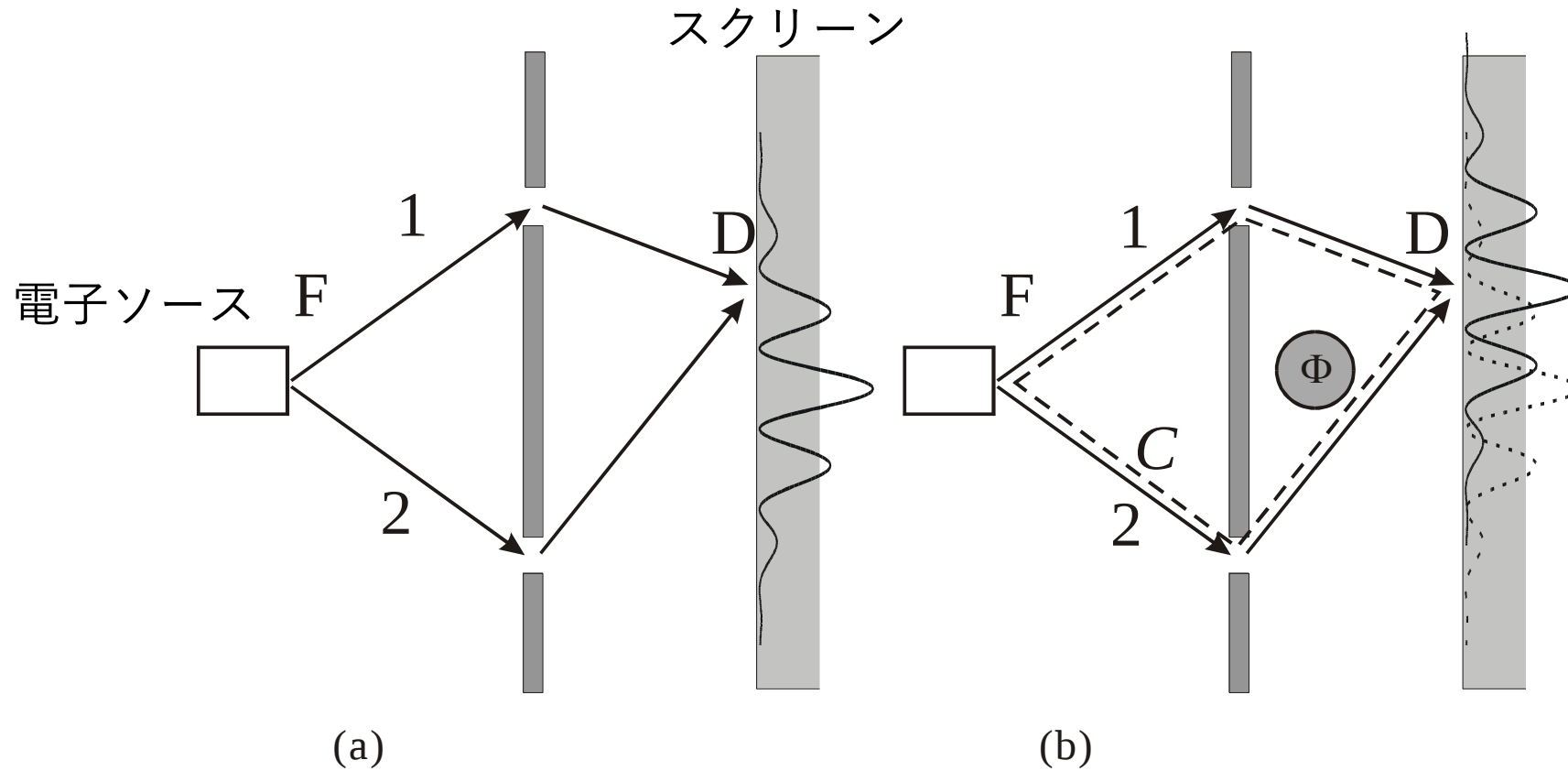


量子

第一励
起状態

基底
状態



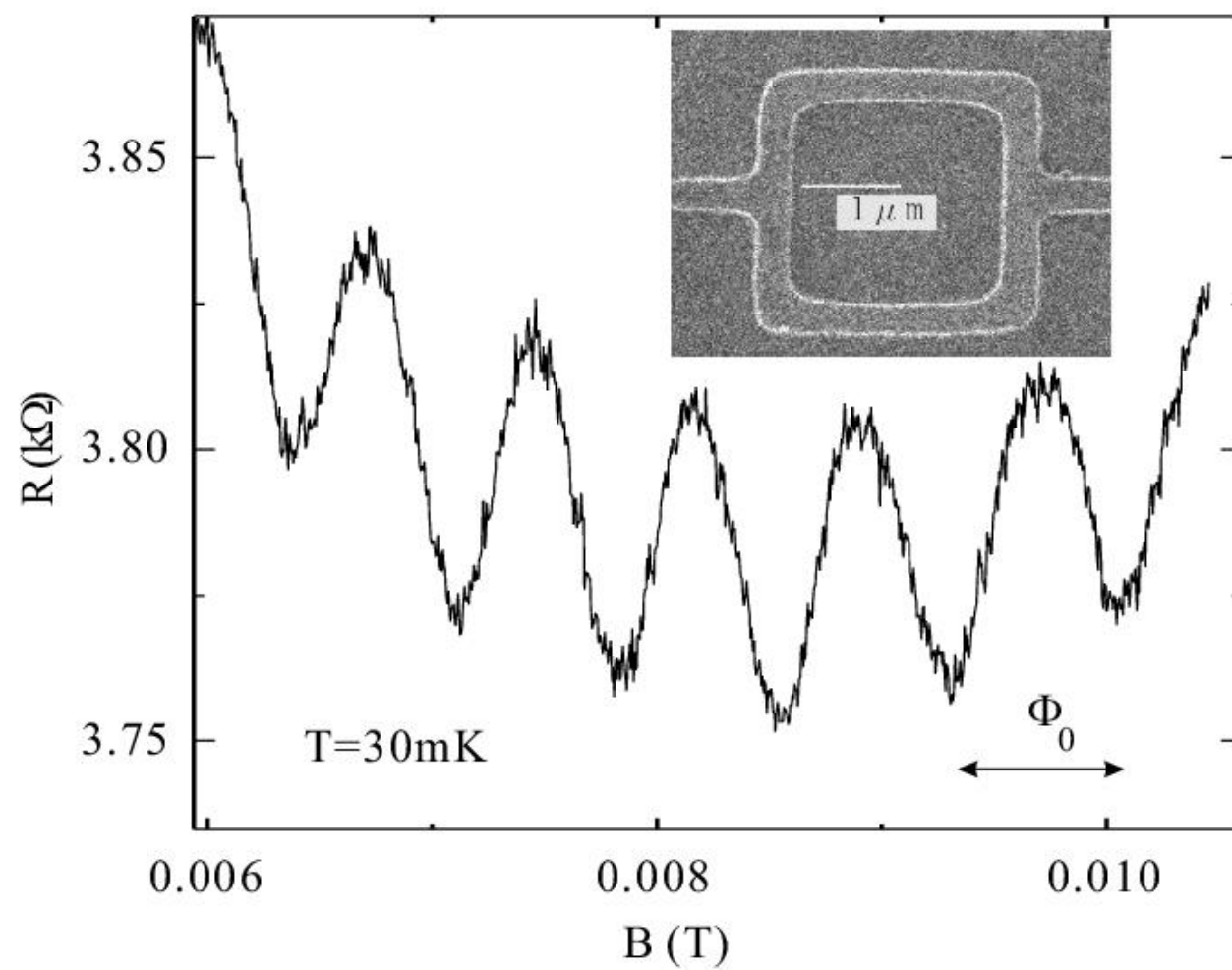


正準運動量

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + e\mathbf{A}$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

Aharonov-Bohm (AB) 位相 $\Delta\theta = \frac{e}{\hbar} \oint_C \Delta\mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{e}{\hbar} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{n} = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad \Phi_0 \equiv \frac{h}{e} \quad \text{磁束量子}$

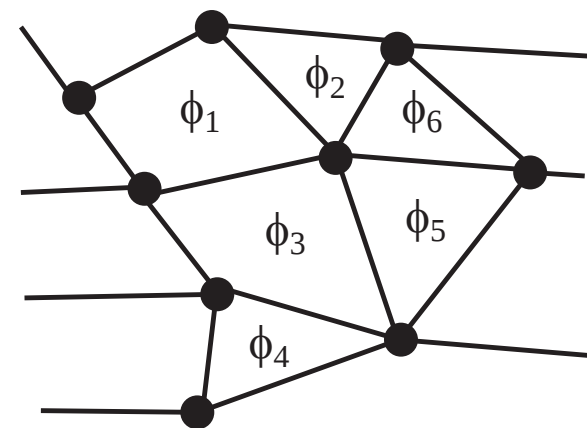


普遍的伝導度ゆらぎ (Universal Conductance Fluctuation, UCF)

Landauerの2端子伝導度 $G = 2\frac{e^2}{h} \sum_{i,j} T_{ij}$

一般の伝導体：量子細線のコヒーレントな接続
(S行列接続)

外部磁場変化によるAB位相の変化
→ 試料を取り換えたのと同じ効果 → 伝導度揺らぎ



試料中の有効伝導度チャネル数 $\sim N$

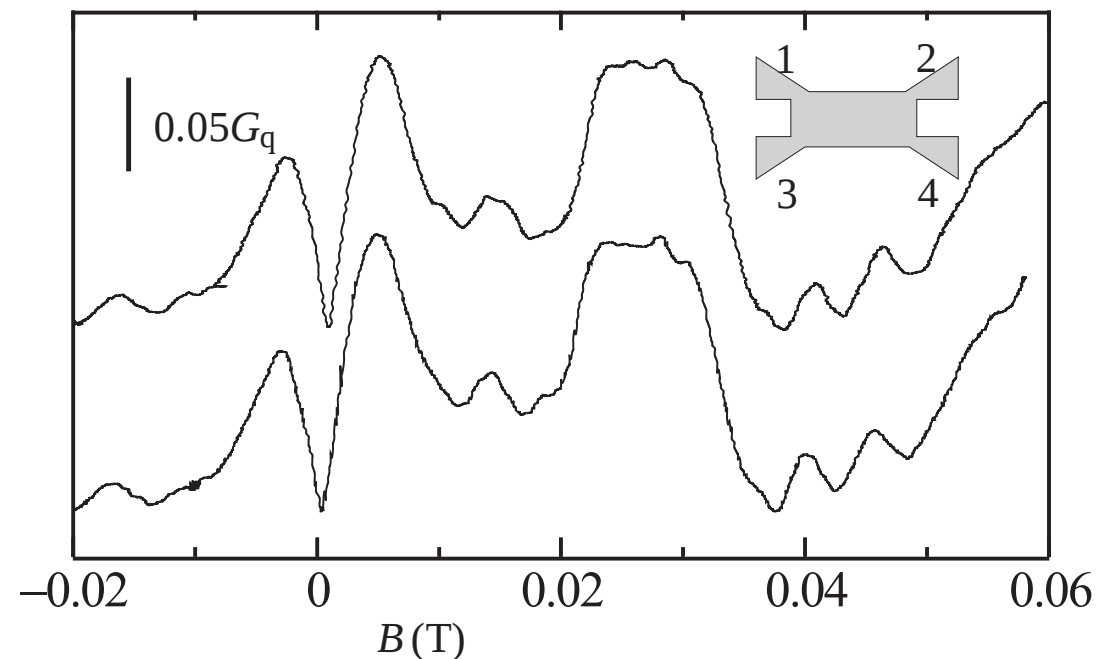
準位統計がポアソンの： N の揺らぎは $\sqrt{N}$

伝導度揺らぎは試料に大きく依存

準位統計がRMT的：準位間反発により N の
ゆらぎは1程度

$$\delta G \sim G_q = \frac{2e^2}{h} \quad \text{普遍的伝導度揺らぎ (UCF)}$$

→ 準位統計を反映する可能性

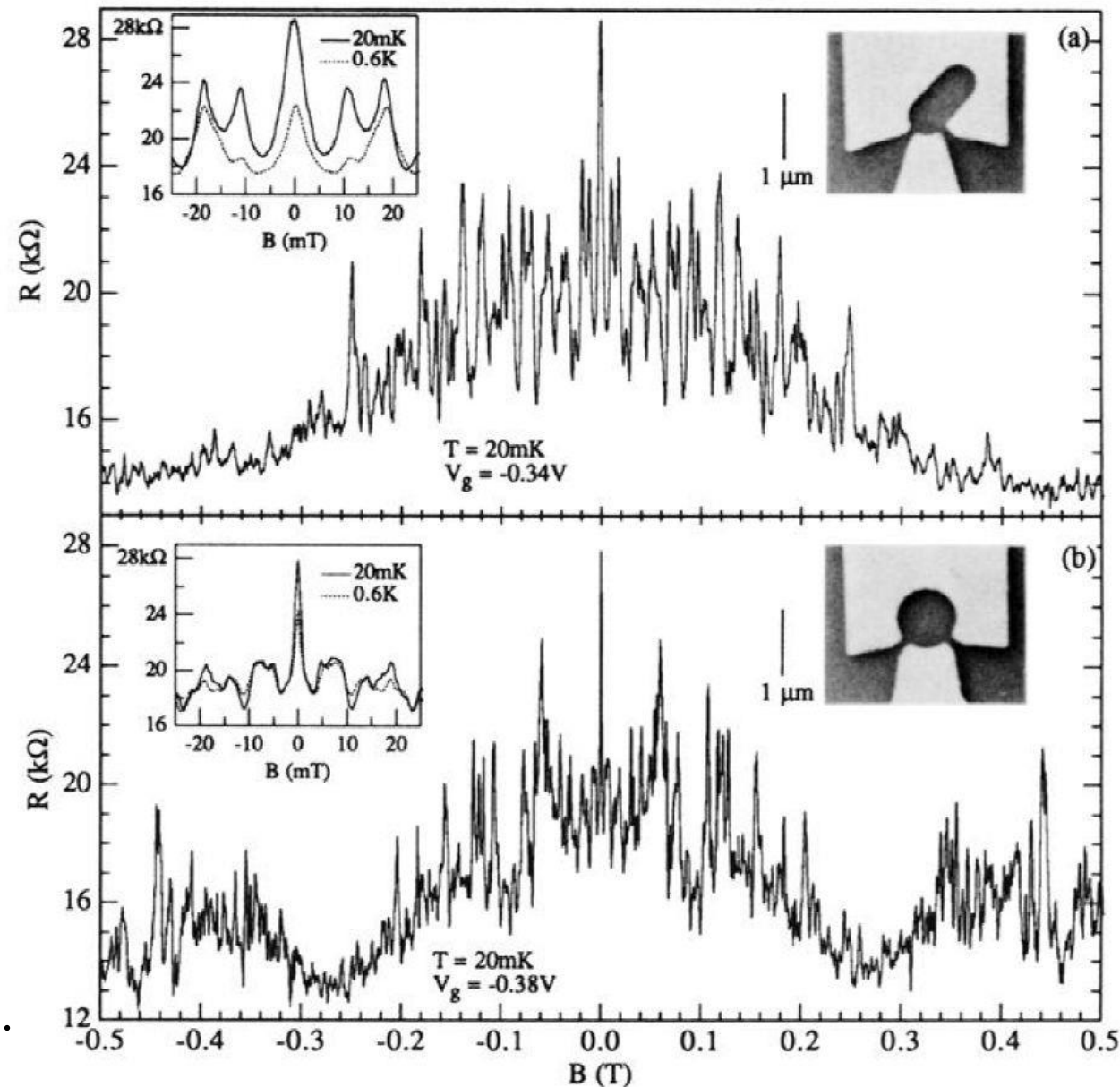


量子ビリヤードの実験

開いた量子ドット (open quantum dot)

：電極との伝導度が $2e^2/h$ よりも大きく，単電子効果を無視できる。

スタジアム型，円形ドット共に低温で激しい抵抗振動：UCFと同原理により，干渉をAB位相により変化させている



C. M. Marcus et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 506 (1992).

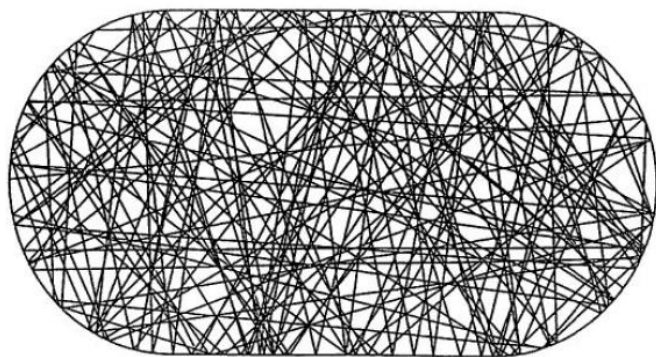
量子ビリヤードの実験 (2)

自己相関関数

$$C(\Delta B) \equiv \langle \delta g(B + \Delta B) \delta g(B) \rangle_B$$

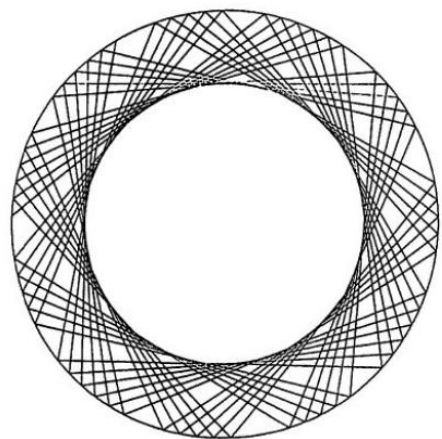
およびパワースペクトル

古典系



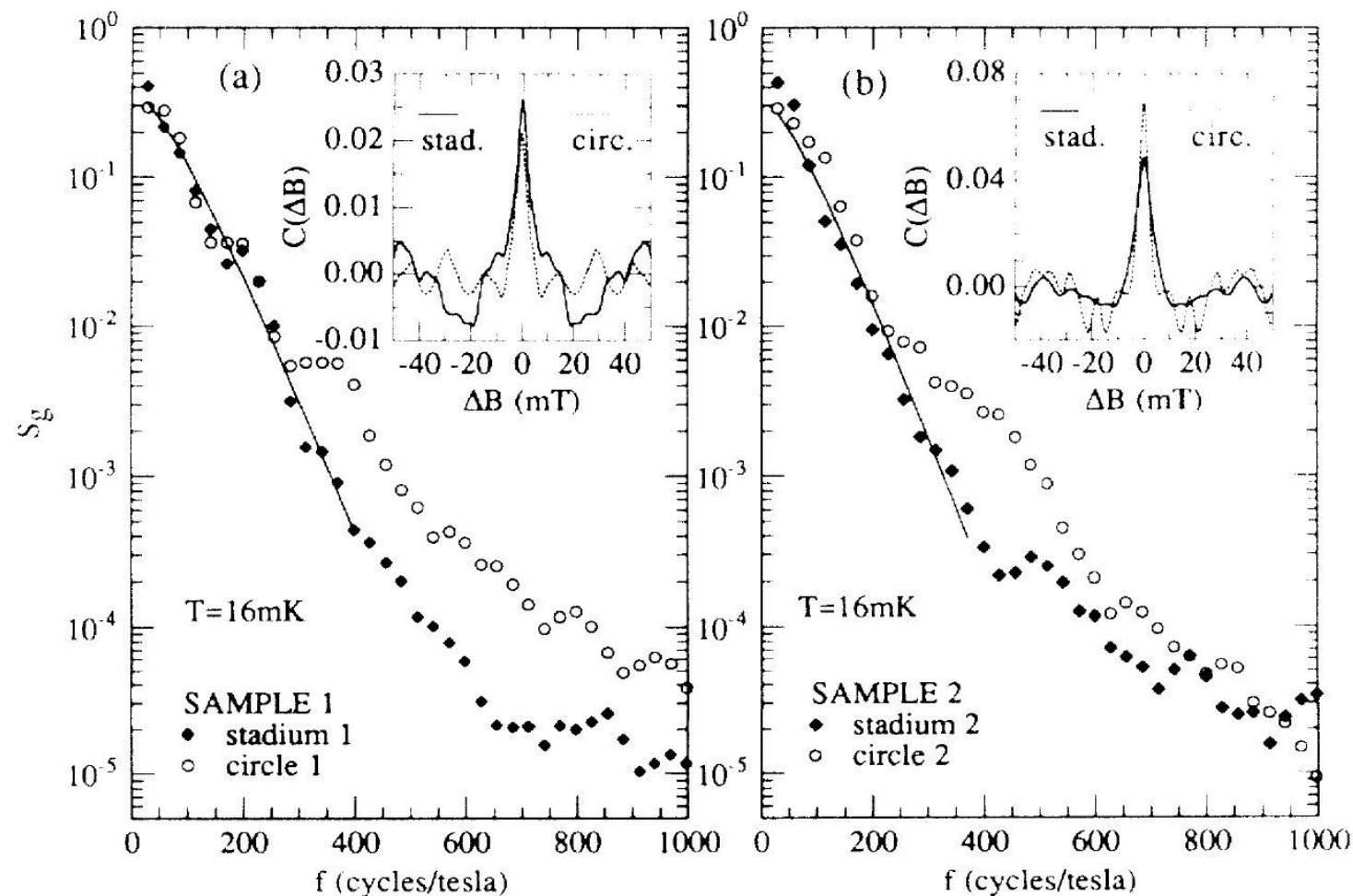
スタジアム

カオス



円形

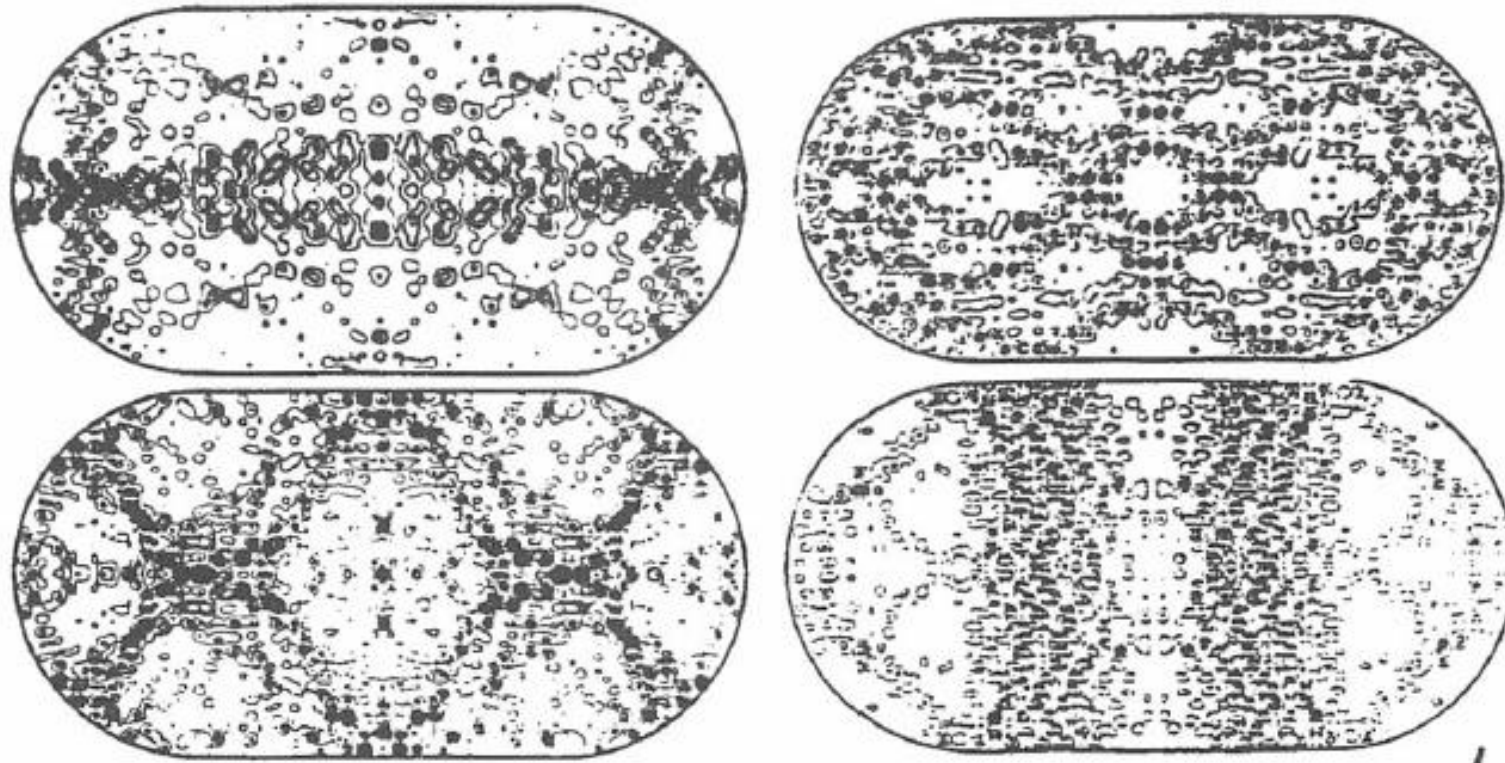
可積分



更に詳しい解析については

原 卓久, 中村勝弘 「量子カオス」 (培風館, 2000)

量子カオスに特有な現象：Scar波動関数の出現

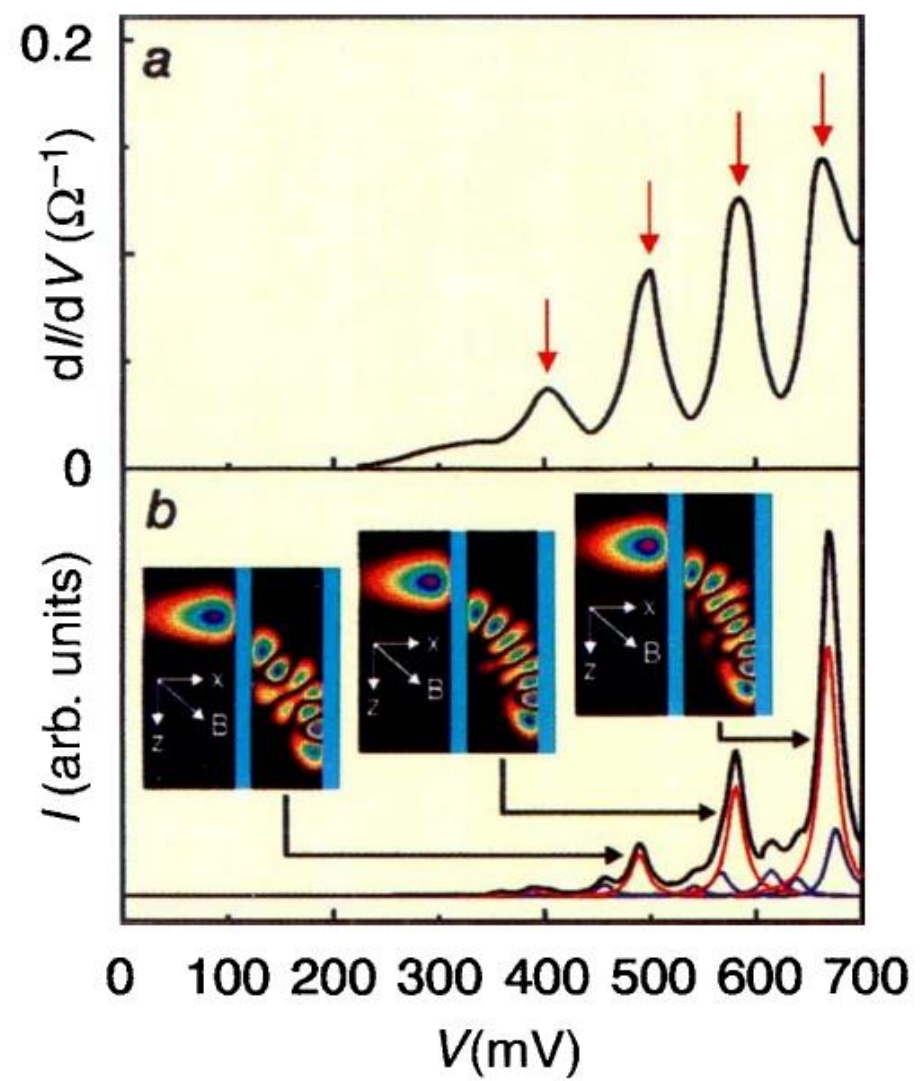
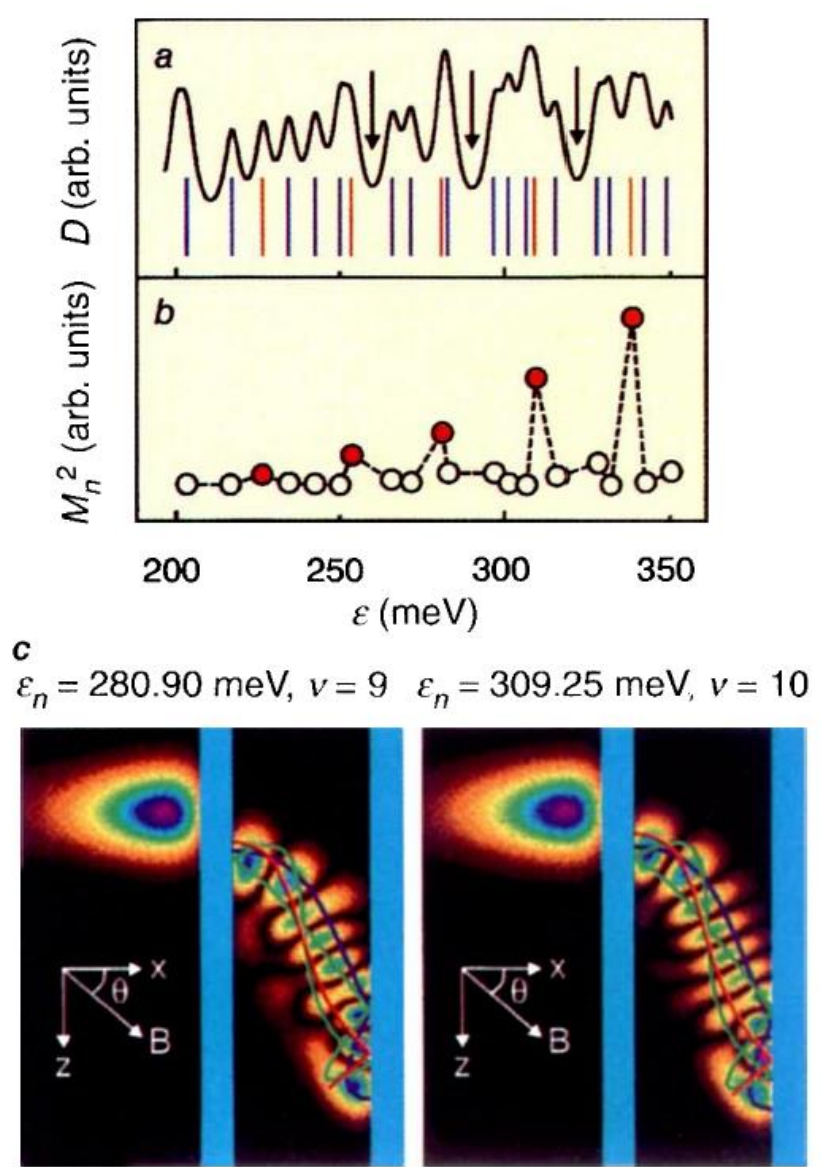


Heller, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515 (1984).

古典系の不安定周期軌道(KAMトーラス) → 量子系では大きな波動関数振幅 Scar 波動関数

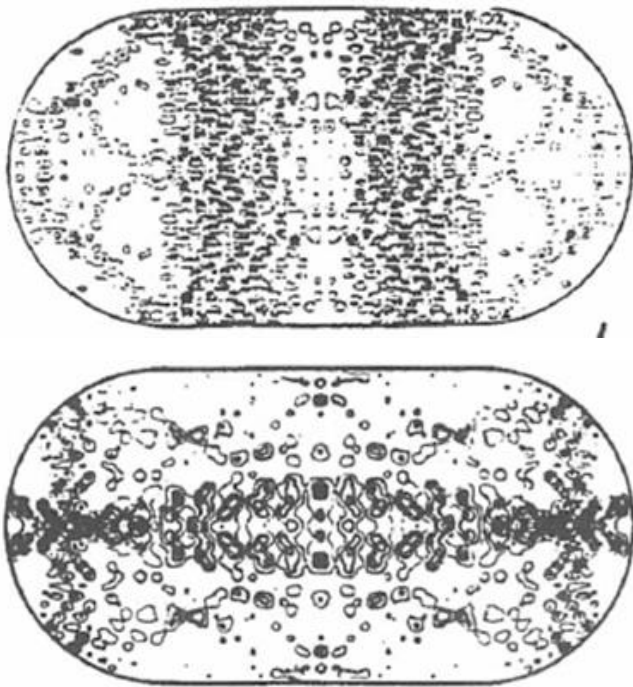
二重量子井戸伝導に現れたScar波動関数

量子閉じ込め：量子カオスとScar波動関数

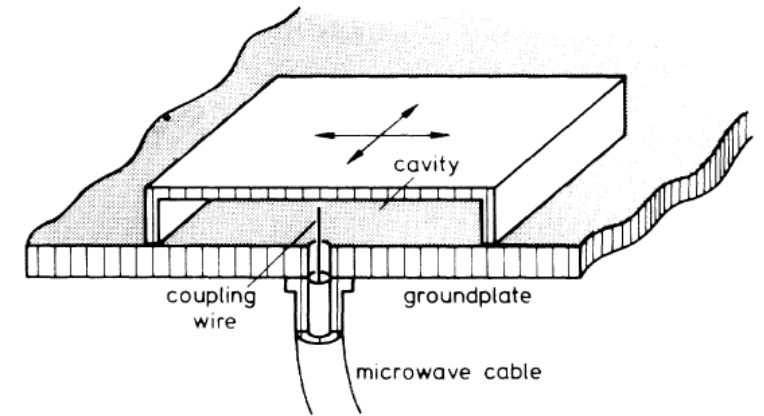
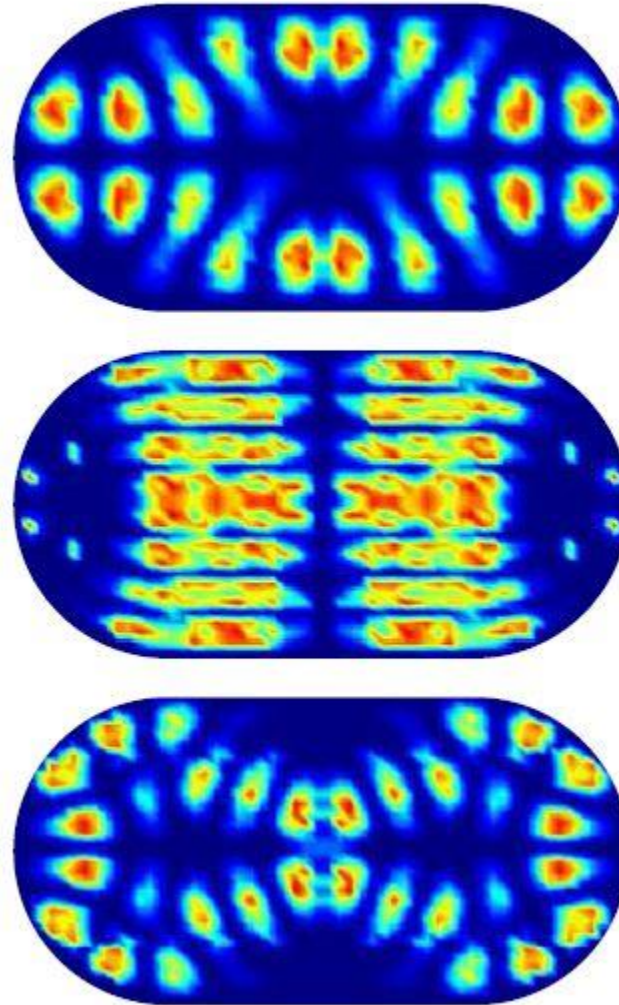


Wilkinson et al., Nature **386**, 608 (1996).

Heller, Phys. Rev. Lett. 53, 1515 (1984).



Microwave reflection



Summary

1. 準位統計とランダム行列
2. 金属超微粒子の久保効果
3. 量子カオスと準位統計
4. 量子カオスのScar波動関数