# 博士論文

非平衡定常状態における フォン・ノイマンエントロピーの体積依存性

箱嶋 秀昭

# 目次

第1章	イントロダクション	1
1.1	はじめに	1
1.2	本研究の目的.................................	4
1.3	先行研究と本研究の関係............................	7
1.4	本研究の特色..................................	10
第2章	粒子溜が絶対零度の場合	12
2.1	モデルのハミルトニアンと量子状態	13
2.2	フォン・ノイマンエントロピー	17
2.3	非自明な NESS となる条件 (Nontrivial NESS)	19
2.4	平衡から遠く離れる条件 (Far from equilibrium)	21
2.5	電流と粒子数ゆらぎの関係..........................	23
2.6	粒子数ゆらぎに関する恒等式.........................	24
2.7	不純物がない場合の平衡状態 (表 2.3[A])	27
2.8	不純物がない場合の NESS (表 2.3[B]) .............	28
2.9	不純物ありの平衡状態 (表 2.3[C])	30
2.10	平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 2.3[D])	31
2.11	粒子溜におけるスケーリング	33
2.12	相関関数	34
第3章	粒子溜が有限温度の場合	40
3.1	量子状態	40
3.2	非自明な NESS &平衡から遠く離れる条件(有限温度) .......	42
3.3	電流と粒子数ゆらぎの関係(有限温度)................	43
3.4	不純物がない場合 (表 3.1[A] と [B])	45
3.5	不純物ありの平衡状態 (表 3.1[C])	47
3.6	平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 3.1[D])	48

3.7 $3.8$	粒子溜におけるスケーリング(有限温度) 相関関数(有限温度)	51 52
第4章 4.1 4.2	<b>結論</b> 本研究の結果のまとめ	58 58 60
謝辞		62
付録 A	式 (2.32)、(2.33) および (3.10) の導出	63
付録 B	絶対零度の平衡状態における $S_L$ の $W$ 依存性	65
付録 C	Linear fitting	67
付録 D	前方散乱に由来する項を得る方法	69
付録 E E.1 E.2	絶対零度と有限温度における、 $W = 0$ 、 $\Delta \mu \ge 0$ のときの相関関数について 絶対零度の場合	71 71 72
参考文献		74

# 第1章

# イントロダクション

## 1.1 はじめに

非平衡定常状態(Nonequilibrium Steady States、以降 NESS と略記する)は非平衡状 態の中でも特殊な状態であり、身近にありふれた現象として広く知られている。NESS と は、平衡ではないものの、マクロに見て時間変化しない状態のことである。例えば、電源 (電池)に繋いだ抵抗に定常電流が流れ続けているような状態が挙げられる。他にも、一 定の水流が流れ続けている状態や、高温熱源から低温熱源に一定の熱が流れ続けている状 態などが挙げられる。これらの例から分かるように、NESS は全系が均一な平衡状態へ緩 和しようとする途中の、過渡的な状態である。上の1つ目の例で説明すると、定常電流が 流れている状態も、やがて電池の起電力がなくなると電流は流れなくなり、抵抗は外界と 同じ温度の平衡状態に達する。

上で挙げた例のように、NESS は身近にありふれた現象であり、応用上でも重要である ため、非平衡の研究の中でも非常に多く研究されている。しかし、完成された理論が存在 する平衡状態とは違って、NESS の一般論は現時点では存在しない。非平衡と言っても扱 う対象は多種多様であるため、NESS のアプローチの仕方は様々であり、先行研究は古い ものから新しいものまで膨大である。

#### 1.1.1 NESS の先行研究

NESS の研究は、古くはアインシュタインのブラウン運動の研究 [1] や、オンサーガー の相反定理 [2,3] が出発点であり、局所平衡仮説を前提にした(線形)非平衡熱力学の研 究 [4,5] が発展した。非平衡熱力学には、熱伝導におけるフーリエ則や物質の拡散におけ るフィックの法則など、時間発展を記述する現象論的方程式が含まれている。この方程式 を解くことで、具体的に NESS を求めることができる。NESS が実現する条件を変分原 理で書き換えることもでき、最小エントロピー生成原理が有名である [4,5] \*1。しかし、 この変分原理は後に線形非平衡の範囲であっても、常に成立するわけではなく、ごくあり ふれた例でも成り立たない場合が存在することが示されている [8,9]。

現象論的方程式に含まれていた輸送係数などの線形応答係数を、ミクロな力学で一般論 として表すことに成功したのが、久保公式である [10,11]。ただし、久保公式は外場が無 限小の場合で定式化されており、外場が有限の場合については何も主張していない。さら に、久保公式は線形応答係数を平衡状態の密度演算子(分布関数)を使って求める公式な ので、たとえ外場が無限小の場合であっても、どのような非平衡状態が実現しているかに ついては久保公式だけからは分からない。

線形非平衡を超えた非線形非平衡領域の現象論は、拡張された熱力学(extended thermodynamics)などの試みが有名である [12–15]。これらの試みは、平衡熱力学で現 れたエントロピーを指定する変数に、熱流などの流れを表すパラメータを加えて、線形非 平衡の理論では説明できなかった非平衡現象を説明することを目的にしている。しかし、 これらの試みに現れる「非平衡エントロピー」や「非平衡温度」が実際の物理系の測定 可能な量とどのように関係するのかは、現時点では明確ではない。先行研究 [16] によれ ば、[13] の「非平衡エントロピー最大原理」により定まる非平衡分布関数が、ボルツマン 方程式の定常解と整合しないことが明らかになった<sup>\*2</sup>。

これとは別のアプローチで、「過剰熱」を出発点にして、平衡熱力学と同様の枠組みが NESS にも存在することを目標にしている定常状態熱力学(steady state thermodynamics)も有名である [17–24]。拡張された熱力学と最も異なる点は、操作的な定義を尊重し たところである。しかし、一般の NESS だとこの枠組みでは非平衡のエントロピーは存 在しないという否定的な結果が得られている [23,24]。

一方で、統計力学的な視点から、カノニカルアンサンブルを拡張した定式化も存在する。 先行研究 [25] は、NESS の密度演算子  $\hat{\rho}^{\text{NESS}} \approx \hat{\rho}^{\text{NESS}} = \frac{1}{Z^{\text{NESS}}} \exp\left[-\beta(\hat{H} - \lambda \hat{J})\right]$ のように書いている。ここで、系のハミルトニアン  $\hat{H}$ 、全電流演算子  $\hat{J}$ 、 $\beta$  は逆温度、 $Z^{\text{NESS}}$ は規格化定数である。パラメータ  $\lambda$  を調整することにより、この密度演算子における電流期待値を調整することができる。つまり、平衡統計力学を素直に拡張して、「定常電流を指定したカノニカルアンサンブル」を構成するのである。ただし、[25] のハミルトニアンは空間並進対称性を持つために、 $\lambda$ を調整したとしても、本質的に平衡状態を並進運動させたものと変わらない。筆者も、不純物散乱により並進対称性を破るハミルトニアンを用いて、このアンサンブルを考えたことがある [26]。メゾスコピック系の電気伝導のモデル  $\mathbf{2}$ 

<sup>\*1</sup> 線形非平衡の範囲の変分原理は他にも存在する。例えば、オンサーガーの最小発熱原理 [6] も有名であ る。総合報告 [7] を参照されたい。

<sup>\*&</sup>lt;sup>2</sup> この先行研究では、定常熱流を持つ分布関数(mass flow はない)を解に持つボルツマン方程式を摂動的 に解き、NESS の分布関数を計算している。

だと考えると、伝導チャネルによって異なる電圧をかけるような状態が実現し、実際の物 理的な状況とはかけ離れた不自然な NESS であることが分かった。他にもこれに近いア プローチとして、ズバーレフ・マクレナンの非平衡統計演算子の方法など [27–30] が挙げ られる。ズバーレフ・マクレナンの非平衡統計演算子とは、上のアンサンブルの  $\beta\lambda \hat{J}$ を、  $\int_{-\infty}^{t} dt' e^{\epsilon t'} \hat{j}_{H}(x,t') \nabla X(x)$  に置き換えたものである。ここで、 $\varepsilon$  は収束因子であり(無限 小の正定数)、 $\hat{j}_{H}(x,t)$  は系に出入りするエネルギー流演算子(あるいは電流演算子)のハ イゼンベルグ表示であり、X(x) は位置 x における逆温度、あるいは逆温度に化学ポテン シャルをかけたものなど(つまり、 $\nabla X(x)$  は熱力学的駆動力)を表す。この方法も線形 非平衡の範囲では久保公式と関係するなど明確な意味を持つものの、平衡から遠く離れた 場合にどのような意味を持つかは明らかになっていない [31]。

無限系の量子論からの数学的なアプローチによる NESS の研究も存在する [32–34]。これらはすべて、完全な空間並進対称性を持つ系であるため、物理的には平衡状態と本質的に同じである。

Keldysh グリーン関数を用いた NESS の解析も存在する [35–37]。メゾスコピック系の ランダウアー・ビュティカーによる定式化と本質的に同じ結果 [35,36] であるものや、量 子ドット1つで多重散乱がないものの解析が中心である [37]。[35,36] の NESS は、本研 究で扱う系と本質的に同じである。しかし、粒子溜領域まで含めた全系しか見ておらず、 NESS が実現している空間領域に着目していない。

分子動力学シミュレーションによる NESS の解析も存在する [38-40]。古典粒子系の状態の時間発展を計算機上で直接追っていく方針である。分子間力や散逸も含めた多体問題のシミュレーションが可能であり、外場を強くした非線形非平衡領域も調べることができる。一方で、定常状態の分布関数をこの方針で求めるには、状態の時間発展から高次元の相空間の構造を調べることになるため、事実上不可能である。

古典確率過程のモデルにより NESS を解析する研究も多い。古典力学や量子力学から 出発するのではなく、確率過程で本質が捉えられると期待できる系に限定して調べよう ということである。例えば、driven lattice gas やその空間を1次元にした asymmetric simple exclusion process (通称、ASEP) [41–51] が有名である。ASEP とは、1次元の 格子上を粒子が互いに隣り合わないという条件のもとでのランダムウォークのことであ り、数理物理的な興味だけでなく、交通流や界面成長のモデルとしても興味を持たれてい る。非平衡相転移など様々な興味深い結果が得られているが、電気伝導などのような本研 究で対象とする NESS とは種類が異なっている。他にも、外場のかかったランジュバン 方程式 [18,31] により、NESS を実現させる方針もある。この方針も確かに NESS が実現 するが、平衡状態の場合と同じホワイトノイズを仮定しており、平衡近傍以外では、その 仮定の妥当性は極めて不明瞭である。

近年、量子マスター方程式の定常解の解析も進められている [52-60]。多体系の量子マ

スター方程式は通常解析が困難であるため、熱浴との相互作用が弱い近似を行なうことが ほとんどである。しかし、この近似のもとでは、たとえ2つの熱浴が同じ平衡状態だとし ても、着目系は熱浴と同じ平衡状態にならないという欠点がある。さらに、この近似のも とでの定常状態では、低温側から高温側に熱が流れるような、熱力学第2法則に反する状 態が実現してしまう場合があることも示されている [56]。この欠点を解決するようなセッ トアップも提案されている [61]。しかし、このセットアップは、線形非平衡でサイト間相 互作用が熱浴との相互作用と同じ程度に弱い場合の、極めて限定的な状況である。

## 1.2 本研究の目的

本論文の目的は、メゾスコピック系における電気伝導という、実験に立脚したモデル の、NESS のフォン・ノイマンエントロピーを求めることである。

#### 1.2.1 なぜメゾスコピック系で NESS を解析するのか?

メゾスコピック系とはミクロ系とマクロ系の中間のサイズを持つ系のことである [62-79]。メゾスコピック系の研究は、1980年代~1990年代に特に集中的に研究された。 メゾスコピック系の研究範囲は幅広いが、その中でも本研究における NESS の研究対象 となるのは、量子細線(Quantum Wire、以下 QWR と略記する)である。2つの粒子 溜に接続された伝導体があり、2つの粒子溜に電圧をかけることで、QWR で NESS が 実現する(図 1.1)。状況だけを見れば、マクロな抵抗に電池を繋いだ場合と同じように思 われるが、メゾスコピック系だと伝導体のサイズが非常に小さく、流れている電子の量子 コヒーレンスが伝導体の内部で保たれている。この量子コヒーレンスがコンダクタンスの 値に寄与するために、メゾスコピック系では伝導体の形状によってコンダクタンスの値が 大きく変わることも知られている。他にも、磁場を印加することで、コンダクタンスの値 を通して、アハラノフ・ボーム効果を見ることもできる。これは固体中の電子でアハラノ フ・ボーム効果が初めて観測されたことでも話題になった [80]。メゾスコピック系とは要 するに、系のサイズを小さくすることで、電子の波としての振る舞い(干渉効果)が現れ るような系を指す。

このようにメゾスコピック系は、理論と実験が豊富に存在しているため、理論で扱うモ デルは実験に基づいたものである。さらに、確率過程のモデルとは異なり、(量子)力学に 従うモデルであるという長所がある。他にも、熱流のある系の NESS に比べると、mass flow のある系の NESS の解析は一般に難しいが、メゾスコピック系の NESS は mass flow (電流)のある NESS である。それに加えて、メゾスコピック系の NESS は不純物散乱に より空間並進対称性のない系になっており、非自明な NESS が実現する。これらの長所



図 1.1 量子細線(QWR)の実験の模式図。[76] より引用した。

を全て備えていて、NESS の量子状態があらわに知られているのは、メゾスコピック系の みである。一方で、メゾスコピック系は電子相関やフォノンによる散逸などがない系であ るという欠点も持っている。それらまで全て備えた NESS は、多体問題の極めて一般的 な問題になってしまい、ミクロな力学から具体的に解析するのは事実上不可能である。メ ゾスコピック系は、たとえこれらのうち一部の条件を持っていなくても、実験と整合的な 系であるため、NESS の性質を具体的に調べることに適しているはずである。

非平衡統計力学としてどのような系がまともであるか、ということは NESS の一般論 が現時点では存在していない以上、未解決の問題であるが、実験に立脚した理論があるメ ゾスコピック系は、量子状態としてもまともな NESS が実現していると期待してよいだ ろう。特にメゾスコピック系では、平衡近傍だけでなく、平衡から遠く離れた NESS まで 解析することができる。

#### 1.2.2 部分系のフォン・ノイマンエントロピーの定義と性質

フォン・ノイマンエントロピーの定義

$$S := -\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\ln\hat{\rho}]$$

(1.1)

のように定義される。部分系のフォン・ノイマンエントロピーは、部分系の縮約密度演算 子により定義される。フォン・ノイマンエントロピーは、ミクロ状態の個数(状態数)と いう意味を持っている。この状態数は、縮約密度演算子が着目系におけるヒルベルト空間 内で、実質的に利用している基底の個数(の対数)を意味する\*3。着目領域を変化させる ことで、フォン・ノイマンエントロピー(つまり、状態数)のサイズ依存性を調べること ができる。

#### 全系が特殊な場合の、フォン・ノイマンエントロピーの性質

さらに、特殊な場合は、フォン・ノイマンエントロピーについて次の2つの性質が知ら れている。

- (i) 全系が平衡状態のとき、部分系におけるフォン・ノイマンエントロピーは、全系と同じ平衡状態の熱力学エントロピー S<sup>eq</sup> に一致する。これは、全系が平衡状態であれば部分系も全系と同じ平衡状態であるという、平衡状態の基本的性質からの帰結である。
- (ii) 全系が純粋状態のとき、部分系におけるフォン・ノイマンエントロピーは、全系が 平衡か非平衡かにかかわらず、エンタングルメントエントロピーに一致する。

エンタングルメントエントロピーとは、着目領域とそれ以外の領域との間のエンタングル メントを定量化する尺度である。エンタングルメントエントロピー [82–134] は近年、物

\*<sup>3</sup> このことの理由は次のとおりである。まず、密度演算子が有限温度の平衡状態(Gibbs 状態)の場合を 考える。このときのフォン・ノイマンエントロピーは、本文でも触れたように、熱力学エントロピーに一 致する。ミクロカノニカル分布 ρ<sup>mc</sup> のときの S は、ボルツマンの原理から、着目系のヒルベルト空間の うちエネルギー殻に含まれる基底の個数(の対数)そのものである。カノニカル分布 ρ<sup>can</sup> については、 系のハミルトニアンを Ĥ、逆温度を β とすれば

$$\hat{\rho}^{\operatorname{can}} := \frac{\exp\left(-\beta\hat{H}\right)}{Z} = \sum_{i} \frac{\exp\left(-\beta E_{i}\right)}{Z} \left|E_{i}\right\rangle \left\langle E_{i}\right| \tag{1.2}$$

のように表せる (Z は分配関数、 $\hat{H}$  の固有値を  $E_i$  ( $E_i \leq E_{i+1}$  の順に並べておく)、対応する固有ベク トルを  $|E_i\rangle$  とした)。 $\hat{\rho}^{can}$  の次元は着目系のヒルベルト空間の次元と等しいが、そのうち実質的に利用 している基底の個数 (の対数) は S で見積もることができる。つまり、ミクロカノニカル分布のときのエ ネルギー殻に対応する基底がマクロ物理量の期待値に主に寄与し、他は熱力学極限でゼロになるため寄与 しなくなるのである。絶対零度の平衡状態の場合だと、2章の結果によれば、 $S = O(\ln L)$  (L は着目系 のサイズ)のように振る舞う。この場合も基底の個数 (の対数)を S で見積もることができ、その状態数 は L のべき乗程度となっており、着目系のヒルベルト空間の次元  $2^L$  に比べて非常に小さい。密度行列 くりこみ群などでは、この性質を利用して、実質的に利用している基底のみを取り出しており、着目系よ りもずっと大きな系の計算が可能であることが知られている [81]。しかしながら、S が基底の個数 (の対 数)の良い尺度になっているかどうかには微妙な問題も存在する。実質的に利用している基底は  $\hat{\rho}$ の固有 ベクトルを使って張ることができるが、それに対応する  $\hat{\rho}$ の固有値が、互いにほぼ等しい値を持つとは限 らないのである。例えば、これら固有値のうち1つだけが大きな値をとり、他の固有値が互いにほぼ等し い値を持つ場合、状態数の良い尺度ではなくなる。 性物理、素粒子物理にかかわらず、幅広い分野で興味を持たれており、非平衡系でも様々 なモデルで調べられている(本研究との比較は 1.3 節参照)。

#### 1.2.3 メゾスコピック系の NESS のフォン・ノイマンエントロピー

本研究で扱うメゾスコピック系のモデルは、粒子溜の化学ポテンシャル差 Δμ により NESS が実現する。本研究の目標は、NESS が実現している部分系のフォン・ノイマン エントロピーを計算することにより、NESS を構成するミクロ状態の状態数を調べるこ とである。NESS が実現している部分系を取り出す理由は、粒子溜まで含めてしまうと、 粒子溜が平衡状態であることによる寄与が入ってしまうからである。フォン・ノイマンエ ントロピーを計算する際に、着目系の大きさを変えることで、状態数のサイズ依存性を知 ることができる。

パラメータの値によっては、1.2.2 節の性質 (i) や (ii) に該当する場合が存在する。全系 が平衡状態のときは ( $\Delta \mu = 0$ )、上の性質 (i) より、部分系のフォン・ノイマンエントロ ピーは熱力学エントロピー *S*<sup>eq</sup> に一致する。これは系が自然に持つべき条件である。

粒子溜が絶対零度の場合、全系が純粋状態になるために、上の性質 (ii) より、全系が平 衡か非平衡かにかかわらず、部分系のフォン・ノイマンエントロピーはエンタングルメン トエントロピーという意味を持つ。NESS のエンタングルメントエントロピー(あるい は、フォン・ノイマンエントロピー)を調べた先行研究は存在するが、本研究との違いは 1.3.1 節を参照されたい。本研究は、粒子溜が絶対零度の場合に限れば、NESS のエンタ ングルメントエントロピーを調べるという意味も持っている。

メゾスコピック系のモデルでは、平衡から遠く離れた非線形非平衡領域まで調べること ができる(具体的な平衡から遠く離れる条件は後の章を参照)。状態数という、平衡状態 で本質的であった物理量が、平衡から遠く離れた NESS でどのように振る舞うかを調べ ることが本研究の目標である。

#### 1.3 先行研究と本研究の関係

本研究では NESS でフォン・ノイマンエントロピーを調べる。この節では、先行研究の 中でも本研究と関係するものについて論ずる。

#### 1.3.1 局所平衡仮説に基づく NESS のエントロピー

局所平衡仮説とは、全系が非平衡状態であったとしても、仮想的に空間的に細かく分割 した個々のセルの内部では熱平衡状態とみなすことができる、という仮説である [4,5]。 さらに、各時刻でもそれぞれのセルで平衡状態とみなせることも仮定している。つまり、 空間の各点、各時刻 (**r**, t) で熱力学量が well-defined である、という仮定である。局所平 衡仮説は、主に流体力学が有名であるが、それ以外にも化学や生物学、工学など、非常に 幅広い分野で応用されている。局所平衡仮説の範囲でも NESS は実現するため、NESS における物理量も具体的に調べることができる。

局所平衡を仮定すると、全系のエントロピーは

$$S(t) = \int s(\boldsymbol{r}, t) dV \tag{1.3}$$

のように、エントロピー密度 *s*(*r*,*t*) を全領域に渡って積分したものになる。これは、複数の平衡熱力学のエントロピーの和に過ぎない。時間とともにエントロピーが生成したとしても、各瞬間で上の関係が成り立つので、エントロピーだけを見ても平衡状態と本質的に変わらない情報しか得られない。たとえ NESS が実現しているとしても、局所平衡を仮定したために、エントロピーには平衡エントロピー以上の意味はないのである<sup>\*4</sup>。

# 1.3.2 「過剰熱」を出発点にした、定常状態熱力学(steady state thermodynamics)

「過剰熱 (excess heat)」を出発点にした、定常状態熱力学 (steady state thermodynamics) [17-24] も NESS の研究の中では有名である。大野とパニコニは、非平衡定常状 態においても、平衡熱力学に対応する現象論的枠組みが存在することを提唱した [17]。こ の現象論的枠組みは、「過剰熱」を出発点にしている。例として、ある NESS から、熱浴 の温度を少しだけ変えて、別の NESS に遷移するような過程を考える。「過剰熱」とは、熱 浴から系に供給される熱のうち、NESS を維持するのに必要な「維持発熱(house-keeping heat)」を差し引いたものとして定義される。大野らは「過剰熱」が NESS 間の状態遷移 について本質的な量であると予想しており、「過剰熱」を使えば、平衡熱力学と同様の理論 体系を構成できる可能性を提唱したのである\*5。たとえば、「過剰熱」を使えば平衡状態の 場合と同様に、NESS のエントロピーが定義できる、と予想した。この予想を確かめるた めに、様々なモデル(確率過程のモデルや古典力学など)で具体的に調べられた [18-24]。 平衡から比較的近い場合には一定の成果はあったものの [20]、一般の非平衡状態につい ては否定的な結果が得られている [23,24]。先行研究 [23] によると、過剰エントロピー 生成がパラメータ空間の履歴に依存することが、Markov jump process の設定(Driven lattice gas も含む確率過程のモデル)で示された。履歴に依存するということは、始状態 と終状態を固定したとしても、状態遷移の仕方によってエントロピーの値が変わってしま

<sup>\*4</sup> なお、エントロピー生成が不可逆な量であるから、非平衡の研究ではエントロピーそのものよりもむし ろ、エントロピー生成に着目するものが多い

<sup>\*&</sup>lt;sup>5</sup> 具体的なモデルであったが、同様の提案はすでにランダウアーによって提唱されていた [135]。

うことを意味する。つまり、この設定だと、非平衡エントロピーのようなスカラーである 状態量が一般の非平衡状態では存在しないことを示しており、その代わりにベクトルポテ ンシャルのような量の存在を示唆している。これと同様の結果が、後に量子マスター方程 式の設定でも示された [24]。

# 1.3.3 非平衡(量子クエンチ)でのエンタングルメントエントロピーの先 行研究

本研究の目的は、NESS が実現している部分系のフォン・ノイマンエントロピーを調べ ることであるが、これは非平衡状態のエンタングルメントエントロピーを調べる先行研究 とも大いに関係している。というのも、エンタングルメントエントロピーは、全系の状態 が純粋状態のときには、部分系のフォン・ノイマンエントロピーとして定義されるからで ある。

非平衡状態のエンタングルメントエントロピーは特に、孤立系での熱化過程(量子ク エンチなど)の文脈で非常によく研究されており、物性物理学 [121–129] から、場の量子 論や量子重力理論 [130,131] までを含む文脈で、エンタングルメントエントロピーが研究 されてきた。これらの先行研究は、主に孤立量子系の熱平衡化に関する研究である。は じめに多体系の量子純粋状態を用意して、ある時刻から全系をユニタリ時間発展させる と、十分長い時間待てば全系は平衡状態に緩和する、というのが孤立量子系の熱平衡化 である [121]。平衡状態に緩和する途中の、エンタングルメントエントロピーの時間依存 性が主に調べられており、L を固定したときに、 $S_L \sim t$  (t はクエンチした直後からの時 間)のように振る舞い、十分時間が経つと  $S_L$  は平衡エントロピーに一致することが知ら れている。一方で、多体局在転移で知られる、ランダムな磁場のかかったハイゼンベルグ 模型などでは、 $S_L \sim \ln t$ のように振る舞うことも調べられている [124,126,127]。これ らいずれの系でも、時間発展の全てに渡り  $S_L \leq O(S_L^{eq}(E))$ が成り立っている。ここで、 $S_L^{eq}(E)$  は系のエネルギー E における平衡エントロピーである。

#### 1.3.4 NESS のフォン・ノイマンエントロピーの先行研究

NESS のフォン・ノイマンエントロピー(熱浴が絶対温度の場合は、エンタングルメン トエントロピー)も先行研究が存在する [132–134]。これらは本研究に直接関わるもので あるが、本研究と本質的に異なる点がある。それは、系が完全な空間並進対称性を持つと いうことである。そのためにこれらの系の NESS は、本質的に平衡状態を並進運動させ たものになってしまっている。

具体的には、[132] は [25] で導入された NESS のエンタングルメントエントロピーを解

析しているが、この NESS は本質的に平衡状態を並進運動させたものである。[133,134] は設定が非常に似ており、無限に大きい温度の異なる2つの熱浴を切り離して用意し、あ る時刻から時間発展させて NESS を構成している<sup>\*6</sup>。しかし、不純物による散乱などの、 並進対称性を破る機構が一切ないために、NESS とはいっても本質的には始めに用意した 2つの熱浴の平衡状態を表す密度演算子の積で書けるような自明な状態である<sup>\*7</sup>。

これらの先行研究で、 $S_L = O(S_L^{eq}(E))$ または $S_L = O(\sum_{\nu} S_L^{eq}(T_{res}^{\nu}))$ であることが示されている( $T_{res}^{\nu}$ は第 $\nu$ 番目の熱浴の温度)。これは、これらの NESS が本質的に平衡状態を並進運動させたものになっているためであり、非平衡特有の振る舞いは得られていない。

#### 1.4 本研究の特色

通常の実験で観察される NESS は、不純物・粗い壁・フォノンなどのような、対称性を 破る散乱が存在する。そのような散乱体による多重散乱のために、NESS は平衡状態を並 進運動させたものとは大きく異なり、非自明な状態になっている。本研究で解析するメゾ スコピック系における NESS は、不純物に由来する多重散乱により、平衡状態を並進運動 させたものとは大きく異なっている。このような非自明な NESS で、フォン・ノイマンエ ントロピーを計算したのは、本研究が初めてである。

#### 粒子溜が絶対零度 ( $T_{\rm res}^{ u}=0$ )の場合(第2章)

粒子溜が絶対零度の場合、平衡状態から遠く離れた非自明な NESS では、 $1 \ll L \leq L_{\rm C}$  で次のような関係式が成り立つことを示した [136]。

$$S_L = \eta(L)L|\Delta k_F| + O(\ln L) \tag{1.4}$$

ただし、 $\Delta k_F$  は粒子溜のフェルミ波数の差であり、 $\eta(L)$  は  $a \leq \eta(L) \leq 2a$  を満たしており、a は L と  $\Delta k_F$  に依存しない正の定数である。この結果より、

$$S_L \ge aL|\Delta k_F| + O(\ln L) \tag{1.5}$$

であるので、式(1.4)の振る舞いを準体積則(quasi volume law)と呼ぶことにする。 平衡状態の場合の結果  $S_L^{\text{eq}} = O(\ln L)$  と比べると、 $S_L > O(\sum_{\nu} S_L^{\text{eq}})$  となり、1.3.1 節で

<sup>\*6</sup> 細かいが、[133] では2つの熱浴に挟まれた有限サイトの領域が存在する。しかし、十分時間がたった後だと、有限サイトの領域の初期条件によらず、一様な NESS が構成される。これは熱浴が無限に大きいことを考えると、物理的には自明な結果である。[134] では、混合状態のエンタングルメントの指標であるネガティビティを主に計算している。不純物による散乱などが一切ないために、2つの平衡状態のネガティビティの平均値が得られる。

<sup>\*&</sup>lt;sup>7</sup> [25,132] の NESS と、[133] の NESS は同じ状態ではない。このことは、[33] が具体的な式を書き下 して示している。

述べた先行研究の結果  $S_L \leq O(\sum_{\nu} S_L^{eq})$  [121–134] とは定性的にも異なっている、はじめての結果である。これは、NESS におけるエンタングルメントエントロピーの異常な増大を示しており、並進対称性を破る多重散乱と平衡から遠く離れたことの2つが合わさって初めて、この異常な増大が生じる。

#### 粒子溜が有限温度 ( $T_{\rm res}^{\nu} > 0$ )の場合(第3章)

粒子溜が有限温度の場合、平衡状態から遠く離れた非自明な NESS では、 $1 \ll L \leq L_C$ で次のような関係式が成り立つことを示した。

$$S_L = \eta(L)L \int_{-\pi}^{\pi} f_\beta(\varepsilon_k - \mu^+) [1 - f_\beta(\varepsilon_k - \mu^-)] dk + O(L)$$
(1.6)

ただし、 $\eta(L)$ は絶対零度の結果に出てくるものと同じものである。 $f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^{\pm})$ は、それ ぞれ左右の粒子溜のフェルミ分布関数である。絶対零度の場合とは違って有限温度の場合 は、全系の状態が混合状態であるために、フォン・ノイマンエントロピー  $S_L$ はエンタン グルメントエントロピーではなくなるが、着目領域のミクロ状態の状態数という意味は変 わらず持っている。有限温度の平衡状態では、 $S_L = O(L)$ (示量的)であることと比較す ると、 $\eta(L)$ の項は  $S_L$ に対する補正項を与える。

# 第2章

# 粒子溜が絶対零度の場合

この章では、一次元メゾスコピック伝導体における NESS の *S<sub>L</sub>* を調べる。一次元メゾ スコピック伝導体とは、2 つの粒子溜に接続された、不純物を有する長い量子細線 (QWR) のことである [62–79]。 2 つの粒子溜の化学ポテンシャルの差によって、QWR に定常電 流 *J* が流れ込み、NESS が実現される。この章では特に、粒子溜が絶対零度の場合を調べ る。粒子溜が有限温度の場合は、第3章で調べる。その結果、次のことが分かった。

平衡状態では、 $S_L^{\text{eq}}$ (平衡のときの $S_L$ )は対数則 $S_L^{\text{eq}} = O(\ln L)$ に従う。一方で、平衡状態から遠く離れた非自明なNESS(定義は後述)では、次のような関係式が成り立っている [136]。

 $S_L の準体積則(絶対零度)$  $S_L = \eta(L)L|\Delta k_F| + O(\ln L) \quad \text{for } 1 \ll L \le L_C$ (2.1)

ここで、 $\Delta k_F$ は2つの粒子溜のフェルミ波数の差、 $L_C$ はQWRの長さ、 $\eta(L)$ はLの関数であり、以下の性質を持つ。

$$\eta(L)$$
の性質  
 $1 \ll L < L_{C}$ において、  
(i)  $\eta(L)$ は $\Delta k_{F}$ に依存せず、  
(ii)  $L$ が増加するにつれて徐々に減少し、  
(iii)  $a \& L \ge \Delta k_{F}$ に依存しない正の定数として  
 $a \le \eta(L) \lesssim 2a$  (2.2)  
の3つを満たす。

(2.1) 式、(2.2) 式により、 $S_L \ge aL|\Delta k_F| + O(\ln L)$  であるので、我々は式 (2.1) を準体 積則(quasi volume law)と呼ぶことにする。並進対称性を破る多重散乱と、平衡から遠 く離れたことが合わさって初めて、この異常な増大が現れる。

#### 2.1 モデルのハミルトニアンと量子状態

絶対零度の2つの粒子溜に接続された長いQWR(伝導体)を考える。実際の粒子溜は 通常は2次元系であるために、粒子溜を含めた全系のハミルトニアンは2次元のハミルト ニアンで表される。先行研究[74,79]によると、このハミルトニアンから実効的な1次元 ハミルトニアンを導出することができる<sup>\*1</sup>。多体相互作用が無視できるなら、その有効 ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{tot}} := -\sum_{x} (\hat{c}_{x}^{\dagger} \hat{c}_{x+1} + h.c.) + \sum_{|x| \le L_{\text{C}}/2} v_{x} \hat{c}_{x}^{\dagger} \hat{c}_{x}$$
(2.3)

となる。ここで、 $\hat{c}_x^{\dagger}$ 、 $\hat{c}_x$ はサイトx(xは整数)における電子の生成、消滅演算子である。 中心がx = 0にある長さ $L_C$ のQWR(詳細については図 2.1 と図 2.3 参照)には、不純物由来の、ガウス分布に従うランダムポテンシャル $v_x$ が存在する。 $v_x$ のランダム平均はゼロ、標準偏差をWとする(ただし、 $v_x$ の平均値がゼロとなるようにする<sup>\*2</sup>)。

ハミルトニアン(2.3)は生成消滅演算子の2次形式で書けているので、一粒子シュレー ディンガー方程式

$$-\psi(x-1) - \psi(x+1) + v_x\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \tag{2.5}$$

を導くことができる。 $\varepsilon$ と  $\psi(x)$  はそれぞれ一粒子エネルギーと一粒子波動関数である。

式 (2.5)の境界条件は、散乱状態と束縛状態をとる。散乱状態  $\varphi_k(x)$  は波数  $k (-\pi \le k < \pi)$  によりラベル付けされ、その一粒子エネルギーは  $\varepsilon_k = -2\cos k$  となる (図 2.1)。

$$v_x - \sum_x v_x / L_{
m C}$$

(2.4)

<sup>\*1</sup> 具体的には、全系の(2次元かもしくは3次元の)ハミルトニアンを出発点にして、いくつかの仮定の もとで、電子の場の演算子を2つに分解する。1つは(多体相互作用が無視できるなら)ハミルトニアン (2.3)に従う空間1次元の場であり、QWRを通過するモードを表すのに対し、もう1つはそれ以外の場 (空間2次元もしくは3次元)であり、左右の粒子溜に局在するモードなどを含む。これら2つの場の間 の相互作用を表す項は、QWR 領域では実質的に無視できることが示せるので、1次元の有効ハミルトニ アン(2.3)のみを考えれば良いことがわかる。

<sup>\*2</sup> 数値計算において、ハミルトニアン (2.3) における  $v_x$  を以下のように定める。 $v_x$  をランダムに生成した あと、各  $v_x$  を

のように置き換える。これは、平均値  $\sum_x v_x/L_C$  がゼロではないことによる効果を除去するためである。例えば、もし平均値が正であるとすると、電子は QWR から押し出されようとしてしまい、物理量の値(例えば、フォン・ノイマンエントロピー)が変化してしまう。



図 2.1 この図は  $|\varphi_k(x)|^2$  を図示したものである。W = 0.08 のときの  $\varphi_k(x)$  について 2 つ例示している。 $|t_k|^2 \simeq 1$  である共鳴点  $k = 0.82128 \cdots$ (赤色)と、共鳴点と 隣接する非共鳴点の中間点  $k = 0.82479 \cdots$ (青色)の場合である。図では、QWR 内  $(|x| \leq L_C/2)$  での  $|\varphi_k(x)|^2$  と、粒子溜  $(|x| > L_C/2)$  での入射波と反射波の 2 乗をプロットしている。文献 [136] より引用した。

散乱状態  $\varphi_k(x)$  の境界条件は、k > 0 として

$$\sqrt{2\pi}\varphi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r_k e^{-ikx} & (x \to -\infty) \\ t_k e^{ikx} & (x \to \infty), \end{cases}$$
(2.6)

および

$$\sqrt{2\pi}\varphi_{-k}(x) = \begin{cases} t_{-k}e^{-ikx} & (x \to -\infty) \\ e^{-ikx} + r_{-k}e^{ikx} & (x \to \infty) \end{cases}$$
(2.7)

のように定める。ここで、 $|t_k|^2$  ( $|r_k|^2$ ) は透過(反射)係数(あるいは、透過率・反射率と も呼ぶ)である。 $t_k, r_k$  はユニタリ性とハミルトニアン (2.3) の時間反転対称性から、保 存則

$$\begin{cases} |t_k|^2 + |r_k|^2 = 1\\ r_{-k}t^*_{-k} + r^*_k t_k = 0\\ t_k = t_{-k} \end{cases}$$
(2.8)

を満たす\*3。

一方で、束縛状態 { $\phi_b(x)$ } $_b$  (b = 1, 2, ...)の境界条件は、| $\phi_b(x)$ |  $\rightarrow 0$  ( $|x| \rightarrow \infty$  のと き)とする。ここで、束縛状態 { $\phi_b(x)$ } $_b$  は b によりラベル付けされ<sup>\*4</sup>、一粒子エネルギー  $\varepsilon_b$  は、 $\varepsilon_b < -2$  または  $\varepsilon_b > 2$  を満たす。

<sup>\*&</sup>lt;sup>3</sup> 実際の数値計算で、これらの保存則が非常に良い精度で満たされていることは確認済みである。数値誤差 は L<sub>C</sub>, W の増大とともに大きくなる傾向がある。

<sup>\*&</sup>lt;sup>4</sup> 特に  $L_{\rm C} = 401$  のとき、束縛状態の個数は W = 0.05 で約 20 程度、W = 0.08 で約 25 程度である(ランダムポテンシャルの realization に依存する)。

これらの一粒子波動関数は互いに直交し\*5、

$$\sum_{x} \varphi_{k_1}^*(x) \varphi_{k_2}(x) = \delta(k_1 - k_2)$$
(2.9)

$$\sum_{x} \phi_{b_1}^*(x)\phi_{b_2}(x) = \delta_{b_1,b_2} \tag{2.10}$$

$$\sum_{x} \varphi_{k}^{*}(x)\phi_{b}(x) = 0$$
(2.11)

完全性(closure relation)

$$\int_{-\pi}^{\pi} dk \varphi_k^*(x) \varphi_k(y) + \sum_b \phi_b(x)^* \phi_b(y) = \delta_{x,y}$$
(2.12)

を満たす\*6

メゾスコピック伝導系の標準モデルに従い [62–79] 、絶対零度における全系の量子状態 | $\Psi_{\text{tot}}$ 〉を次のように定める。 $\hat{c}_k^{\dagger}$  ( $\hat{c}_b^{\dagger}$ )を散乱(束縛)状態の生成演算子とすると、| $\Psi_{\text{tot}}$ 〉は、 $-k_F^- \leq k \leq k_F^+$ の  $\varphi_k(x)$  と  $\varepsilon_b < -2$ の  $\phi_b(x)$  により占有されている(図 2.2):

$$|\Psi_{\text{tot}}\rangle := \prod_{-k_F^- \le k \le k_F^+} \hat{c}_k^{\dagger} \prod_{b \ (\varepsilon_b < -2)} \hat{c}_b^{\dagger} |0\rangle$$
(2.13)

ここで、 $k_F^+$  ( $k_F^-$ ) は左(右)の粒子溜のフェルミ波数、すなわち

$$\varepsilon_{k^{\pm}_{\pi}} = \mu^{\pm} = \overline{\mu} \pm \Delta \mu/2 \tag{2.14}$$

であり、 $\overline{\mu} := (\mu^+ + \mu^-)/2$  である。全系の量子状態  $|\Psi_{tot}\rangle$  (2.13) は一粒子状態の一つのスレーター行列式で書けており、 2 点相関関数は

 $\langle \hat{c}_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2} \rangle = \delta(k_1 - k_2) \Theta(-k_F^- < k_1 < k_F^+)$ (2.15)

$$\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_b \rangle = 0 \tag{2.16}$$

$$\langle \hat{c}_{b_1}^{\dagger} \hat{c}_{b_2} \rangle = \delta_{b_1, b_2} \Theta(\varepsilon_{b_1} < -2) \tag{2.17}$$

のように表せる。ただし、 $\Theta$  は階段関数であり、 $\langle \bullet \rangle := \langle \Psi_{tot} | \bullet | \Psi_{tot} \rangle$  を表す。その他の

<sup>\*&</sup>lt;sup>5</sup> これらの一粒子波動関数が直交することの証明は、例えば [137] の 2 章や 10 章を参照。この文献では直 交性だけでなく、完全性についても示されている。

<sup>\*6</sup> この完全性条件を数値誤差の推定のために用いる。後の節で計算する物理量の数値誤差は主に、波動関数 と数値積分の計算由来である。パラメータ領域は、 $0.3 \leq G \leq 0.7 \ge L_{\rm C} \gg 1$ となる非自明な場合(後 述)を調べるが、この場合(完全性条件により確認される)数値誤差が  $L_{\rm C}$ の増大とともに大きくなって しまう。これは、 $\varphi_k(x)$ がkに対して鋭敏に依存するためである。なので、実際の数値計算は  $L_{\rm C} = 401$ で行なった。完全性条件が実際に計算したすべての W について良く満たされていることも確認済みであ る。



図 2.2 式 (2.14) に現れる  $\mu^{\pm}$ 、 $k_{F}^{\pm}$ 、( $\overline{\mu}$ ,  $\Delta\mu$ )の関係を表す図。全系の量子状態  $|\Psi_{tot}\rangle$ は、k > 0については  $0 < k < k_{F}^{+}$ の範囲(つまり、 $\mu^{+}$ より下側)に電子が占有されており、k < 0については  $-k_{F}^{-} < k < 0$ の範囲(つまり、 $\mu^{-}$ より下側)に電子が占有され有されており。

2点相関関数はゼロとする。さらに、4点相関関数は次のように2点相関関数に分解できることを仮定する:

$$\langle \hat{c}_{x_1}^{\dagger} \hat{c}_{x_2} \hat{c}_{x_3}^{\dagger} \hat{c}_{x_4} \rangle = \langle \hat{c}_{x_1}^{\dagger} \hat{c}_{x_2} \rangle \langle \hat{c}_{x_3}^{\dagger} \hat{c}_{x_4} \rangle + \langle \hat{c}_{x_1}^{\dagger} \hat{c}_{x_4} \rangle \langle \hat{c}_{x_2} \hat{c}_{x_3}^{\dagger} \rangle$$

$$(2.18)$$

他の相関の場合でも同様である。この関係式(2.18)から、2点相関関数の値を定めれば、 全系の量子状態も定まることが分かる\*<sup>7</sup>。さらにこの関係式は、後で詳しく述べるよう に、フォン・ノイマンエントロピーなどの物理量を数値計算により求める際にも威力を発 揮する。

 $\Delta \mu < 0$ の場合は、 $\Delta \mu > 0$ のときのランダムポテンシャルの配置を、x = 0を中心 に左右反転させた場合と本質的に同じなので、 $\Delta \mu \ge 0$ を仮定しても一般性を失わない。 よって、 $\Delta k_F := k_F^+ - k_F^- \ge 0$ である。 $\Delta \mu > 0$ であれば NESS が実現される。

<sup>\*&</sup>lt;sup>7</sup> 無限系の場合、いくつかの注意が必要なため、多体状態は式 (2.13) のように定義するのではなく、式 (2.15)-(2.17) (これらは無限系であっても問題はない [138]) で定義すべきである。実際には、全ての計 算は式 (2.15)-(2.17) のみを使って行なった。数値計算では、波数 k を短い間隔で離散化しているが、計 算結果がその間隔の長さに依存しなくなるまで細かくとった。



図 2.3 この図では、ハミルトニアン (2.3) で用いられている各サイトを丸で表している。(a) は粒子溜を含めた全系を表しており、紫色の領域が QWR (長さが  $L_{\rm C}$ 、サイト数も  $L_{\rm C}$ ) であり、水色が粒子溜領域を表している。QWR 領域(紫色)にのみ、ランダムポテンシャル  $v_x$  が存在する。さらに、原点 x = 0 がちょうど QWR の中央のサイトとなるように、 $L_{\rm C}$  を奇数にとる。QWR 領域の端点は、 $\pm L_{\rm C}/2$  (半整数) である。(b) は QWR の内部を表している ( $L \leq L_{\rm C}$ )。図のように、x = 0 が中心で長さが L (奇数) の部分系 A= [-L/2, L/2] を定める。部分系 A 内のサイト数は L 個であり、その端点は  $\pm L/2$  (半整数) である。文献 [136] より引用した。

#### 2.2 フォン・ノイマンエントロピー

全系の量子状態  $|\Psi_{tot}\rangle$  を仮定して、その  $S_L$  を調べる。図 2.1 のように、x = 0 を中心 とする、長さ L の部分系 A:= [-L/2, L/2] をとる。図 2.3(b) のように、部分系 A 内のサ イト数は L 個である。A の縮約密度演算子を  $\rho_L$  をすると、そのフォン・ノイマンエント ロピーは

 $S_L := - \mathrm{Tr}[\hat{
ho}_L \ln \hat{
ho}_L]$ 

(2.19)

である。1.2.2 節で述べたように、全系が平衡状態のときは、 $S_L$  は平衡エントロピーに一 致する。さらに、 $|\Psi_{tot}
angle$  は純粋状態なので、 $S_L$  はエンタングルメントエントロピーとな り、部分系 A と全系の残りの部分とのエンタングルメントを定量化する量でもある(エ ンタングルメントエントロピーとの関係は 1.2.2 節参照)。全系の量子状態  $|\Psi_{tot}\rangle$  は、 $k_F^{\pm}$ とランダムポテンシャル ( $L_C, W$ ) により定まるが、 $S_L$  の L 依存性を調べるときには、  $|\Psi_{tot}\rangle$  を固定しておく(QWR の長さ  $L_C$  を変化させているのではないことに注意<sup>\*8</sup>)。 NESS の量子状態が、平衡の場合の量子状態と著しく異なるのは QWR 内部( $L \leq L_C$ ) であり、その時の  $S_L$  に最も興味がある。

フォン・ノイマンエントロピーを計算する際に、定義式(2.19)から直接求めようとすると、 $\rho_L$ という  $2^L \times 2^L$ の行列を対角化する必要が出てくる。しかし、関係式(2.18)をうまく使うことで、ある  $L \times L$ 行列の対角化だけで  $S_L$ を計算できるようになる。以下ではその方法を示す。

部分系 A における縮約密度演算子  $\rho_L$  はウィックの定理を満たすので、 $S_L$  などの A 内の任意の物理量は 2 点相関関数  $\langle \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_y \rangle$   $(x, y \in A)$  の組み合わせにより定まる。このことは、縮約密度演算子  $\rho_L$  も、この 2 点相関関数だけで定まることを意味している。そこで、次のような  $L \times L$  の行列を導入する [139–141]:

 $\sim$ 行列  $\Lambda$  の定義 (絶対零度)  $\Lambda_{xy} := \langle \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_y \rangle = \int_{-k_F^{-}}^{k_F^{+}} dk \varphi_k^*(x) \varphi_k(y) + \sum_{b \ (\varepsilon_b < -2)} \phi_b(x) \phi_b(y)$ (2.20)

 $\Lambda$  はエルミート行列なので、 $L \times L$  のユニタリ行列で対角化可能である。  $S_L$  を Λ を用いて表すと次のようになる。

 $S_L = -\mathrm{tr}[\Lambda \ln \Lambda + (1 - \Lambda) \ln (1 - \Lambda)]$ (2.21)

ここで、tr[·] は  $L \times L$  行列のトレースを表す。この関係式(2.21)より、 $L \times L$  行列の  $\Lambda$ を対角化すれば、 $S_L$  を計算することができる。先行研究 [139–141] では、 $W = \Delta \mu = 0$ の場合で式(2.21)を導出していたが、W > 0 や  $\Delta \mu > 0$  の場合にも成り立つことが示 せる。同様にして、A 内のすべての物理量は  $\Lambda$  を用いて表すことができる。

<sup>\*\*</sup> もし *L*<sub>C</sub> を変化させると、その他のパラメータをすべて固定した場合には、一般に *G* の値が変化して しまう。このことは、異なる NESS が実現してしまうことを意味している。フォン・ノイマンエントロ ピーのサイズ依存性を求めるためには、「同じ NESS」が実現するようにパラメータをうまく設定した上 で、異なるサイズのフォン・ノイマンエントロピーを比較する必要がある。しかし、*L*<sub>C</sub> を変化させたと きの、「同じ NESS」が実現する条件は自明ではない。

# 2.3 非自明な NESS となる条件 (Nontrivial NESS)

全系の量子状態  $|\Psi_{tot}\rangle$  は  $k_F^{\pm}$  とランダムポテンシャル ( $L_C, W$ ) により定まるが、指定 するパラメータをうまく選ぶことによって、非自明な NESS となる。適切にパラメータ を選ぶ理由は、例えば平衡状態と本質的に変わらないような状況を排除するためである (詳細は後述)。この節では、非自明な NESS となる条件を提示する。

電子正孔対称性から、左右の化学ポテンシャル  $\mu^{\pm}$ を $-2 \leq \varepsilon_k \leq 0$  (バンドの下半分) に制限しても一般性を失わない。さらに、バンド端  $\varepsilon_k = -2$ またはバンド中心  $\varepsilon_k = 0$ の 特殊な効果を除くために、 $-1.7 \leq \mu^{\pm} \leq -0.6$ とする。

QWR が短い場合 (すなわち、 $L_{\rm C} \sim 1$ ) も除外する。 $L_{\rm C} \sim 1$ のような QWR は、QWR というよりむしろ量子ドットであり、 $L \leq L_{\rm C}$ に対して L 依存性を議論することはで きないからである。したがって、我々は  $L_{\rm C} \gg 1$ の場合を調べる。後の数値計算では、  $L_{\rm C} = 401$ とする。

絶対零度を仮定しているので、無次元化コンダクタンス(非線形である;以下を参照)

$$G := \frac{(J/\Delta\mu)}{(e^2/2\pi\hbar)} \tag{2.22}$$

は、単に  $\mu^- \leq \varepsilon_k \leq \mu^+$  における透過率  $|t_k|^2$  の平均値

$$G = \frac{1}{\Delta\mu} \int_{\mu^-}^{\mu^+} |t_k|^2 d\varepsilon_k \tag{2.23}$$

である。明らかに、 $0 \le G \le 1$ である。

 $L_{\rm C}$ は有限であり、粒子溜には不純物が一切存在しないので、アンダーソン局在 [142–145] は不完全にしか起こらない。すなわち、局在長 $\xi$ ( $\xi$ は仮想的な場合( $L_{\rm C} \to \infty$ )で定義 される)が $L_{\rm C}$ よりも大きくなることがある。Wが増加すると、 $\xi$ とGは減少する傾向 にある [142–145]。 $L_{\rm C} \gg \xi$ の場合、系はほぼ絶縁体になり、 $G \sim 0$ になる。したがって、 有限の $\Delta \mu$ を加えても、電流はほとんど流れない。これは、絶縁体に一定の電場をかけた 状況とほとんど同じであり、平衡状態と変わらないと考えられる。一方、 $L_{\rm C} \ll \xi$ の場 合\*<sup>9</sup>、電子は散乱をほとんど受けず、 $G \sim 1$ となる。この場合の NESS は、(電子間の相 互作用が存在する場合であっても [72])平衡状態を並進運動させたものとほぼ変わらない であろう。この場合も、 $S_L$ が平衡状態と同様にスケールすることは明らかである。した がって、 $L_{\rm C} \sim \xi$ となる中間領域に注目する。この中間領域では、Gは 0.3  $\leq G \leq 0.7$ の ような中間値になる。この場合の NESS を「非自明な NESS」と呼ぶことにし、この条件 を満たすように Wを定める。

<sup>\*9</sup> 正確に言うと、 $L_{\rm C} \ll v_F \tau$ の場合を意味する。 $v_F$ はフェルミ速度、 $\tau$ は緩和時間を表す。



図 2.4  $|t_k|^2$  の k 依存性を表すグラフ。W = 0.08、 $L_C = 401$  である(これらのパラ メータは図 2.1 と共通である)。対称性  $t_k = t_{-k}$  のために、k > 0 の範囲だけを図示し ている。文献 [136] より引用した。

このような NESS では、不純物による多重散乱が本質的であり、多重散乱により波動 関数  $\varphi_k(x)$  は図 2.1 に示すような複雑な形状をしている。k は連続値を取るので、QWR にほぼ局在しているもの(赤いものなど)や、QWR にしみこむもの(青いものなど)を 含む無限に多くの状態がある。図 2.4 に示すように、 $|t_k|^2$  は k の関数として急激に変化 しており、各ピークはほとんど局在した状態を通じての共鳴トンネリングを示している。 図 2.5 は、図 2.4 を一部だけ取り出してきたグラフである。これらのグラフから、 $|t_k|^2$  に はピークとディップが多く存在するということが分かる。この事実は次節で用いる。さら に、 $|t_k|^2$ の値はバンド端でほぼゼロであり、バンド中央に近いほど平均的に大きくなる傾 向があることも分かる。よって、 $\mu$  をバンド中央に近づけると、G は増える傾向にある。

以上の議論より、非自明な NESS の条件をまとめたものが、以下である。



図 2.5 図 2.4 を  $\mu = -1.5$  周辺だけ取り出したグラフ。 $\varepsilon_k = \mu = -1.5$  に対応 する k の値は、 $k = 0.72273\cdots$ である。 $L_C = 401$  より  $k_{\text{peak}}$  の値は、 $k_{\text{peak}} = 2\pi/L_C = 0.015669\cdots$ である。このグラフの中でも  $|t_k|^2$  が 1 に非常に近い共鳴点  $k = 0.82128\cdots$ が、図 2.1 の赤色の波動関数の場合に対応している。

✓ 非自明な NESS となる条件 -

- $-1.7 \lesssim \mu^{\pm} \lesssim -0.6$  (電子正孔対称性およびバンド端とバンド中央を除外)
- $L_{\rm C} \gg 1$  (QWR が十分に長いこと)
- 0.3 ≤ G ≤ 0.7 (絶縁体でなく、かつ平衡状態を並進運動させたものでない こと)

# 2.4 平衡から遠く離れる条件 (Far from equilibrium)

この節では、非自明な NESS の条件のもとで、平衡から遠く離れる条件を提示する。平 衡のときが  $\Delta \mu = 0$  ( $\Delta k_F = 0$ )だったので、 $\Delta \mu$  の値を増やせば平衡から離れていくが、 具体的に何に比べて大きいのかを議論する。

議論するにあたって、着目する量は無次元化非線形コンダクタンス *G* である。コンダ クタンス *G* は電流期待値から計算することができるが、式(2.23)から  $\mu^- \leq \varepsilon_k \leq \mu^+$ 



図 2.6 *G*の  $\Delta \mu$  依存性を現すグラフ。W = 0.08、 $\mu = -1.5$  である。 $G \ge 0 \le \Delta \mu \le 1.0$ の領域でプロットした。 $\Delta \mu = 1.0$ のとき、 $\mu^-$  はバンド端  $\epsilon_k = -2.0$  に達 する。文献 [136] より引用した。

における透過率  $|t_k|^2$  の平均値と見なすこともできるのだった。 $|t_k|^2$  は図 2.4 で見たよう に、非常に複雑な振る舞いであり多数のピークを持っていた(ピークにおける波動関数は 共鳴状態となるのだった)。 $\Delta \mu$  ( $\Delta k_F$ )を増やしていくと、 $\mu^- \leq \epsilon_k \leq \mu^+$  に含まれる ピークの数が変化し、それが *G* の振る舞いに直接結びつく。ピークの数はおおよそ  $L_C$ 個あり、それが  $-\pi \leq k < \pi$  の範囲に存在するので、 $|t_k|^2$  のピーク間の平均距離  $k_{\text{peak}}$  は おおよそ  $k_{\text{peak}} = 2\pi/L_C$  である。以下で、 $k_{\text{peak}}$  と  $\Delta k_F$  の大小関係に応じて場合分けを して、そのときの *G* の振る舞いを議論する。

■ $\Delta k_F \ll k_{\text{peak}}$ のとき この領域では、 $\Delta \mu$  ( $\Delta k_F$ )を変化させても  $|t_k|^2$ の値はほとん ど変化しないので、電流一電圧特性は線形、すなわち *G* は  $\Delta \mu$  ( $\Delta k_F$ )に依存しない(た だし、*G* は  $\mu$  に依存する)。図 2.4 のときのパラメータで、*G* の  $\Delta \mu$  依存性を表したグラ フが図 2.6 である。図 2.6 において、 $\Delta k_F \ll k_{\text{peak}}$ となる領域は  $\Delta \mu \leq 0.005$ という非 常に小さな領域に限られることがわかる。 ■ $\Delta k_F \sim k_{\text{peak}}$ のとき  $\Delta k_F \in \Delta k_F \sim k_{\text{peak}}$ まで増加させると、 $\mu^- \leq \varepsilon_k \leq \mu^+$ には ピークは平均1個程度入ることになる。 $\Delta \mu$  ( $\Delta k_F$ )を増やしたときに、 $\mu^- \leq \varepsilon_k \leq \mu^+$ にピークが含まれると、 $|t_k|^2$ の平均値が増える。逆に、ディップが含まれると、 $|t_k|^2$ の平 均値が減る。図 2.6 では、 $\Delta \mu \approx 0$ から増やしていくと、G ははじめに大きく増える、次 に大きく減る、その次は増える…のように変化している。これは、はじめにピークを拾っ てG が増え、次にディップを拾ってG が減って、その次は再びピークを拾ってG が増え る…のように解釈できる。以上のように、G は  $\Delta \mu$  (および  $\mu$ ) に鋭敏に依存し、その値 は個々のピークの特性が反映されることが分かる。

■ $\Delta k_F \gg k_{\text{peak}}$ のとき この領域では、 $\mu^- \leq \varepsilon_k \leq \mu^+$ には  $|t_k|^2$ の多くのピークと ディップが入っているので、G は平均化されて、 $\Delta \mu$ (および  $\mu$ )に対する依存性は弱 くなる。 $\Delta k_F = O(1)$ とすれば、 $k_{\text{peak}} = 2\pi/L_{\text{C}}$ であるので、十分大きく  $L_{\text{C}}$ を取れば  $\Delta k_F \gg k_{\text{peak}}$ は常に達成される。このパラメータ領域

✓ 絶対零度の場合の、平衡から遠く離れる条件 —

$$\Delta k_F = O(1) \gg \Delta k_{\text{peak}}$$

を、「平衡から遠く離れた (Far from equilibrium)」NESS と呼ぶことにする。平 衡から遠く離れた非自明な NESS においては、上で述べたように、G は平均化されるた めに不純物配位の個性にはあまり依存せず、普遍的に振る舞う。このような領域では、Gだけでなく  $S_L$  についても普遍的に振る舞うことが期待できる。実際に、 $S_L$  が準体積則 (2.1) に従うことを示すのが本章の目的である。

#### 2.5 電流と粒子数ゆらぎの関係

部分系 A 内の粒子数演算子  $\hat{N}_L := \sum_{|x| < L/2} \hat{c}_x^\dagger \hat{c}_x$ を用いると、粒子数ゆらぎは

$$\delta N_L^2 := \langle (\tilde{N}_L - \langle \tilde{N}_L \rangle)^2 \rangle \tag{2.25}$$

のように表される。ここで、

$$\langle \bullet \rangle := \langle \Psi_{\text{tot}} | \bullet | \Psi_{\text{tot}} \rangle \tag{2.26}$$

とした。 $\delta N_L^2$ は式 (2.20) で定義した行列  $\Lambda$  を用いれば、

$$\delta N_L^2 = \operatorname{tr}[\Lambda(1-\Lambda)] \tag{2.27}$$

のようになる。

(2.24)

この節では、 $S_L$  と  $\delta N_L^2$  の間に成り立つ不等式を導出する。これは先行研究 [113,146] を一般化したものである。

 $h(x) \in$ 

$$h(x) := -x \ln x - (1-x) \ln (1-x) \quad (0 \le x \le 1)$$
(2.28)

のように定義する。ここで、*h*(*x*) について次の不等式 [113,146] が成り立つことに注意 する。

$$x(1-x) \le h(x) \le \epsilon_1 - \{c \ln \epsilon_1\} x(1-x)$$
(2.29)

ここで、cは $\epsilon_1$ に依存しない正定数であり、さらに $0 < \epsilon_1 < \epsilon_0$ に対して、 $c = 1 + o(\epsilon_0)$ の ように選ぶことができる。この不等式を使って、 $S_L(= tr[h(\Lambda)])$ を次のように評価する。

$$\operatorname{tr}[\Lambda(1-\Lambda)] \le S_L \le \epsilon_1 L - \{c \ln \epsilon_1\} \operatorname{tr}[\Lambda(1-\Lambda)].$$
(2.30)

 $\epsilon_1 = 1/L$ のようにとれば、次の重要な不等式が得られる。

 $ightarrow S_L と \delta N_L^2$ の間の不等式・

$$\delta N_L^2 \le S_L \le 1 + c(\ln L)\delta N_L^2$$

(2.31)

右辺の係数 ln *L* は、 $x \to 0$  または 1 で  $\frac{dh(x)}{dx}$  が対数発散することに由来する。そのため、(2.31)の左側の不等式のほうが、右側のものよりも厳しい不等式になっていると考えられる。すなわち、 $S_L \simeq \delta N_L^2$ である。

この不等式から、 $\delta N_L^2$ に対して準体積則が成り立てば、 $(\ln L \text{ onterfere}) S_L$ で も準体積則が成り立つことが言える。理由は、 $\delta N_L^2 = O(L)$ の場合を考えると分かりやす い。(2.31)により、 $\ln L$ の不定性を除けば、 $S_L = O(L)$ であることが言える。以下では、 まずメカニズムを理解しオーダーを評価するために $\delta N_L^2$ を解析し、次に数値計算により  $S_L$ が平衡から遠く離れた非自明な NESS で準体積則 (2.1)を示すことを確認する。

### 2.6 粒子数ゆらぎに関する恒等式

 $\delta N_L^2$ を計算するために、次の恒等式を用いる(証明は付録 A)。

$$\delta N_L^2 \mathcal{O} 恒等式 (絶対零度)$$
$$\delta N_L^2 = \iint_{\Omega_{\Delta\mu}} dk_1 dk_2 R_L^W(k_1, k_2)$$
(2.32)

ただし、束縛状態の寄与は無視している。ここで、積分領域 $\Omega_{\Delta\mu}$ は、 $k_1$ の電子は占有さ

れて、k2の電子は空であるような領域である(図 2.9 参照)。さらに、

$$R_L^W(k_1, k_2) := \frac{|\Delta J_L^{pq}|^2}{[16\sin^2\left(p/2\right)\sin^2\left(q/2\right)]}$$
(2.33)

であり、 $p := k_1 + k_2$ 、 $q := k_1 - k_2$ および

$$\Delta J_L^{pq} := J_{k_1 k_2}(L/2) - J_{k_1 k_2}(-L/2) \tag{2.34}$$

であり、 $J_{k_1k_2}(x+1/2)$ はボンドx+1/2における電流演算子のk表示の成分

$$J_{k_1k_2}(x+1/2) := i[\varphi_{k_1}^*(x+1)\varphi_{k_2}(x) - \varphi_{k_1}^*(x)\varphi_{k_2}(x+1)]$$
(2.35)

である(\* は複素共役を表す)。p = 0 あるいはq = 0のとき、 $R_L^W$ の分母がゼロになるが、 分子の  $|\Delta J_L^{pq}|^2$  もゼロになる(証明は付録 A)。したがって、 $R_L^W$  は  $\Omega_{\Delta\mu}$  の全領域に渡っ て有限の値をとる。恒等式 (2.32) の意味は、 部分系 A の  $\delta N_L^2$  は A の両端  $x = \pm L/2$  に 流れ込む総電流により定まる、ということである。

以下の議論において、恒等式 (2.32) は決定的な役割を果たす。この恒等式は、 $\delta N_L^2$ の パラメータ依存性を  $\Omega_{\Delta\mu}$  と  $R_L^W$  の 2 つに分離している。 $\Omega_{\Delta\mu}$  は ( $\Delta\mu, \mu$ ) に依存し、 $R_L^W$ は ( $W, L, L_C$ ) に依存する。以下で示すように、 $R_L^W$  は  $k_1$ - $k_2$  平面上のある領域で大きな 値  $O(L^2)$  をとり、 $\Omega_{\Delta\mu}$  はその一部を抜き出す役割を果たす。

# 2.6.1 R<sup>W</sup><sub>L</sub>の振る舞い(表 2.1)

まず、W = 0のとき、波動関数  $\varphi_k(x)$  は平面波  $\varphi_k(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$  に一致するために

$$|\Delta J_L^{pq}|^2 = \frac{4}{\pi^2} \sin^2\left(p/2\right) \sin^2\left(qL/2\right)$$
(2.36)

となる。その結果、 $R_L^W$  は

$$R_L^{W=0}(q) = \frac{1}{4\pi^2} \frac{\sin^2\left(qL/2\right)}{\sin^2\left(q/2\right)}$$
(2.37)

のように書ける。ここで、 $R_L^{W=0}(q)$ は Fejér 核である。 $R_L^{W=0}(q)$ は  $|q| = \frac{2\pi n}{L}$  (n = 1, 2, ...) でゼロになり、これらの点の間でピークを持つ。そのピークの高さは、q = O(1/L)のとき、 $O(L^2)$ である(結果は表 2.1 にまとめられている)。 $\epsilon \ge L$ に依存しない 正定数として、 $|q| \le \epsilon \ge \epsilon < |q|$ の2つの部分に分けたとき、 $|q| \le \epsilon$ は $O(L^2)$ のピーク を含んでいる。一方で、 $\epsilon < |q|$ では、 $R_L^{W=0}(q) = O(1)$ であり、 $\Omega_{\Delta\mu}$ はLに依存しない ので、 $\delta N_L^2$ のL依存性は $q \simeq 0$ 周辺の積分で決まってしまう。 $\Omega_{\Delta\mu}$ のうち、 $q \simeq 0$ の部 分の領域は次節で論じる。



図 2.7  $R_L^W(\Lambda)$ さい |q|)を  $L^2$ で割った ものの L 依存性のグラフ。W = 0.08の 場合をプロットした。  $k_1$  は  $\varepsilon_{k_1} = \overline{\mu} =$ -1.5 となるようにとった。文献 [136] よ り引用した。



図 2.8  $R_L^W(\Lambda$ さい |p|)を $L^2$ で割った もののL依存性のグラフ。W = 0.08の 場合をプロットした。 $k_1$ は $\varepsilon_{k_1} = \overline{\mu} =$ -1.5となるようにとった。文献 [136] よ り引用した。

W = 0の特殊性は、式(2.33)を変形した式(2.37)からは、分母のsin<sup>2</sup> (p/2)が消えていることである。これは、分子である式(2.36)に同じ項が現れて、分子分母の同じ項が打ち消し合ったからである。式(2.36)でsin<sup>2</sup> (p/2)が現れたのは、ハミルトニアンの空間並進対称性(つまり、W = 0)由来である。

W > 0のときは、電子が不純物によって前後に散乱されるために、前方散乱(小さい |q|)と後方散乱(小さい |p|)の違いがなくなってしまう。その結果、 q = O(1/L)だけ でなく p = O(1/L)の場合も、 $R_L^W$ は  $O(L^2)$ となる。このことを数値計算で確かめるた めに、 $R_L^W$ の前方散乱部分 (小さい |q|)と後方散乱部分 (小さい |q|)を  $L^2$ で割ったもの を、それぞれ図 2.7と図 2.8 にプロットした。これを見ると、 $R_L^W$ は q = O(1/L)だけで なく p = O(1/L)でも  $O(L^2)$ という異常な高さのピークを持つことが分かる。

 $\Omega_{\Delta\mu}$ のその他の領域については  $R_L^W = O(1)$  であり、 $\Omega_{\Delta\mu}$  は *L* に依存しないので、  $\delta N_L^2$ の *L* 依存性は  $q \simeq 0$  と  $p \simeq 0$  周辺の積分で決まってしまう。そこで、 $|q| \le \epsilon$  と  $|p| \le \epsilon$ の領域に着目する ( $\epsilon$  は *L* に依存しない正定数)。

#### 2.6.2 Ω<sub>Δu</sub>の振る舞い (表 2.2)

平衡状態のときの積分範囲  $\Omega_{\Delta\mu}$  は図 2.9(a) である。上で議論したように、我々は  $q \simeq 0 \ge p \simeq 0$ の領域に焦点を当てる。そこで、 $\Omega_{\Delta\mu}$ のうちの  $q \ge q + dq$  ( $p \ge p + dp$ ) の間にある部分の面積を求めてみると、|q|dq (|p|dp) となる。

NESS の場合は、図 2.9(b) のように、図 2.9(a) の  $\Omega_{\Delta\mu}$  を +45° の方向にシフトしたものである。そうすると、 $q \ge q + dq$  の間の面積については平衡の場合と同じ(|q|dq)になる一方、 $p \ge p + dp$  の間の面積は  $|p - \Delta k_F|dp$  となる。これは  $p \to 0$  でもゼロになら

表 2.1  $R_L^W$  (および  $\tilde{R}_L^W$ ) の典型的な値

	W = 0	W > 0
q = O(1/L)	$O(L^2)$	$O(L^2)$
p = O(1/L)	O(1)	$O(L^2)$

表 2.2  $q \ge q + dq$ の間、および  $p \ge p + dp$ の間の面積

	$\Delta \mu = 0$	$\Delta \mu > 0$
$q \simeq 0$	q dq	q dq
$p \simeq 0$	p dp	$ p - \Delta k_F  dp$

表 2.3  $S_L \geq \delta N_L^2$  の L 依存性  $(L \leq L_C)$ 

	W = 0	W > 0
$\Delta \mu = 0$	$[A] O(\ln L)$	$[C] O(\ln L)$
$\Delta \mu > 0$	$[B] O(\ln L)$	[D] 準体積則 (for nontrivial NESSs far from equilibrium)



図 2.9 積分範囲  $\Omega_{\Delta\mu}$  の図。(a) は平衡状態 ( $\Delta\mu = 0$ ) の場合であり、(b) は NESS( $\Delta\mu > 0$ ) の場合である。文献 [136] より引用した。

ないので、NESS の場合には、小さい |p| のときの  $R_L^W$  からより多くの寄与を取り出して いる、ということを意味する。

# 2.7 不純物がない場合の平衡状態 (表 2.3 [A])

平衡状態であり ( $\Delta \mu = 0$ )、不純物がない場合 (W = 0)、空間並進対称性のために  $|\Psi_{\text{tot}}\rangle$  は一様な量子状態となる。これを反映して、 $R_L^W$  は  $q := k_1 - k_2$  のみの関数で表さ れる。表 2.1 と表 2.2 を用いると、式 (2.32) を

$$\delta N_L^2 = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} R_L^{W=0}(q) |q| dq + O(1)$$
(2.38)

のように評価できる。 $R_L^{W=0}$  は式 (2.37) ものである。power-counting を使うと、右辺の積分は、O(1/L) [q = O(1/L) の幅] × O(1/L) [|q| 由来] ×  $O(L^2)$   $[R_L^W$  由来、表 2.1]=  $O(L^0)$  のように評価できる。実際には、以下の詳しい議論から、 $\delta N_L^2 = O(\ln L)$  である。得られる結果は先行研究の結果 [113,114] と一致するが、後に NESS の場合に一般化するために、以下で式 (2.38) と  $\delta N_L^2 = O(\ln L)$ の導出を詳しく見ることにする。

W = 0のとき、 $R_L^W$ は式 (2.37)に一致するため、式 (2.32)は先行研究の結果 [113,114] に帰着する;

$$\delta N_L^2 = \iint_{\Omega_{\Delta\mu}} dk_1 dk_2 R_L^{W=0}(q) \tag{2.39}$$

 $\delta N_L^2$ の L 依存性を見るために、q 積分を  $|q| \le \epsilon \ge \epsilon < |q|$ の2つの部分に分ける。ここで、 $\epsilon$ は L に依存しない任意の小さな正定数である。後者の領域  $\epsilon < |q|$ の積分では、

$$R_L^{W=0}(q) \simeq \frac{1}{8\pi^2 \sin^2\left(q/2\right)}$$
 (2.40)

のように近似できる。この値は O(1) であるため、その積分も O(1) となる。よって、 に依存する項は前者の部分  $(|q| \le \epsilon)$  の積分からのみ生じる。被積分関数  $R_L^{W=0}(q)$  は q にのみ依存することも考えると、式 (2.38) が得られる。

さらに積分範囲を分割して、(2.38)の積分を評価する。

$$\int_{0}^{\epsilon} R_{L}^{W=0}(q)|q|dq = \int_{0}^{2\pi/L} R_{L}^{W=0}(q)|q|dq + \int_{2\pi/L}^{\epsilon} R_{L}^{W=0}(q)|q|dq \qquad (2.41)$$

$$= \int_{2\pi/L}^{\epsilon} R_L^{W=0}(q) |q| dq + O(1)$$
(2.42)

$$\simeq \frac{1}{4\pi^2} \int_{2\pi/L}^{\epsilon} \frac{(1/2)}{(q^2/4)} |q| dq + O(1)$$
(2.43)

$$= \frac{1}{2\pi^2} \ln L + O(1) \tag{2.44}$$

よって、 $\delta N_L^2 = O(\ln L)$ が得られる。不等式 (2.31)から、対数則  $S_L^{\text{eq}} = O(\ln L)$ が期待できる。 $S_L^{\text{eq}}$ は平衡状態の場合の  $S_L$ である。このことを実際に数値計算により確かめた結果が、図 2.10 である。この結果は、先行研究の結果と確かに一致する [113,114] \*<sup>10</sup>。

# 2.8 不純物がない場合の NESS (表 2.3 [B])

ランダムポテンシャルなし (W = 0)の NESS ( $\Delta \mu > 0$ )の場合 (表 2.3 [B]) について も、W = 0 なので、 $R_L^{W=0}$ は [A]の場合と共通である。一方で、積分範囲  $\Omega_{\Delta \mu}$ は  $\Delta \mu > 0$ 

<sup>\*10</sup> 式(2.43) で近似が入っているように見えるが、実際に得られる結果は、ln L の前の係数まで含めて先行 研究の結果 [113,114] を再現する。



図 2.10 平衡状態 ( $\Delta \mu = 0$ ) における、 $S_L$  の L 依存性のグラフ。 $\mu = -1.5$  および W = 0, 0.05, 0.08 で計算した。W = 0, 0.05 については 20 サンプルで平均し、W = 0.08 については 10 サンプルで平均した。エラーバーはサンプル平均における標準偏差を表す。文献 [136] より引用した。

より、図 2.9(a) から図 2.9(b) に変化する。表 2.1 と表 2.2 を用いると、式 (2.32) を

$$\delta N_L^2 = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} R_L^{W=0} |q| dq + O(1)$$
(2.45)

のように評価できる。ここで、式(2.45)右辺の第1項は、[A] の場合の式 (2.38) と全く 同じである。

この積分はすでに前節で評価し、 $O(\ln L)$  だったので、対数則  $\delta N_L^2 = O(\ln L)$  が言え る。 $\Delta \mu > 0$  であることから、 $\Omega_{\Delta \mu}$  は [A] とは違っているので、一見するとその違い(つ まり平衡と NESS の違い)が O(1) に含まれているように思われるかもしれない。しか し、それは正しくない。 $\delta N_L^2$  や  $S_L$  は  $\Delta \mu = 0$  のとき([A] の場合)と全く同じ結果を与 える。なぜなら、W = 0 のときの NESS( $\Delta \mu > 0$ )は、実質的に平衡状態を並進運動さ せたものであるからである。このことを以下で示す。 行列 Λ の成分を

$$\Lambda_{xy} = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F^-}^{k_F^-} e^{ik(y-x)} dk$$
(2.46)

$$=e^{i\Delta k_F(y-x)/2}\Lambda_{xy}^{\rm eq} \tag{2.47}$$

$$=\sum_{\alpha,\beta} (U_{x\alpha})^* \Lambda^{\rm eq}_{\alpha\beta} U_{\beta y} \tag{2.48}$$

のように書き換える。ここで、 $\Lambda^{eq}$ はフェルミ波数が $\overline{k}_F := (k_F^+ + k_F^-)/2$ である平衡状態 ( $\Delta k_F = 0$ )の $\Lambda$ であり、 $U_{xy} = e^{i\Delta k_F x/2} \delta_{xy}$ はユニタリ行列であり対角行列である。 よって、 $\Lambda$ は $\Lambda^{eq}$ と同じ固有値を持つことが言える。これにより、 $S_L$ も $\delta N_L^2$ も

$$S_L = -\mathrm{tr}[\Lambda \ln \Lambda + (1 - \Lambda) \ln (1 - \Lambda)]$$
(2.49)

$$= -\mathrm{tr}[\Lambda^{\mathrm{eq}} \ln \Lambda^{\mathrm{eq}} + (1 - \Lambda^{\mathrm{eq}}) \ln (1 - \Lambda^{\mathrm{eq}})]$$
(2.50)

$$=S_L^{\rm eq} \tag{2.51}$$

となり、( $\bar{k}_F$ を固定した場合に)  $\Delta k_F$  に依存しない。結局のところ、W = 0 の NESS は本質的に、(たとえ電子間相互作用がある場合であっても [72])) 一定速度で動く慣性系から見た平衡状態であるため、非平衡特有のものは何一つ得られない。

# 2.9 不純物ありの平衡状態 (表 2.3 [C])

平衡 ( $\Delta \mu = 0$ ) の場合、積分範囲  $\Omega_{\Delta \mu}$  は図 2.9(a) であり、これは [A] と同じである。 一方で、ランダムポテンシャルがある場合 (W > 0)、 $R_L^W$  はこれまでの [A]、[B] の場合 とは大きく異なる。 $R_L^W$  は、 $q \simeq 0$  だけでなく  $p \simeq 0$  の場合も、 $R_L^W = O(L^2)$  となる (表 2.1)。よって、ランダムポテンシャルがない場合 (W = 0) とは異なり、この両方の 領域が  $\delta N_L^2$  の L 依存性に寄与する。そうすると、表 2.2 を用いて、 $\Delta \mu = 0$  のときの式 (2.32) を

$$\delta N_L^2 = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W |q| dq + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W |p| dp + O(1)$$
(2.52)

のように評価できる。ここで、 $\tilde{R}_L^W$  は  $q, p \simeq 0$  周辺の  $R_L^W$  の  $k_1$  についての平均を意味 する。 $\tilde{R}_L^W$  の典型的な値は  $R_L^W$  と同じである (表 2.1)。W = 0 のときと同様に powercounting を使うと、右辺の積分は、O(1/L) [q = O(1/L) の幅] × O(1/L) [|q| 由来] ×  $O(L^2)$   $[\tilde{R}_L^W$  由来、表 2.1]=  $O(L^0)$  のように評価できる。実際には、積分なので  $O(\ln L)$ と期待できる。そうすると、 $\delta N_L^2 = O(\ln L)$  が得られる。従って、不等式 (2.31) から、  $S_L^{eq} = O(\ln L)$  が期待される。このことは、 図 2.10 と図 2.11 から確かめられる (図 2.10 の W = 0.08 の場合は図 2.11 と同じものである)。図 2.10 を見ると、W を変化させても



図 2.11  $S_L$  の L 依存性を表すグラフ ( $L \leq L_C$ )。いくつかの  $\Delta \mu$  の場合をプロット している。 $S_L$  は 10 サンプルで平均したものである(エラーバーは標準偏差)。横軸は 対数スケールである。文献 [136] より引用した。

*S<sub>L</sub>*の値はあまり変化していないように見える。これは、*W*の増加に伴い、前方散乱の寄 与が減少し、後方散乱の寄与が増加するためである(詳しくは付録 B 節で議論している)。

# 2.10 平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 2.3 [D])

 $W > 0, \Delta \mu > 0$ のときは、 $R_L^W$ は前節 (表 2.3 [C])の場合と共通であり、W > 0による後方散乱のために、 $q \simeq 0$ のみならず $p \simeq 0$ にも $O(L^2)$ のピークを持つ。また、積分範囲  $\Omega_{\Delta\mu}$ は  $\Delta\mu > 0$ のために、図 2.9(a)から図 2.9(b)へ変化する。これらの相乗効果により、 $S_L$ の振る舞いは他の場合(表 2.3 [A-C])とは大きく異なる。図 2.11から、 $\Delta\mu$ を大きくするにつれ  $S_L$ は大きく増大しており<sup>\*11</sup>、さらに ln Lの1次式ではフィッティングできないこともわかる。この  $S_L$ の振る舞いは以下のメカニズムによる。

<sup>\*&</sup>lt;sup>11</sup> 非平衡にすると  $S_L$  が増大することは、一見すると平衡状態のエントロピーが最大であることと矛盾 しているように思われるかもしれない。しかし、平衡状態のエントロピーが最大となる場合は、系のエ ネルギー期待値と粒子数期待値を固定した条件下での話である。本論文で扱っているパラメータ領域 (-1.7  $\leq \mu^{\pm} \leq -0.6$ ) で  $\mu$  を固定して  $\Delta \mu$  を増大させると、以下の議論からわかるように、部分系の 粒子数期待値はほぼ変化しない一方で、エネルギー期待値は増大するために、エントロピーは大きくなっ ているのである。 $\mu$  を固定して  $\Delta \mu$  を増大させると、k > 0 と k < 0 のフェルミ面がそれぞれ  $\Delta \mu/2$  だ け増減する。そのため、左右から入射する電子の合計はほとんど変わらないので、部分系の粒子数期待 値もほぼ変化しない。一方で、左右から入射する電子の一粒子エネルギーの合計は、パラメータ領域を -1.7  $\leq \mu^{\pm} \leq -0.6$ のように制限しているために、増大する。そのため、部分系のエネルギー期待値は 増大する。

 $\Delta \mu > 0$ のとき、 $p \ge p + dp$ の間の面積は  $|p - \Delta k_F| dp$  となる (表 2.2)。その結果、式 (2.52) の後方散乱に由来する項が変わり、

$$\delta N_L^2 = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W |q| dq + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W |p - \Delta k_F| dp + O(1)$$
(2.53)

のようになる。ここで、 $\tilde{R}_{L}^{W}$ は式 (2.52)で定義したものと同じであり、 $q, p \simeq 0$ 周辺の  $R_{L}^{W}$ の $k_{1}$ についての平均を意味する。式 (2.53)右辺の1つ目の積分  $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_{L}^{W} |q| dq$ は、[A]-[C]の場合と同様に  $O(\ln L)$ となる。式 (2.53)右辺の2つ目の積分  $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_{L}^{W} |p - \Delta k_{F}| dp$ に対しては、 $\epsilon = O(1) < \Delta k_{F}$ のようにとることで、

$$\Delta k_F \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W dp + \int_{-\epsilon}^{0} \tilde{R}_L^W |p| dp - \int_{0}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W |p| dp$$
(2.54)

のように書き直すことができる。式(2.54)右辺の後の2項は前と同様に

$$\int_{-\epsilon}^{0} \tilde{R}_{L}^{W} |p| dp - \int_{0}^{\epsilon} \tilde{R}_{L}^{W} |p| dp = O(\ln L)$$

$$(2.55)$$

となる (ランダム平均を取れば互いに打ち消し合うと期待される)。それに対して、式 (2.54) 右辺の第1項のうち

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \tilde{R}_L^W dp \tag{2.56}$$

は、基本的には O(L) の量である。なぜなら、O(1/L) [p = O(1/L) の幅] ×  $O(L^2)$   $[\tilde{R}_L^W$ 由来,表 2.1]= O(L) だからである。不等式 (2.31) から、 $S_L = O(L)$  であることを示唆し ている。

しかしながら、少しだけ修正を要する。なぜなら、L が増加すると(すなわち、A の両 端  $(x = \pm L/2)$  が QWR の両端  $(x = \pm L_C/2)$  に近づくと)、後方散乱は次第に弱まって いくからである。従って、 $R_L^W$  は L が増加するにつれ、 $O(L^2)$  よりも少しだけゆるやか に増大する (図 2.8 でもそのことが確認できる)。このような効果を次第に減衰する関数  $\eta(L)$  で表すと、準体積則 (2.1) に到達する。ただし、 $\eta(L)$  が、平衡から遠く離れた非自 明な NESS に対して、性質 (i)-(iii)(不等式 (2.2) とともに囲まれている「 $\eta(L)$  の性質」) を持つかどうかを調べる必要がある。

これを確かめるために、次のようにする。まず、(2.1) の右辺の  $O(\ln L)$  は  $\Delta k_F$  を変 えてもあまり変化しないと期待できる。従って、(2.1) を  $\Delta \mu$  とは少しだけ異なる  $\Delta \mu'$  $(|\Delta \mu - \Delta \mu'| \ll 1)$  のときとの差をとり、 $\eta(L)$  について解いた式

$$\eta(L) \simeq \frac{S_L(\Delta\mu) - S_L(\Delta\mu')}{(\Delta k_F - \Delta k'_F)L} + O\left(\frac{\ln L}{L}\right)$$

$$(2.57)$$

$$\simeq \frac{S_L(\Delta\mu) - S_L(\Delta\mu')}{(\Delta k_F - \Delta k'_F)L}$$
(2.58)



図 2.12 式 (2.58) の *L* 依存性を様々な ( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) の値でプロットしたグラフ。10 サ ンプルで平均したものである (エラーバーは標準偏差)。*W* と  $\mu$  は図 (2.11) と同じも のである。文献 [136] より引用した。

が $1 \ll L \leq L_{\rm C}$ に対して成り立つと期待できる。

式 (2.58) の右辺を ( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) の様々な値でプロットしたものが図 2.12 である。 ( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) が小さいとき (平衡に近いとき) には、(i)-(iii) のいずれも満たされない。\*<sup>12</sup>し かしながら、( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) が大きいところでは、(i)-(iii) のすべての性質が満たされている ことが分かる。実際、図 2.12 により、( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) = (0.4, 0.35), (0.3, 0.25), (0.2, 0.15) の 場合で、式 (2.58) の右辺が重なっていることから、性質 (i) が満たされていることが分か る。性質 (ii) も明らかに満たされている。性質 (iii) は  $a \simeq 0.1$  (付録 C 参照) で満たされ る。これにより、我々は平衡から遠く離れた非自明な NESS に対して、準体積則 (2.1) を 確認できた。

以上の結果は表 2.3 にまとめられている。明らかに、準体積則は平衡から遠く離れた非 自明な NESS 特有であることがわかる。

## 2.11 粒子溜におけるスケーリング

 $L \approx L > L_{\rm C}$ まで増加させると、不純物がなくなり後方散乱を受けなくなるので、図 2.14 のように小さい |p| であっても  $R_L^W$  が増加しなくなってしまう。一方で、図 2.13 よ り、小さい |q| での  $R_L^W$  は  $O(L^2)$  で増加し続ける。その結果、前方散乱のみが  $\delta N_L^2$  の L依存性を決めることになり、その L 依存性は [A-C] と同じで  $O(\ln L)$  となる。一方、図

<sup>\*&</sup>lt;sup>12</sup>  $\Delta k_F \lesssim \Delta k_{\text{peak}}$  のとき、 $\Delta k_F \to 0$  と近づけると、積分は  $\int \tilde{R}_L^W dp \propto (\Delta k_F)^2$  のように振る舞うはず


図 2.13 粒子溜領域  $(L > L_C)$  におい て、 $R_L^W$ (小さい |q|)を $L^2$ で割ったもの のL依存性のグラフ。W = 0.08の場合 をプロットした。 $k_1$ は $\varepsilon_{k_1} = \overline{\mu} = -1.5$ となるようにとった。文献 [136] より引 用した。



図 2.14 粒子溜領域  $(L > L_C)$  において、 $R_L^W$ (小さい |p|)を $L^2$ で割っていないものの L 依存性のグラフ。W = 0.08の場合をプロットした。 $k_1$ は $\varepsilon_{k_1} = \overline{\mu} = -1.5$ となるようにとった。文献 [136] より引用した。

2.14 より、後方散乱からの寄与は一定のオフセットを与える。よって、

 $S_L = \eta(L_C)L_C|\Delta k_F| + O(\ln L) \quad \text{for } L > L_C \tag{2.59}$ 

が得られる。実際に  $L > L_{\rm C}$  で  $S_L$  を計算したのが、図 2.15 である。図 2.15 の赤い曲線 で示したのは、 $L > L_{\rm C}$  の計算結果に本文の式 (2.59) に対して最小自乗法によるフィッ ティングを施したものである。フィッティング関数は、 $c_1 \ln L + c_2$  ( $c_1, c_2$  はフィッティ ングパラメータ) とした。これにより、式 (2.59) にように従うことが確認できた。結局 のところ、 $L > L_C$  の場合は、 $S_L = O(\ln L)$  であることから [A-C] の場合と同じであり、 NESS 特有の結果は現れないことがわかった。

#### 2.12 相関関数

準体積則は、NESS における局所物理量の相関関数が平衡状態の場合とは大きく異なる ことを示唆している。そのことを具体的に調べてみよう。我々のモデルにおいて、2サイ トまでの局所物理量で独立なものは、

- 電子数密度  $\hat{n}(x) := \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_x$
- 電流 *ĵ*(*x*)
- 運動エネルギー  $\hat{e}(x) := \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_{x+1} + \text{h.c.}$



図 2.15 粒子溜領域  $(L > L_C)$  まで含めた、 $S_L$  の L 依存性のグラフ。パラメータは、 W = 0.08、 $\mu = -1.5$ 、 $\Delta \mu = 0.4$  である。文献 [136] より引用した。赤い曲線:本文 の式 (2.59) に対して、数値計算結果を  $L > L_C$ の範囲で最小自乗フィッティングを施 したもの。

の3つである。本節では、これら3つの物理量の自己相関関数の振る舞いについて議論す る。まずはじめに、前節までの結果と相関関数がどのように関係するかを説明する。次 に、密度相関の振る舞いが前節までの結果と整合的であることを確認し、運動エネルギー 相関の振る舞いも密度相関と同様に振る舞うことをみる。

密度相関  $\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle$  は、

$$\langle \Delta \hat{n}(x)\Delta \hat{n}(y)\rangle = -|\Lambda_{xy}|^2 \qquad (|x-y| \ge 1)$$
(2.60)

のように行列  $\Lambda$  の非対角項に直接結びつく。ここで、 $\Delta \hat{n}(x) = \hat{n}(x) - \langle \hat{n}(x) \rangle$  である。密 度相関と粒子数ゆらぎの関係は、 $\delta N_L^2 = \sum_{x,y \in A} \langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle$  であり、粒子数ゆらぎ  $\delta N_L^2$  を行列  $\Lambda$  を使って表すと

$$\delta N_L^2 = \sum_{|x| \le L/2} \Lambda_{xx} (1 - \Lambda_{xx}) - \sum_{x \ne y \in A} |\Lambda_{xy}|^2$$
(2.61)

のように対角項の和と非対角項の和の形に書ける。非対角項の和は、密度相関  $\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle$ の和である。前節までの結果によると、 $\delta N_L^2$ の振る舞いは、表 2.3[A-C] では  $O(\ln L)$  であり、[D] では準体積則に従うことが分かった。これにより、式(2.61) 右辺の振る舞いが [A-C] と [D] の場合とで大きく異なることが分かる。以下で各場合につ いて詳しく調べる。

 $\Delta \mu = W = 0$  (表 2.3[A])のとき、相関関数は簡単な式で表す事ができる。密度相関と 運動エネルギー相関は、

$$\left\langle \Delta \hat{n}(x)\Delta \hat{n}(y)\right\rangle = -\left(\frac{\sin\left[k_F(x-y)\right]}{\pi(x-y)}\right)^2 \quad \text{for } |x-y| \ge 1$$
(2.62)

$$\langle \Delta \hat{e}(x)\Delta \hat{e}(y)\rangle \sim -\left(\frac{2\sin[k_F(x-y)]}{\pi(x-y)}\right)^2 \quad \text{for } |x-y| \gg 1$$
(2.63)

のように表せる(平衡状態なので、 $k_F^{\pm} = k_F$  と書いた)。これらの値はフェルミ波数 2 $\pi/k_F$ (の2分の1)で振動しながら、べき乗で減衰している。従って、式 (2.61) の第2 項のうち  $|x-y| \gg 1$ (遠距離)の部分は、

$$-\sum_{|x-y|\gg 1} |\Lambda_{xy}|^2 \sim -\sum_{|x-y|\gg 1} \frac{(\Xi \varepsilon \mathfrak{B})}{|x-y|^2} \sim -(\Xi \varepsilon \mathfrak{B}) \ln L$$
(2.64)

である。ここで、(正定数) は *L* に依存しない正定数を表す。他方、近距離の部分については、前節までの結果(表 2.3 [A])より  $\delta N_L^2 = O(\ln L)$  であったことから、式(2.61)の 第2項の  $|x - y| \sim 1$ の和 = O(L) と、(第1項) = O(L) とが、絶妙に打ち消し合い、近距離部分の合計は  $O(\ln L)$  となることが分かる。これは絶対零度の特殊性である<sup>\*13</sup>。これらの結果、

$$\delta N_L^2 = \left( \sum_{|x| \le L/2} \Lambda_{xx} (1 - \Lambda_{xx}) - \sum_{|x-y| \sim 1} |\Lambda_{xy}|^2 \right) - \sum_{|x-y| \gg 1} |\Lambda_{xy}|^2$$
(2.65)

$$\sim (\text{IE} \textbf{z} \textbf{X}) \ln L - (\text{IE} \textbf{z} \textbf{X}) \ln L = (\text{IE} \textbf{z} \textbf{X}) \ln L \tag{2.66}$$

となり O(ln L) となったということが分かる。

 $\Delta \mu > 0 \ \ c \ W = 0$  (表 2.3[B])のときは、散乱が一切ないために本質的に平衡状態を並 進運動させたものになり、 $\delta N_L^2$  も  $S_L$  も平衡状態と全く変わらなかった。 $\delta N_L^2$  が全く変 わらないことから、密度関数も平衡の場合 ( $\Delta \mu = 0$ )と全く同じで、式 (2.62)に一致す る。一方で、運動エネルギー相関や電流相関は平衡の場合とは少しだけ異なり、 $\Delta k_F$  依存 性がある。これは、電子数密度とは異なり、運動エネルギーや電流自体がガリレイ変換に

<sup>\*&</sup>lt;sup>13</sup> 次章で見るように、有限温度の平衡状態の場合は、このように打ち消し合うことはない。よって、  $\delta N_L^2 = O(L)$ や $S_L = O(L)$ のように、有限温度の平衡熱力学の結果を再現する。



図 2.16 移動平均した密度相関  $|\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle_{smr}|$ のグラフ。横軸縦軸ともに対数 スケールでプロットしている。10 サンプルでランダム平均し、9 サイトで単純移動平 均した。W = 0.08、 $\overline{\mu} = -1.5$ とし、様々な  $\Delta \mu$  の値に対してプロットした。

より値を変えてしまう量だからである。運動エネルギー相関の式は長いので、付録 E に書いた。結果は平衡の場合( $\Delta \mu = 0$ )[A] の式(2.63)と減衰の仕方は変わらず、 $\frac{1}{|x-y|^2}$ のようにべき乗で減衰する。

W > 0 であっても、 $\Delta \mu = 0$  であれば(表 2.3[C])、相関関数は W = 0 のときと同 じぐらいのべきで減衰する。実際に、密度相関  $\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle_{smr}$  と運動エネルギー相関  $\langle \Delta \hat{e}(x) \Delta \hat{e}(y) \rangle_{smr}$  についての結果をプロットしたのが、それぞれ図 2.16 と図 2.17 である。 ここで、 $\langle \bullet \rangle_{smr}$  は、フェルミ波長程度での振動の寄与を除去するために  $|x - y| \leq \pi/k_F$ の範囲で平均(単純移動平均)をとることを意味している。これらのグラフから、平衡状 態の場合、W > 0 のときの  $\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle_{smr}$  と  $\langle \Delta \hat{e}(x) \Delta \hat{e}(y) \rangle_{smr}$  は、 $|x - y| \gg 1$  で W = 0 のときよりも少しだけ速く減衰する(長距離相関は弱まる)ことが分かる。

一方で、平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 2.3 [D])の場合、相関関数は上記 のいずれとも異なる振る舞いをする。実際に計算した結果は、図 2.16 と図 2.17 のよ うになっている。これらの図を見ると分かる通り、密度相関も運動エネルギー相関も  $1 \ll |x-y| \leq L_{\rm C}$ では小さなべきで減衰している。これは準体積則(2.1)の振る舞いと



図 2.17 移動平均した運動エネルギーの相関  $\langle \Delta \hat{e}(x) \Delta \hat{e}(y) \rangle_{\rm smr}$  のグラフ。横軸縦軸と もに対数スケールでプロットしている。10 サンプルでランダム平均し、9 サイトで単 純移動平均した。W = 0.08、 $\mu = -1.5$ とし、様々な  $\Delta \mu$  の値に対してプロットした。

矛盾しない。図 2.16 より、 $|\Lambda_{xy}| \sim ($ 正定数 $) (|x - y| \gg 1)$  に近い振る舞いをするので、式 (2.61) の第 2 項のうち  $|x - y| \gg 1$  の部分は

$$-\sum_{|x-y|\gg 1} |\Lambda_{xy}|^2 \sim -(\mathbb{E}\mathbb{E}\mathbb{E})L^2$$
(2.67)

と見積もることができる。他方、式 (2.56) ( $S_L$  の言葉で言えば  $\eta(L)L$ )の振る舞いを考慮すると、 $|x-y| \sim 1$ の和の大きさ O(L) と、式 (2.61)の(第1項) = O(L)は互いに打ち消しあうことはなく、合計で O(L) である。以上より、式 (2.61)から

$$\delta N_L^2 = \left( \sum_{|x| \le L/2} \Lambda_{xx} (1 - \Lambda_{xx}) - \sum_{|x-y| \sim 1} |\Lambda_{xy}|^2 \right) - \sum_{|x-y| \gg 1} |\Lambda_{xy}|^2$$
(2.68)

$$\sim (正定数)L - (正定数)L^2 \tag{2.69}$$

と見積もることができる。これは、 $\eta(L)$ が線形のように振る舞っていたことを考慮する と\*<sup>14</sup>、式 (2.56) ( $S_L$ の言葉で言えば  $\eta(L)L$ )の振る舞いと整合的である。つまり、準体 積則は相関関数の振る舞いと整合的であることを示したことになる。準体積則 (2.1) だ けでなく、長距離相関の振る舞いの異常も、平衡から遠く離れた NESS であることと不純 物由来の後方散乱の 2 つの相乗効果により生じるのである。

<sup>\*&</sup>lt;sup>14</sup> このことを確かめるために、付録 C では、フィッティングパラメータを  $a_0, a_1$  として、最小自乗法により  $\eta(L) = a_0 - a_1 L/L_C$  が良い精度でフィットできることを示した。

### 第3章

# 粒子溜が有限温度の場合

この章では、粒子溜が有限温度の場合を調べる。平衡状態では $S_L^{\text{eq}} = O(L)$ であり、熱力学と整合的である。一方で、平衡状態から遠く離れた非自明な NESS では、次のような関係式が成り立っている。

✓ 平衡状態から遠く離れた非自明な NESS の S<sub>L</sub>(有限温度)

$$S_L = \eta(L)L \int_{-\pi}^{\pi} f_\beta(\varepsilon_k - \mu^+) [1 - f_\beta(\varepsilon_k - \mu^-)] dk + O(L) \quad \text{for } 1 \ll L \le L_C$$
(3.1)

ただし、 $\eta(L)$ は絶対零度の結果に出てくる式 (2.2) と同じものである。 $f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^{\pm})$ は左右の粒子溜のフェルミ分布関数である。 $\eta(L)$ の項は、 $S_L$ に対する補正項を与える。O(L)は前方散乱由来であり、 $\eta(L)$ は後方散乱由来である。このサイズ依存性は、平衡から遠く離れた状況かつ、不純物による散乱の2つの要素が合わさって初めて生じる。絶対零度の場合と同様に物理量の長距離相関にやはり異常が現れる。

#### 3.1 量子状態

ハミルトニアンは絶対零度の場合と共通で、式 (2.3) である。さらに、一粒子状態(束 縛状態と散乱状態)も共通である。粒子溜が有限温度の平衡状態であることを反映し て、通常のメゾスコピック系の処方に従い、全系の量子状態を次のように指定する。ま ず、左右の粒子溜は平衡状態であり、左側は ( $\beta^+$ , $\mu^+$ )、右側は ( $\beta^-$ , $\mu^-$ ) で指定される 平衡状態である ( $\beta^\pm$  は左右の粒子溜の逆温度)。ただし、付録 D を除いて、 $\beta^+ = \beta^-$ の場合のみを考察の対象とするため、以下では単に  $\beta$  (=  $\beta^+ = \beta^-$ ) と書くことにする (温度  $T := 1/\beta, k_{\rm B} = 1$ とする)。左右の粒子溜は、1粒子状態がフェルミ分布関数に 従う電子で満たされている。すなわち、k > 0 (k < 0)の散乱状態はフェルミ分布関数  $f_{\beta}(\varepsilon - \mu) := (1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)})^{-1}$ に従うものとする。より正確には、散乱状態間の2点相関 関数が

$$\langle \hat{c}_k^{\dagger} \hat{c}_{k'} \rangle = f_\beta(\varepsilon_k - \mu^{\operatorname{sgn}(k)}) \delta(k - k') \tag{3.2}$$

与えられているとする。ここで、 $\mu^{\text{sgn}(k)}$  は k > 0 か k < 0 に応じてそれぞれ  $\mu^+$ 、 $\mu^-$  で あり、(•) は量子状態の期待値を表す<sup>\*1</sup>。

束縛状態間の2点相関関数は

$$\langle \hat{c}_b^{\dagger} \hat{c}_{b'} \rangle = f_b \delta_{b,b'} \tag{3.3}$$

であるとする。 $f_b$  は左右の粒子溜のフェルミ分布関数の平均値  $f_b := [f_\beta(\varepsilon_b - \mu^+) + f_\beta(\varepsilon_b - \mu^-)]/2$  である。実際には、十分低温な状況のみを考えるので(詳細な条件は後述)、束縛状態はほぼ空か詰まっている状態を対象とする(つまり、 $\varepsilon_b < -2$  のときは  $f_b \simeq 1$  であり、 $\varepsilon_b > 2$  のときは  $f_b \simeq 0$ )。

さらに、束縛状態・散乱状態間の2点相関関数については $\langle \hat{c}_{b}^{\dagger}\hat{c}_{k}\rangle = 0$ とする。その他の 2点相関関数についてはすべてゼロであるとする(つまり、 $\langle \hat{c}_{k}^{\dagger}\hat{c}_{k'}^{\dagger}\rangle = \langle \hat{c}_{b}^{\dagger}\hat{c}_{b'}^{\dagger}\rangle = 0$ )。

以上のことをまとめると、次のようになる。

- 2点相関関数(有限温度)----

$$\begin{split} \langle \hat{c}_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2} \rangle &= f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^{\operatorname{sgn}(k)}) \delta(k - k'), \\ \langle \hat{c}_k^{\dagger} \hat{c}_b \rangle &= 0 \\ \langle \hat{c}_{b_1}^{\dagger} \hat{c}_{b_2} \rangle &= f_b \delta_{b,b'} \end{split}$$

さらに、4点相関関数など多点相関関数の値は、2点相関関数の組み合わせで決まると 仮定する。例えば、4点相関  $\langle \hat{c}_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2} \hat{c}_{k_3}^{\dagger} \hat{c}_{k_4} \rangle$ は

$$\langle \hat{c}_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2} \hat{c}_{k_3}^{\dagger} \hat{c}_{k_4} \rangle = \langle \hat{c}_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_2} \rangle \langle \hat{c}_{k_3}^{\dagger} \hat{c}_{k_4} \rangle + \langle \hat{c}_{k_1}^{\dagger} \hat{c}_{k_4} \rangle \langle \hat{c}_{k_2} \hat{c}_{k_3}^{\dagger} \rangle$$
(3.4)

のように2点相関の組み合わせで分解できる。これにより、任意の物理量の期待値は2点 相関関数のみで決まることが分かる。従って、2点相関関数により全系の量子状態が一意 に定まる。

この多体量子状態は、絶対零度極限 β → ∞ の場合に、前章の粒子溜が絶対零度の場合 に一致する。絶対零度の場合はフェルミ面が well-defined に定まっていたが、有限温度の

<sup>\*1</sup> 同時に出てくることはないので、量子状態の期待値の記号 (●) は絶対零度の場合と同じにしている。

場合は、2つのフェルミ面に温度によるぼけが生じている。温度によるぼけは  $\pm T$  程度で ある。そのようなぼけの k 空間で対応する量  $k_T^{\pm}$  を次のように定める。

$$\varepsilon_{k_{\pi}^{\pm}} = \overline{\mu} \pm T. \tag{3.5}$$

ここで、*T*の範囲を  $|\mu \pm T| \leq 2$  に制限しておく。なぜなら、*T* ≫ 4 (バンド幅) のような、もはやフェルミ面からのぼけとは見なせなくなってしまう高温の状況を除くためである。 $\Delta k_T := k_T^+ + k_T^-$ を左右のフェルミ面からのぼけの平均と定義する。例えば、 $\Delta k_T = 0$ のときは、絶対零度 *T* = 0 に対応し、 $\Delta k_T$ を増やすと*T*も増加する。

#### 3.2 非自明な NESS & 平衡から遠く離れる条件(有限温度)

絶対零度の場合、平衡から遠く離れた非自明な NESS の条件を枚挙すると、以下の通り であった。

- $-1.7 \leq \mu^{\pm} \leq -0.6$  (電子正孔対称性およびバンド端とバンド中央を除外)
- $L_{\rm C} \gg 1$  (QWR が十分に長いこと)
- 0.3 ≤ *G* ≤ 0.7 (絶縁体でなく、かつ平衡状態を並進運動させたものでないこと)

これらの条件は有限温度でも同様であるとする。ただし、無次元化コンダクタンス*G*は、 有限温度効果のために、透過率  $|t_k|^2$ のフェルミ分布関数による平均

$$G = \frac{1}{\Delta\mu} \int_{\mu^-}^{\mu^+} |t_k|^2 (f_\beta(\varepsilon_k - \mu^+) - f_\beta(\varepsilon_k - \mu^-)) d\varepsilon_k$$
(3.6)

のように表される。

有限温度の場合は、これに加えて

┌ 有限温度の場合の、平衡から遠く離れる条件 ────

 $\Delta k_{\text{peak}} \ll \Delta k_T < \Delta k_F = O(1) \tag{3.7}$ 

を要求する。平衡から遠く離れる条件を式(3.7)のようにした理由は以下の通りである。 3つのパラメータ( $\Delta k_T$ 、 $\Delta k_F$ 、 $\Delta k_{peak}$ )によって、非平衡の度合いが特徴づけられる。 有限温度における「平衡から遠く離れた」条件は

$$\Delta k_T, \Delta k_{\text{peak}} \ll \Delta k_F = O(1) \tag{3.8}$$

のように定められる。なぜなら、もし  $\Delta k_T > \Delta k_F$  であったとすると、化学ポテンシャ ル差が温度のぼけに埋もれてしまい、実質的に平衡状態とあまり変わらなくなるからで ある。さらに、 $\Delta k_T \ll \Delta k_{\text{peak}} (\ll \Delta k_F)$ のときは*G*は*T* → 0 とほとんど同じであり、



図 3.1 有限温度における、 $G \circ \Delta \mu$  依存性を現すグラフ。絶対零度の場合のデータ (図 2.6) もプロットしている。W = 0.08、 $\beta = 20$ 、 $\mu = -1.5$  である(温度以外のパ ラメータは、図 2.6 と共通にしてある)。 $G \ge 0 \le \Delta \mu \le 1.0$ の領域でプロットした。  $\Delta \mu = 1.0 \circ 2000$ 、 $\mu^-$  はバンド端  $\epsilon_k = -2.0$  に達する。

従って S<sub>L</sub> の振る舞いも絶対零度の場合とほとんど変わらないと期待される。以上より、 有限温度における「平衡から遠く離れた」条件を、式(3.7)の場合に制限する。

絶対零度の場合と同様に電流期待値から、無次元化非線形コンダクタンス G が得られ、 G の  $\Delta \mu$  依存性をプロットしたのが、図 3.1 である。絶対零度の場合と比べると、広い範 囲で G はほぼ一定である。いま、 $\Delta k_T \gg \Delta k_{\text{peak}}$  であるために、 $\Delta \mu$  が小さい範囲でも 複数のピークが伝導に寄与しているからである。

#### 3.3 電流と粒子数ゆらぎの関係(有限温度)

絶対零度の場合と同様に長さ L の部分系 A を取り、A の縮約密度演算子を使ってフォン・ノイマンエントロピーを定義する。フォン・ノイマンエントロピーの定義は、式 (2.19) で述べた。さらに、有限温度の場合であっても、エントロピーと粒子数ゆらぎの間の不等式 (2.31) は成り立つ。

絶対零度の場合と同じように、行列 Λ を

~ 行列 Λ の定義(有限温度)—

$$\Lambda_{xy} := \langle \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_y \rangle = \int_0^{\pi} dk [\varphi_k^*(x) \varphi_k(y) f_\beta(\varepsilon_k - \mu^+) + \varphi_{-k}^*(x) \varphi_{-k}(y) f_\beta(\varepsilon_k - \mu^-)] + \sum_b \phi_b(x) \phi_b(y) f_b \quad (3.9)$$

のように定義すれば、エントロピーは式(2.21)と同じ形になる。これにより、 $L \times L$ 行列の  $\Lambda$  を対角化すれば、 $S_L$ を計算することができる<sup>\*2</sup>。

$$\delta N_L^2 = \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 R_L^W(k_1, k_2) \Xi_{\beta}^{\overline{\mu}, \Delta \mu}(k_1, k_2)$$
(3.10)

ここで、 $R_L^W$  は絶対零度における恒等式 (2.32) に現れるものと同じであり、すでに表 2.1 にその振る舞いがまとめられている。 $\Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu}$  は

$$\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2) := f_{\beta}(\varepsilon_{k_1} - \mu^{\mathrm{sgn}(k_1)})[1 - f_{\beta}(\varepsilon_{k_2} - \mu^{\mathrm{sgn}(k_2)})]$$
(3.11)

のように、左右の粒子溜の電子と正孔のフェルミ分布関数の積で与えられる。明らかに、  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$ は $0 \leq \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu} \leq 1$ を満たす。

さらに、電流演算子のエルミート性  $J_{k_1k_2}(x+1/2) = (J_{k_2k_1}(x+1/2))^*$  から

$$R_L^W(k_1, k_2) = R_L^W(k_2, k_1). (3.12)$$

が成り立っている。これにより、式 (3.10) の積分変数  $k_1, k_2$  を入れ替えると、式 (3.10) の  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  は  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_2,k_1)$  となる。よって、 $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を直線  $k_2 = k_1$  に関し て折り返しても、もとの式に等しい。この性質は付録 D で用いる。

恒等式 (3.10) は、絶対零度の場合の恒等式 (2.32) と同様に、 $\delta N_L^2$ のパラメータ依存性 を 2 つに分ける;  $R_L^W$  は  $(W, L_C, L)$  であり、 $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu}, \Delta \mu}$  は  $(\beta, \mu^+, \mu^-)$  に依存する。 $R_L^W$  は部 分系 A と QWR によって定まる量であり、 $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu}, \Delta \mu}$  は左右の粒子溜によって定まる量であ ると言い換えることもできる。

<sup>\*2</sup> 同時に出てくることはないので、Λ の記号は絶対零度の場合と同じにしている。

表 3.1 有限温度の場合の、 $S_L \geq \delta N_L^2$ の L 依存性  $(L \leq L_C)$ 

	W = 0	W > 0
$\Delta \mu = 0$	[A] O(L)	[C] O(L)
$\Delta \mu > 0$	[B] O(L)	$[D] \begin{array}{c} \not \exists (3.1)  (for nontrivial \\ NESSs far from equilibrium) \end{array}$

表 3.2  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$ の  $k_1$ 積分  $(q=0 \ m p=0 \ L)$ 

	$\Delta \mu = 0$ and $\Delta \mu > 0$
q = 0	$\int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k,k)$
p = 0	$\int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k,-k)$

#### 3.3.1 式 (3.11) $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$ の振る舞い (表 3.2)

 $\Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu}$ は定義(3.11)より、2つのフェルミ分布関数の積で与えられる。平衡状態においてこれを図示したものが、図 3.2 であり、NESS においてこれを図示したものが、図 3.3 である。図 3.3 が図 3.2 と異なっているところは、 $\Delta\mu > 0$ のために、+45°の方向にシフトしたことである。

図 3.4 も平衡状態の場合であるが、こちらは図 3.2 とは温度が異なっている。図 3.4 の ほうがより高温なため、境界部分がよりぼやけている。

なお、絶対零度極限では、フェルミ分布関数は階段関数、つまり  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2) \rightarrow \Theta(-k_F^- < k_1 < k_F^+)(1 - \Theta(-k_F^- < k_2 < k_F^+))$ となる。これにより前章の積分領域  $\Omega_{\Delta\mu}$ が現れる。

#### 3.4 不純物がない場合 (表 3.1 [A] と [B])

 $\Delta \mu = W = 0$ のとき、空間並進対称性のために、全系の状態は ( $\beta, \mu$ ) によって指定される一様な有限温度平衡状態である。この状態にはもはや QWR と粒子溜の間の区別はない。この平衡状態は格子上の理想フェルミ気体であり、解析は非常に容易である。任意の物理量は直接計算できるが、後に NESS の場合に一般化するために、恒等式 (3.10) を用いて  $S_L$  の L 依存性を議論する。

平衡状態 ( $\Delta \mu = 0$ ) のとき、 $\Xi_{\beta}^{\mu, \Delta \mu = 0}$  は図 3.2 のようになっている。特に W = 0 のと きは、 $R_L^W$  は式 (2.37) に一致する。このときの  $R_L^{W=0}$  の振る舞いはすでに述べたように、 q = O(1/L) で  $R_L^{W=0} = O(L^2)$  の大きさのピークを持つ (表 2.1 にまとめられている)。 このようなピーク値は  $q \simeq 0$  以外には生じない。そこで、積分範囲を  $|q| \leq \varepsilon$   $\geq |q| > \varepsilon$ 



図 3.2  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を  $(k_1,k_2)$ の関数としてカラーマップで描画したもの。 こちらは平衡の場合であり、 $\beta = 10$ および  $\mu^+ = \mu^- = -1.0$ である。



図 3.4  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を  $(k_1,k_2)$ の関数としてカラーマップで描画したもの。 こちらは平衡の場合であり、 $\beta = 5$ および  $\mu^+ = \mu^- = -1.0$ である。



図 3.3  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を  $(k_1,k_2)$ の関 数としてカラーマップで描画したもの。 こちらは NESS の場合であり、 $\beta = 10$ 、  $\mu^+ = -0.6$ 、 $\mu^- = -1.4$ である。

に分ける。 $\varepsilon$ はLに依存しない正定数である(絶対零度の場合と同じ定義)。 $|q| > \varepsilon$ での

 $R^0_L$ の値は高々O(1)であるため、その範囲の積分も高々O(1)である。よって

$$\delta N_L^2 = \iint_{|q| \le \varepsilon} dk_1 dq R_L^{W=0}(q) \Xi_\beta^{\overline{\mu}, \Delta \mu = 0}(k_1, k_1 + q) + O(1)$$
(3.13)

$$= \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \left( \int_{|q| \le \varepsilon} dq R_L^{W=0}(q) \right) \Xi_{\beta}^{\overline{\mu}, \Delta \mu = 0}(k_1, k_1) + o(L)$$
(3.14)

$$= \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu=0}(k,k) + o(L)$$
(3.15)

となる<sup>\*3</sup>。積分  $\int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\overline{\mu}, \Delta \mu = 0}(k, k)$  は表 3.2 にまとめられているものである。不等式 (2.31) により、 $S_L = O(L)$  が言える (表 3.1 [A] にまとめられている)。 $S_L$  は平衡エント ロピーであるため、 $S_L$  は示量的であり、平衡熱統計力学と整合的である。

W = 0 であれば、 $\Delta \mu > 0$  のときも、 $R_L^0$  の振る舞いが共通であることに注意すれば上 と同様の議論が成り立つ。ただしこのときは、左右の粒子溜の  $\mu$  が異なるため、 $S_L$  は2 つの粒子溜の平衡エントロピーの平均値となる (表 3.1 [B] にまとめられている)。

注目すべきは、 $\Delta \mu = 0$ も  $\Delta \mu > 0$ の場合も、W = 0のために  $R_L^{W=0}$ の L 依存性が定まり、その結果  $q \simeq 0$ の積分だけで  $\delta N_L^2$  (および  $S_L$ )の L 依存性が決まる、ということである。さらに、絶対零度極限 ( $\beta \to \infty$ )をとると  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k,k) \to 0$ 、すなわち  $S_L \to o(L)$  (実際には、 $S_L \to O(\ln L)$  [113,114])となり、前章の結果を再現する。

#### 3.5 不純物ありの平衡状態 (表 3.1 [C])

平衡状態( $\Delta \mu = 0$ )の場合には、 $\Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu=0}$ は前節の平衡状態の場合の図 3.2 と共通で ある。一方で、ランダムポテンシャルがある場合 (W > 0)、絶対零度の場合に述べたよう に、 $q \simeq 0$ だけでなく  $p \simeq 0$ の場合も  $R_L^W = O(L^2)$ となる (表 2.1 にまとめられている)。 そこで、恒等式 (3.10)の積分領域を  $|q| \le \varepsilon$ 、 $|p| \le \varepsilon$ 、それ以外の3つに分ける( $\varepsilon$ は前 節と同じもので、L に依存しない正定数である)。このうち、  $|q| \le \varepsilon 2$   $|p| \le \varepsilon$ の積分

$$\iint_{|p|\leq\varepsilon} dk_1 dk_2 R_L^W \Xi_\beta^{\overline{\mu},\Delta\mu=0} \quad (\&f\&)$$
(3.17)

が $\delta N_L^2$ の L 依存性を決める。なぜなら、それ以外の領域の積分はO(1)の寄与しかもたらさないからである。すなわち、

$$\delta N_L^2 = \iint_{|q| \le \varepsilon} dk_1 dk_2 R_L^W \Xi_\beta^{\overline{\mu}, \Delta \mu = 0} + \iint_{|p| \le \varepsilon} dk_1 dk_2 R_L^W \Xi_\beta^{\overline{\mu}, \Delta \mu = 0} + O(1) \quad (3.18)$$

\*3 
$$L/2\pi$$
 は  $\int_{-\pi}^{\pi} dq R_L^{W=0}(q) = L/2\pi$  が成り立つことによる。

のように書ける。この式は、 $\Delta \mu = W = 0$ のときの式(3.13)に対応するものである。  $\Delta \mu = W = 0$ のときとの違いは、後方散乱に由来する項(p積分)も L 依存性に寄与す ることである。式(3.18)は

$$\delta N_L^2 = \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \Xi_{\beta}^{\overline{\mu}, \Delta \mu}(k_1, k_1) \left( \int_{|q| \le \varepsilon} dq \tilde{R}_L^W + \int_{|p| \le \varepsilon} dp \tilde{R}_L^W \right) + o(L)$$
(3.19)

のように評価できる。ここで、 $\tilde{R}_{L}^{W}$ は絶対零度の場合の式(2.52)に現れたのと同じもの である(表 2.1 にまとめられている)。積分  $\int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu=0}(k,k)$ は表 3.2 にまとめられて いるものである。式変形の途中で、 $\Delta\mu = 0$ より、 $\Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu=0}(k_{1},-k_{1}) = \Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu=0}(k_{1},k_{1})$ であることを用いた。W = 0のときと同様の理由から両方の積分はO(L)となるので、  $\delta N_{L}^{2} = O(L)$ が得られ、 $S_{L} = O(L)$ が期待される。このことは、 図 3.5 から確認でき る。 $S_{L}$ は示量的であり、平衡熱力学と矛盾しない結果が得られた(表 3.1 [C] にまとめら れている)。

#### 3.6 平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 3.1 [D])

 $W > 0, \Delta \mu > 0$ のときは、 $R_L^W$ は前節 (表 3.1 [C]) の場合と共通であるが、一方で  $\Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu}$ が図 3.2 から図 3.3 へ変化する。これにより、 $S_L$ の振る舞いは他の場合(表 3.1 [A-C])とは大きく異なる<sup>\*4</sup> 。図 3.5 から、 $\Delta \mu$ が大きいところでは、 $S_L = O(L)$ のようには振る舞っていないことがわかる。このことは以下のメカニズムにより生じる。

 $R_L^W$ の振る舞いは前節と変わらないので、恒等式 (3.10) のうち、 $|q| \le \varepsilon$  と  $|p| \le \varepsilon$ の 積分が L 依存性の主要項となり、それ以外の領域の積分は O(1) である。つまり

$$\delta N_L^2 = \iint_{|q| \le \varepsilon} dk_1 dk_2 R_L^W \Xi_\beta^{\overline{\mu}, \Delta\mu} + \iint_{|p| \le \varepsilon} dk_1 dk_2 R_L^W \Xi_\beta^{\overline{\mu}, \Delta\mu} + O(1)$$
(3.20)

のように書ける。式(3.18)と見た目は似ているが、 $\Delta \mu > 0$ のために  $\Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu}$ が異なることに注意されたい。第1項の積分と第2項の積分を別々に評価する。

<sup>\*4</sup> エントロピーが平衡よりも大きくなってしまう理由は、絶対零度の場合と同様の理由で、 $\Delta \mu$  を増大さ せると部分系のエネルギー期待値が増大する(一方で、粒子数期待値はほぼ変化しない)ためである。 粒子溜が有限温度の場合は、部分系のサイズを固定し、部分系のエネルギー期待値  $E_L$  と粒子数期待値  $N_L$  が一定になるように ( $\beta, \overline{\mu}$ ) を調整しつつ、 $\Delta \mu$  を変化させたときのフォン・ノイマンエントロピー  $S_L(E_L, N_L; \Delta \mu)$ の振る舞いを調べることもできる( $L = L_C$ 、 $\overline{\mu} = 0$ の場合であるが、筆者は修論 [26] でこのことを実際に調べた)。 $S_L(E_L, N_L; \Delta \mu)$ は、 $\Delta \mu$  を増加させたときには、減少することが数値計 算の結果からわかっている。



図 3.5  $L \leq L_{\rm C}$  の範囲で  $S_L$  を L の関数としてプロットしたグラフ。10 サンプルで ランダム平均をとった。W = 0.08、 $\overline{\mu} = -1.25$ として、様々な  $\beta$ 、 $\Delta \mu$  の値でプロットした ( $G \simeq 0.3$ )

式(3.20)の第2項の積分は、

$$\iint_{|p|\leq\varepsilon} dk_1 dk_2 R_L^W \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$$

$$= \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \left( \int_{|p|\leq\varepsilon} dq R_L^W(k_1, -k_1 + p) \right) \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1, -k_1) + o(L)$$

$$= \left( \int_{|p|\leq\varepsilon} dq \tilde{R}_L^W \right) \left( \int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k, -k) \right) + o(L)$$
(3.21)

のように書ける。 $\tilde{R}_{L}^{W}$ は絶対零度の場合の式 (2.52)と同じであり(表 2.1 にまとめられている)、 $\int_{|p|\leq\varepsilon} dq \tilde{R}_{L}^{W}$ は絶対零度の式 (2.54)に現れたものと全く同じ積分である。この積分は基本的にO(L)で増大するが、Lの増大に従い後方散乱が弱まってしまうために、O(L)よりも少しだけ小さく増大するのだった。積分 $\int_{-\pi}^{\pi} dk \Xi_{\beta}^{\mu,\Delta\mu}(k,-k)$ は表 3.2 にまとめられているものである。

式(3.20)の第1項の積分は、直接計算すると2重積分を数値計算することになり、数 値誤差で正しい結果が得られなくなる可能性がある。一方で、別の NESS を複数用意し て間接的に計算することもでき、これだと  $S_L$  や  $\delta N_L^2$  の計算などと同様に1 重積分だけ で済む。方法の詳細は付録 D で述べてあるが、ここではその概略を示す。まず (W, L<sub>C</sub>) を共通にして、( $\beta^{\pm}, \mu^{\pm}$ )の値が異なる複数の NESS を用意する。(W, L<sub>C</sub>) を共通にする ことで  $R_L^W$  も共通となることから、調整した複数の NESS における  $\delta N_L^2$  の和や差は、単 に  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$  の和や差を考えればよい。( $\beta^{\pm}, \mu^{\pm}$ )をうまく調整して複数の  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$  を切り貼 りすると、式 (3.20)の第1項の積分の  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}$  とちょうど一致する。よって、( $\beta^{\pm}, \mu^{\pm}$ ) を調整して  $\delta N_L^2$  を複数計算し、和や差を組み合わせれば式 (3.20)の第1項の積分が得 られる (調整の仕方は付録 D 参照)。これが方法の概略である。表 2.1 により、式 (3.20) の第1項の積分も O(L)の量である。

不等式 (2.31) から、絶対零度の場合のように、 $S_L$  も  $\delta N_L^2$  と同様の L 依存性を持つこ とが期待される。 $S_L$  が  $\delta N_L^2$  と同様に振る舞うかどうかは、絶対零度の場合と異なり、実 際に数値計算により確かめる必要がある。絶対零度の場合は、 $\delta N_L^2$  の前方散乱からの寄 与は  $O(\ln L)$  だったので、後方散乱からの寄与が主要項になった。なので、 $S_L$  の L 依存 性も不等式 (2.31) から  $\delta N_L^2$  の後方散乱と (ln L の不定性を除けば) 同じになるのであっ た。しかし、有限温度の場合は前方散乱からの寄与も O(L) であるので、不等式 (2.31) だ けからは  $S_L = O(L)$  以上のことはわからない。なので、 $S_L$  が  $\delta N_L^2$  と同様に振る舞うか どうかは、数値計算により確かめる必要がある。

 $S_L$  が $\delta N_L^2$  と同様の L 依存性を持つとすると、 $S_L$  は式 (3.1) のように振る舞うはずで ある。このことを以下で数値的に確認する。式 (3.1) のうち、前方散乱項を  $S_L^F$ 、後方散 乱項を  $S_L^B$  とする。 $S_L^F$  は、 $\delta N_L^2$  における式 (3.20) の第1項の積分に対応するものであ る。この積分は複数の NESS における  $\delta N_L^2$  の組み合わせで構成できた。これと同じパラ メータにおける  $S_L$  の組み合わせ (付録 D 参照) で  $S_L^F$  も表すことができると期待できる。

さらに、式(3.1)右辺のo(L)(有限サイズ効果)をできる限り除去するために、 $\Delta \mu$  での  $S_L^{\rm B}$  から別の  $\Delta \mu'$ ( $|\Delta \mu - \Delta \mu'| \ll 1$ )のそれを差し引く(この部分は絶対零度のときと同様に  $\Delta \mu$  にはあまり敏感に依存しないと期待できる)。これにより、 $1 \ll L \leq L_{\rm C}$  で

$$\eta(L) \simeq \frac{S_L^{\mathrm{B}}(\Delta\mu) - S_L^{\mathrm{B}}(\Delta\mu')}{L \int_{-\pi}^{\pi} (\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k,-k) - \Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu'}(k,-k)) dk}$$
(3.22)

となることが期待される。

実際に、式 (3.22) の右辺を様々な値の ( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) でプロットしたのが、図 2.12 である。図 3.6 には、絶対零度の場合の結果も載せている。平衡に近いものは、絶対零度の $\eta(L)$  とは異なる振る舞いをしていることがわかる。この場合だけ特にエラーバーが大きいのは、平衡に近いと後方散乱由来の項がそもそも小さいために、相対的に誤差が大きくなってしまうからである。

一方で、平衡から遠いものについては、絶対零度の η(L) と一致していることがわかる。



図 3.6 式 (3.22) の *L* 依存性を様々な  $\beta$  と ( $\Delta\mu, \Delta\mu'$ ) の値でプロットしたグラフ。 10 サンプルで平均したものである(エラーバーは標準偏差)。*W* と  $\mu$  は図 (3.5) と同 じものである。

つまり、上で仮定していたことは数値的に確かめられたことになる。さらに、有限温度の $\eta(L)$ の標準偏差は絶対零度の場合と比べて小さいこともわかる。この理由は、有限温度によるフェルミ面のぼけのために  $|t_k|^2$ の個々のピークの影響(および波動関数の激しいk依存性)が平均化されるからである、と考えられる。

絶対零度極限  $(\beta \to \infty)$  をとると  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k,k) \to 0$ 、すなわち  $S_{L}^{\mathrm{F}} \to o(L)$  (実際には、  $S_{L}^{\mathrm{F}} \to O(\ln L)$ ) となり、一方で  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k,-k) \to \Delta k_{F}$ 、すなわち  $S_{L}^{\mathrm{B}} \to \eta(L)L\Delta k_{F}$  が得られ、絶対零度の結果 [136] が再現される。

#### 3.7 粒子溜におけるスケーリング(有限温度)

 $L > L_{\rm C}$ のときは、 $S_L$ の L依存性は自明な結果になる。このとき  $S_L$ は W や  $\Delta \mu$  に よらず示量的に振る舞い、Lの比例係数は粒子溜のエントロピー密度で決まる。このこと は、 $L \gg L_{\rm C}$ という極端な状況を考えると分かりやすい。 $L \gg L_{\rm C}$ のとき、部分系 A内 部で不純物がある領域は粒子溜領域に比べて無視できるほど小さい。そうすると、 $S_L$ は 粒子溜のエントロピーのみで実質的に定まってしまう。粒子溜は平衡状態なので、*S<sub>L</sub>*は 2つの粒子溜の平衡エントロピーの平均値に過ぎない:

$$S_L = \overline{s}_{eq}L + o(L) \tag{3.23}$$

$$\overline{s}_{eq} = \frac{s_{eq}(\beta, \mu^+) + s_{eq}(\beta, \mu^-)}{2}$$

$$(3.24)$$

$$s_{\rm eq}(\beta,\mu) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dkh \left( f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu) \right)$$
(3.25)

ただし、h(x)は式 (2.28)で定義したものである。 $s_{eq}(\beta, \mu^{\pm})$ はそれぞれ左右の粒子溜の 平衡エントロピー密度であり、 $\beta, \mu^{\pm}$ のみに依存し、 $L_{C}, W$ に依存しない(伝導体の性質 とは無関係である)。

伝導体の性質は絶対零度の場合と同様に、オフセットのみに現れる。すなわち、 $L > L_C$ のとき

$$S_L = \eta(L_{\rm C})L_{\rm C} \int_{-\pi}^{\pi} f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^+) [1 - f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^-)]dk + \overline{s}_{\rm eq}(L - L_{\rm C}) + (\texttt{RM}\mathfrak{A})$$
(3.26)

が成り立つ。余剰項は直線からの僅かなずれを表す項であり、他の項に比べて非常に小さい項である。第1項が伝導体の状態数(の対数)であり、第2項が粒子溜の状態数(の対数)を表すと解釈できる。上の $L \gg L_{\rm C}$ という極端な状況での議論は、式(3.26)の右辺第2項が他の項に比べて非常に大きい状況に対応している。

このように、 $L > L_{\rm C}$ のときは、 $S_L$ のL依存性は自明であり、主に2つの粒子溜の平衡エントロピーの平均値で決まる。これは NESS のエントロピーと呼ぶべき量ではなく、平衡状態のエントロピーに過ぎない。したがって、非自明なのは、 $L \leq L_{\rm C}$ の平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 3.1 [D])の場合だけである。

#### 3.8 相関関数(有限温度)

この節では、絶対零度の場合と同様に、有限温度についても局所物理量の自己相関関数の振る舞いを調べる。着目する局所物理量は2サイト演算子までに限れば、電子数密度  $\hat{n}(x)$ 、電流  $\hat{j}(x)$ 、運動エネルギー  $\hat{e}(x)$  の3つを調べれば十分なのであった。3つの相関関数のうち、 $\hat{n}(x)$  の相関と  $\hat{j}(x)$  の相関は、式 (3.10) により結びついている。さら に、 $\hat{n}(x)$  の相関は、式 (3.21) が存在する、平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 3.1 [D]) の場合にのみ異なることも分かる (詳しくは後述)。したがって、3つの相関関数の うち、運動エネルギー相関  $\langle \Delta \hat{e}(x) \Delta \hat{e}(y) \rangle$  の振る舞いだけがまだ判明していない。ここ で、 $\hat{e}(x) = \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_{x+1} + \text{h.c.}$ 、 $\Delta \hat{e}(x) = \hat{e}(x) - \langle \hat{e}(x) \rangle$  である。この節では、まずはじめに、前節までの結果と相関関数がどのように関係するかを説明する。次に、密度相関の振る舞

いが前節までの結果と整合的であることを確認し、運動エネルギー相関の振る舞いも密度 相関と同様に振る舞うことをみる。

密度相関は、行列 Λ を使って表すと、

$$\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle = -|\Lambda_{xy}|^2 \qquad (y \neq x) \tag{3.27}$$

のように行列  $\Lambda$  の非対角項に直接結びつく。密度相関と粒子数ゆらぎの関係は、 $\delta N_L^2 = \sum_{x,y \in A} \langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle$  であり、粒子数ゆらぎ  $\delta N_L^2$  を行列  $\Lambda$  を使って表すと

$$\delta N_L^2 = \sum_{|x| \le L/2} \Lambda_{xx} (1 - \Lambda_{xx}) - \sum_{x \ne y \in A} |\Lambda_{xy}|^2$$

$$(3.28)$$

のように対角項の和と非対角項の和の形に書ける。第1項は一重和であり、 $\Lambda_{xx}$  は実数で  $0 \leq \Lambda_{xx} \leq 1$ を満たすので正項級数である<sup>\*5</sup>。正項級数なので、(第1項) = O(L)が得ら れる。一方、二重和で表されている第2項は、密度相関  $\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle$  ( $y \neq x$ )の和であ る。この和は、密度相関の振る舞いに応じて変化し得る。つまり、この和が $\delta N_L^2$ の L 依 存性の異常と直接結びつくのである。前節までの結果から、平衡から遠く離れた非自明な NESS の場合のみ、 $L \leq L_C$  で $S_L \geq \delta N_L^2$ に補正項が現れることがわかったので(表 3.1 [D])、この場合に密度相関の振る舞いが大きく変化することが分かる。実際に、平衡から どのように変化するかを以下で解析する。

有限温度の場合、平衡状態( $\Delta \mu = 0$ )では、密度相関〈 $\Delta \hat{n}(x)\Delta \hat{n}(y)$ 〉も運動エネル ギー相関〈 $\Delta \hat{e}(x)\Delta \hat{e}(y)$ 〉も*W* に関係なく指数関数的に減衰する。この性質は非常にもっ ともらしいものであり、臨界点を除けば平衡統計力学の多くの適切なモデルで広く観察さ れている。実際に計算した結果、図 3.7 と図 3.8 のようになり、確かにどちらの相関関数 も指数関数的に減衰していることが分かる。 ここで、〈•〉<sub>smr</sub> は移動平均を表し、フェル ミ波長程度での振動の寄与を除去するために移動平均するのであった。加えて、図 3.7 と 図 3.8 の高温 *T* = 0.1 と低温 *T* = 0.05 の場合を比較したときに、高温の場合のほうが 速く減衰していることが分かる。指数関数的な減衰のために、式(3.28)の第2項のうち  $|x-y| \gg 1$ の部分はほとんど寄与しなくなり、 $|x-y| \sim 1$ の和が主要な寄与となり、大 きさは *O*(*L*) である。さらに、(第1項) = *O*(*L*) という結果と合わせれば、 $\delta N_L^2 = O(L)$ となり、これまでの結果を再現する。*S<sub>L</sub>*の振る舞いも平衡統計力学と整合的であったが、 相関関数についても非常にもっともらしい結果が得られた。

有限温度 (T > 0) だと、 $\Delta \mu > 0$  の場合、W = 0 であっても平衡状態の場合  $(\Delta \mu = 0)$ とは異なる。この点は、絶対零度の場合 (T = 0) とは大きく違っている。絶対零度の場合 は、W = 0 のときは、 $\Delta \mu = 0$  と  $\Delta \mu > 0$  とではフォン・ノイマンエントロピーの振る

<sup>\*5</sup> 以下の議論で直接用いることはないが、対角項  $\Lambda_{xx}$  は、 $\Lambda_{xx} = \langle \hat{n}(x) \rangle$ (電子数密度の期待値)に一致する。



図 3.7 移動平均した密度相関  $|\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle_{smr}|$ のグラフ。縦軸は対数スケール でプロットしている。10 サンプルでランダム平均し、9 サイトで単純移動平均した。  $W = 0.08, \bar{\mu} = -1.25$ とし、様々な $\beta, \Delta \mu$ の値に対してプロットした。

舞いは完全に等しくなった。これは  $\Delta \mu > 0$  であっても平衡状態を並進運動させたものに 過ぎなかったからである。一方で、有限温度の場合は、W = 0 であっても、 $\Delta \mu = 0$  と  $\Delta \mu > 0$  とではエントロピーの振る舞いは必ずしも等しくはならないし、相関関数の振る 舞いも大きく異なる。単なる平衡状態を並進運動させたものではない非平衡状態だからで ある<sup>\*6</sup>。この場合、密度相関  $\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle$  はべき乗で減衰する。密度相関だけでなく、 運動エネルギー相関や電流相関もべき乗で減衰する。相関関数のべき乗の減衰の詳細は付 録 E に書いてあるが、結果だけを述べておくと、 $|\Lambda_{xy}| \sim \frac{(E c \Sigma)}{|x-y|}$  ( $|x-y| \gg 1$ )のよう に振る舞うために、3つの相関関数もべき乗で減衰する。実際に密度相関の振る舞いを計 算した結果、図 3.9 のようになり、 $|\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle| \sim \frac{1}{|x-y|^2}$ のように振る舞っている ことが分かる。ただし、このべき乗の振る舞いは、エントロピーの示量性を変えることは

<sup>\*6</sup> 一般に、有限温度の平衡状態には、重心速度がゼロとなるような慣性系が存在する。いま、左右の粒子 溜にこのような慣性系がそれぞれ存在するが、それらが一致しないために非平衡状態となる。しかしなが ら、散乱が一切無いために、非平衡状態とはいっても自明な状態である。



図 3.8 移動平均した運動エネルギーの相関  $|\langle \Delta \hat{e}(x) \Delta \hat{e}(y) \rangle_{smr}|$ のグラフ。縦軸は対数スケールでプロットしている。10 サンプルでランダム平均し、9 サイトで単純移動 平均した。W = 0.08、 $\overline{\mu} = -1.25$ とし、様々な $\beta$ ,  $\Delta \mu$  の値に対してプロットした。

ない。式 (3.28) の第2項のうち |x - y| ≫1の部分は、

$$-\sum_{|x-y|\gg 1} |\Lambda_{xy}|^2 \sim -\sum_{|x-y|\gg 1} \frac{(\exists \exists \exists b)}{|x-y|^2} \sim -(\exists \exists b) \ln L$$
(3.29)

である。ここで、(正定数) は *L* に依存しない正定数を表す。一方で、 $|x-y| \sim 1$ の和の 大きさは O(L) であり、式 (3.28) の第2項は平衡の場合と同じく O(L) である。(第1項) = O(L) であることから、 $\delta N_L^2 = O(L)$  となり、平衡の場合と同じくこれまでの結果を再 現する。エントロピーだけで見ればほとんど平衡状態と変わらない(2つの粒子溜の平衡 エントロピーの平均値に過ぎなかった)が、相関関数の振る舞いは平衡の場合とは大きく 異なる。

一方で、平衡から遠く離れた非自明な NESS (表 3.1 [D]) の場合、相関関数は上記のいず れとも異なる振る舞いをする。実際に計算した結果は、図 3.7 と図 3.8 のようになってい る。これらの図を見ると分かる通り、密度相関も運動エネルギー相関も  $1 \ll |x-y| \leq L_{\rm C}$ では小さなべきで減衰している。さらに、 $1 \ll |x-y| \leq L_{\rm C}$  では絶対零度の場合と同様の



図 3.9 W = 0、 $\Delta \mu > 0$ の場合の密度相関  $|\langle \Delta \hat{n}(x) \Delta \hat{n}(y) \rangle|$ のグラフ。横軸、縦軸 は対数スケールでプロットしている。このグラフは移動平均していない。計算結果と 比較するために、水色の直線  $10^{-4}/|y-x|^2$ を表しているが、因子  $10^{-4}$  はグラフ内に 収まるように適当にとった。

振る舞いが見られる。これは準体積則(絶対零度の場合は式(2.1)、有限温度の場合は式 (3.1))の振る舞いと矛盾しない。図 3.7 より、絶対零度の場合と同様に  $|\Lambda_{xy}| \sim$  (正定数)  $(|x-y| \gg 1)$  に近い振る舞いをするので、式 (3.28) の第 2 項のうち  $|x-y| \gg 1$  の部分は

$$-\sum_{|x-y|\gg 1} |\Lambda_{xy}|^2 \sim -(\mathbb{E}\mathbb{E}\mathbb{E})L^2$$
(3.30)

のように見積もることができる。他方、式 (3.21) ( $S_L$  の言葉で言えば  $\eta(L)L \times (IE)$ ) の振る舞いを考慮すると、 $|x - y| \sim 1$ の和の大きさ O(L) と、式 (3.28) の(第1項) = O(L) が打ち消し合うことはなく、合計で O(L) である。以上より、式 (3.28) から

$$\delta N_L^2 = \left( \sum_{|x| \le L/2} \Lambda_{xx} (1 - \Lambda_{xx}) - \sum_{|x-y| \sim 1} |\Lambda_{xy}|^2 \right) - \sum_{|x-y| \gg 1} |\Lambda_{xy}|^2$$
(3.31)

$$\sim (正定数)L - (正定数)L^2 \tag{3.32}$$

と見積もることができる。これは、 $\eta(L)$ が線形のように振る舞っていたことを考慮する

と、式 (3.21) ( $S_L$  の言葉で言えば  $\eta(L)L$ )の振る舞いと整合的である。以上のことから、 式 (3.1)の  $S_L$  の補正の振る舞いを、相関関数から見積もることができた。絶対零度の場 合も有限温度の場合も、式 (2.1)と式 (3.1)に現れる  $\eta(L)$ は共通であり、平衡から遠く 離れた状況であることと不純物由来の後方散乱の2つによって生じた。絶対零度の場合と 有限温度の場合とで  $\eta(L)$ が共通であることから、相関関数の長距離の振る舞いも共通に なったのである。

#### 第4章

# 結論

#### 4.1 本研究の結果のまとめ

本論文では、メゾスコピック伝導体の NESS におけるフォン・ノイマンエントロピーの 体積依存性を解析した。フォン・ノイマンエントロピーは、着目領域のミクロ状態の状態 数と解釈できるのだった。NESS を実現するための粒子溜が絶対零度の場合を第2章で調 べ、有限温度の場合を第3章で調べた。

#### 4.1.1 粒子溜が絶対零度の場合(第2章)

粒子溜が絶対零度であるために、粒子溜を含めた全系が量子純粋状態となるので、着 目系のフォン・ノイマンエントロピーはエンタングルメントエントロピーに一致する。 NESS のエンタングルメントエントロピー(フォン・ノイマンエントロピーも含めて)を 調べた先行研究 [132–134] は存在するが、これらはすべて空間並進対称性のある NESS である。そのために、これらの NESS は実質的に平衡状態を並進運動させたものに過ぎ ない。

本論文の NESS は、空間並進対称性を破る不純物散乱のために、これら先行研究の NESS [132–134] とは大きく異なる非自明な NESS が実現されている。2.3 節では、非自 明な NESS になる条件(2.3 節最後の囲み)を提示した。この条件のもとで、2.4 節では 平衡から遠く離れる条件(2.24)を提示した。2.5 節と 2.6 節では、実際に解析するうえ で重要になる粒子数ゆらぎとエントロピーの不等式(2.31)と、粒子数ゆらぎに対して成 り立つ恒等式(2.32)を提示した。

平衡状態( $\Delta \mu = 0$ )では、不純物散乱のあるなしにかかわらず(W = 0 でも W > 0でも)、フォン・ノイマンエントロピーは対数則  $S_L = O(\ln L)$  に従うことを示した(2.7 節、2.9 節)。NESS の場合でも( $\Delta \mu > 0$ )、W = 0 であれば平衡状態を並進運動させた ものと本質的に変わらず、対数則  $S_L = O(\ln L)$  に従うことが分かった(2.8 節)。平衡から離れた非自明な NESS では、 $S_L$  は準体積則 (2.1) に従うように異常に増大することが分かった(2.10 節)。準体積則 (2.1) に現れる  $\eta(L)$  は、式 (2.2) を含む性質 (i-iii) を満たす L の関数である。これらの結果を表 2.3 にまとめた。

準体積則は、 $S_L \ge aL|\Delta k_F| + O(\ln L)$ を意味するので、先行研究の $S_L \le O(\sum_{\nu} S_L^{eq})$ [121–134] とは対照的に、 $S_L > O(S_L^{eq})$  となることが分かった。この異常な振る舞いは、 平衡から遠く離れたことと、系の並進対称性を破る不純物による多重散乱の2つが合わ さってはじめて生じることが分かった。さらに、2.12節では、これら2つの相乗効果によ り、局所物理量の長距離相関に異常な発達を伴うことも分かった。

これらの結果はすべて  $L \leq L_{\rm C}$  (QWR 領域)の場合であるが、 $L > L_{\rm C}$  (粒子溜領域) の場合は(2.11節)、式(2.59)のように、オフセットを伴った対数則が得られることが分 かった。粒子溜領域では散乱がないために、平衡の場合と実質的に同じ結果しか得られな いのであった。これもまた、並進対称を破る多重散乱の重要性を示している。

#### 4.1.2 粒子溜が有限温度の場合(第3章)

粒子溜が有限温度の場合のフォン・ノイマンエントロピーは、絶対零度の場合とは違っ てエンタングルメントエントロピーではなくなるが、着目領域のミクロ状態の状態数で あることは変わらない。有限温度の場合でも、非自明な NESS が実現するためには、並 進対称性を破る散乱が本質的である(3.2 節)。有限温度で平衡から遠く離れる条件(3.7) は、絶対零度の場合の条件に、化学ポテンシャル差が温度ぼけに埋もれない条件が加わ る。3.3 節では、絶対零度の場合に示した粒子数ゆらぎとエントロピーの不等式が有限温 度でも成立することを説明し、粒子数ゆらぎの恒等式の有限温度版を提示した。

不純物がない場合 (W = 0)、平衡状態 ( $\Delta \mu = 0$ ) であれば、 $S_L$  は熱力学エントロピー に一致し、示量的 ( $S_L = O(L)$ ) なのである (3.4 節)。NESS ( $\Delta \mu > 0$ ) のときも、不純物 がなければ (W = 0)、散乱が一切ないために、 $S_L$  は 2 つの粒子溜の熱力学エントロピー の平均値に一致し、 $S_L = O(L)$  なのである (3.4 節)。不純物がある場合 (W > 0) も、平 衡状態 ( $\Delta \mu = 0$ ) であれば、 $S_L$  は熱力学エントロピーに一致するために、 $S_L = O(L)$  な のである (3.5 節)。不純物がある NESS の場合 (W > 0、 $\Delta \mu > 0$ )、特に平衡から遠く 離れた非自明な NESS では、 $S_L$  は式 (3.1) に従うことが分かった (3.6 節)。これは、平 衡から遠く離れた状況および不純物由来の多重散乱の 2 つがあって初めて生じることが分 かった。さらに、式 (3.1) に現れる  $\eta(L)$  は、絶対零度の場合と共通であることも示した。

3.8 節では、局所物理量の長距離相関がどのように振る舞うかを調べた。その結果、平 衡から遠く離れた非自明な NESS の場合は、長距離相関の異常な発達が生じていること が分かった。この長距離相関の異常は、式 (3.1) と整合的であることも示した。さらに、 長距離相関の振る舞いが絶対零度と有限温度の場合で共通であるが、これは $\eta(L)$ が絶対 零度と有限温度の場合とで共通であることと整合的であることも示した。

3.7 節では、 $L > L_{\rm C}$ の(粒子溜領域)の場合の $S_L$ が自明な結果になることを説明した。 $S_L$ の主要な項は、粒子溜の熱力学エントロピーの平均値だけで決まるために、平衡状態の情報しか得られないことを説明した。

#### 4.2 考察と今後の展望

本節では、本研究の結果に対する考察と今後の展望を述べる。 部分系 A の状態  $\hat{\rho}_L$  を構成するミクロ状態の数  $W_L^{*1}$ は

$$W_L \simeq \exp(S_L) \tag{4.1}$$

により与えられる。粒子溜が絶対零度の場合、平衡状態では  $S_L^{\text{eq}} = O(\ln L)$  であったこ とから、 $W_L^{\text{eq}}$  は L のべき乗でしか増加しない。一方で、平衡から遠い非自明な NESS で は、式 (2.1) から  $S_L \ge aL|\Delta k_F| + O(\ln L)$  であることから、 $W_L^{\text{NESS}}$  は

$$W_L^{\text{NESS}} \simeq \exp(S_L) = \exp[\eta(L)L|\Delta k_F| + O(\ln L)]$$
  
 
$$\geq \exp[aL|\Delta k_F| + O(\ln L)] = \exp[O(L)]$$
(4.2)

のように指数関数的に大きいことが分かる。このことは、たとえ粒子溜が絶対零度であっ ても NESS の典型性が、平衡統計力学の典型性 [147–156] と同様に、指数関数的な確率で 成り立つことを示唆している。この典型性は、先行研究 [157] で主張されている NESS の 典型性とは意味が全く異なる。なぜなら、先行研究 [157] で具体的に扱っているモデルは、 本研究のものと本質的に同じであるものの、平衡状態である粒子溜に対して典型性を議論 しているだけだからである。その結果、粒子溜を含めた全系の量子状態が、本研究のもの と(本質的に)同じになるということを主張している。それに対して上で述べた NESS の 典型性とは、実際に NESS が実現している空間領域における典型性のことである。

粒子溜が有限温度であっても、補正項に $\eta(L)$ が含まれていることから、

$$W_L^{\text{NESS}} \simeq \exp(S_L) = \exp[O(L)] \times \exp[(\text{const.})\eta(L)L]$$
(4.3)

のように表せる。ここで、L に依存しない部分を (const.) のように書いた。ここで、右辺 の  $\exp[(\text{const.})\eta(L)L]$  の部分は絶対零度の場合の  $W_L^{\text{NESS}}$  とほぼ同じ形をしていること が分かる。

<sup>\*1</sup> 本研究の場合、 $W_L$  には最大値が存在する。 $W_L = 2^L$ (着目系のヒルベルト空間の次元の個数)が最大値である。

絶対零度でも有限温度の場合でも、 $W_L^{\text{NESS}}$ に $\eta(L)$ が含まれている。 $\eta(L)$ は直線のように振る舞っていたが、その振る舞いに普遍性はあるのだろうか? 例えば、aの値はどのように決まるのか? 本研究の場合、aは $W, L_C$ で決まるが、その依存性はどのようなものか?  $\eta(L)$ のL依存性を調べることは、上で述べた NESS の典型性や、量子状態 $\hat{\rho}_L$ そのものの性質と密接に関連している。

以上の結果は、空間並進対称性を破るような不純物散乱が存在することと、平衡から遠 く離れたことの2つの相乗効果により得られた。このことは、他のモデルについても対称 性を破るような機構があれば、同様の結果が得られることを示唆している。

# 謝辞

本論文は筆者が東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻相関基礎科学系の博士後期 課程在籍中に行なった研究の成果をまとめたものです。興味深い研究テーマを与えてくだ さっただけでなく、物理学についてのものの見方や、論文執筆から学会発表練習までご指 導を頂きました清水明教授に深く感謝致します。学部の頃から、研究について適切な助言 をいただきました、沙川貴大准教授、伊與田英輝助教に感謝致します。修士課程の時期か ら、研究について何度も議論してくださった、杉浦氏、堀田知佐准教授に感謝致します。 研究室のメンバーにも、日々の研究生活でお世話になりました。特に、藤倉恭太氏、中村 望氏、龍田真美子氏、久保賢太郎氏からは研究室での生活を支えていただき、厚く御礼を 申し上げ、感謝の意を表します。研究室のすべてのメンバーに感謝致します。

# 付録 A

# 式 (2.32)、(2.33) および (3.10) の 導出

 $x \to x+1$ を流れる電流演算子  $\hat{j}(x+1/2)$  は  $\hat{j}(x+1/2) = \frac{1}{i} \left( \hat{c}_x^{\dagger} \hat{c}_{x+1} - \hat{c}_{x+1}^{\dagger} \hat{c}_x \right)$  である。これをハイゼンベルグ描像で表すために、 $\hat{j}(x+1/2)$ を一粒子固有状態 ( $\hat{c}_k^{\dagger} \ge \hat{c}_b^{\dagger}$ )で書き直すと、

$$\hat{j}(x+1/2,t) = \int dk_1 \int dk_2 J_{k_1k_2}(x+1/2) \hat{c}^{\dagger}_{k_1} \hat{c}_{k_2} e^{i(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})t} + (\text{terms involving bound states})$$
(A.1)

を得る。ここで、 $J_{k_1k_2}(x + 1/2) := \frac{1}{i} \left( \varphi_{k_1}^*(x) \varphi_{k_2}(x+1) - \varphi_{k_1}^*(x+1) \varphi_{k_2}(x) \right)$  $\left( J_{k_2k_1}(x+1/2) = \left( J_{k_1k_2}(x+1/2) \right)^* \right)$ である。束縛状態は主要な寄与を与えないと考えられるので、それらを含む項を落とす。

次に、オペレータレベルの連続の式は

$$\frac{d}{dt}\delta\hat{N}_L(t) = \delta\hat{J}(t) \tag{A.2}$$

のように表せる。ここで、 $\hat{N}_L(t)$ はA内の粒子数であり、 $\hat{J}(t) := \hat{j}(-L/2,t) - \hat{j}(L/2,t)$ はAに流れ込む総電流であり、 $\delta \hat{N}_L(t) := \hat{N}_L(t) - \langle \hat{N}_L(t) \rangle$ および $\delta \hat{J}(t) := \hat{J}(t) - \langle \hat{J}(t) \rangle$ とした。Jのスペクトル強度は

$$g_J(\omega) := \int dt e^{i\omega t} \langle \delta \hat{J}(0) \delta \hat{J}(t) \rangle_{\text{sym}}$$
(A.3)

のように定義される。ここで、 $\langle \hat{X}\hat{Y} 
angle_{
m sym} := rac{\langle \hat{X}\hat{Y} + \hat{Y}\hat{X} 
angle}{2}$ とした。これにより、

$$\delta N_L^2 = \int d\omega \frac{2\pi g_J(\omega)}{\omega^2} \tag{A.4}$$

が得られる。さらに、ウィックの定理を用いると、

$$g_{J}(\omega) = 2\pi \iint dk_{1}dk_{2}|J_{k_{1}k_{2}}(-L/2) - J_{k_{1}k_{2}}(L/2)|^{2}$$
  
  $\times \delta(\omega + \varepsilon_{k_{2}} - \varepsilon_{k_{1}})\Theta(-k_{F}^{-} < k_{1} < k_{F}^{+})(1 - \Theta(-k_{F}^{-} < k_{2} < k_{F}^{+}))$ (A.5)  
  $= 2\pi \iint_{\Omega_{\Delta\mu}} dk_{1}dk_{2}|J_{k_{1}k_{2}}(-L/2) - J_{k_{1}k_{2}}(L/2)|^{2}\delta(\omega + \varepsilon_{k_{2}} - \varepsilon_{k_{1}})$ (A.6)

が得られる。これらの関係式から、本文の式 (2.32)、(2.33) が得られる。

有限温度の場合もほとんど同様の計算で示せる。絶対零度の場合の $\Theta(-k_F^- < k_1 < k_F^+)(1 - \Theta(-k_F^- < k_2 < k_F^+))$ が、 $f_\beta(\varepsilon_{k_1} - \mu^{\operatorname{sgn}(k_1)})[1 - f_\beta(\varepsilon_{k_2} - \mu^{\operatorname{sgn}(k_2)})]$ のように置き換わるだけである。

ー粒子シュレーディンガー方程式 (2.5) により、 $J_{kk}(x+1/2) = J_{kk}(x-1/2)$ がすべての x について成り立つことが示せる。このことから、 $J_{kk}(x+1/2) = \text{constant}$ (電流保存則)が言え、それ故に  $\Delta J_L^{p0} = 0$  が成り立つ。 $\Delta J_L^{0q} = 0$  についても同様に示すことができる。

# 付録 B

# 絶対零度の平衡状態における $S_L$ の W 依存性

図 2.10 の  $S_L$  の振る舞いを見ると、その値はあまり W に依存しないことが分かる。  $\delta N_L^2$  の言葉で言えば、 $O(\ln L)$  の由来は、式 (2.52) 右辺の2つの積分であるが、これら の積分の合計の値が W によってあまり変わらないことを示唆する。言い換えると、W の 増加に伴い後方散乱の寄与が増加するので、前方散乱の寄与は減少していくと期待でき る。そこで、小さい |q| (前方散乱)、小さい |p| (後方散乱) の場合の、 $R_L^W$  の W 依存 性をプロットしたのが、図 B.1 である。ここで、 $k_1, k_2$  依存性を平均化するために、 $R_L^W$ をそれぞれ  $0 \le k_F \pm k_1 \le 10\pi/L \ge 0 \le k_2 - k_F \le 10\pi/L$  の範囲で積分してプロット した。図 B.1 より、小さい |p| (小さい |q|) で W を増加させると、 $R_L^W$  の  $O(L^2)$  の高い ピークが増大 (減少) していることが確かに分かった。

平衡の場合 ( $\Delta \mu = 0$ )、 $S_L^{eq}$  はどのような W に対しても、対数則  $S_L^{eq} = O(\ln L)$  が成 立し、その値は図 2.10 から分かるようにあまり W に依存しない。しかし、 $S_L^{eq}$  は W の 増加に従い少しだけ減衰しているように見える。これはアンダーソン局在 [111] の予兆だ と考えられる。アンダーソン局在した系では、局在長により長さスケールにカットオフが 存在するため、面積則  $S_L = O(1)$  となる。本研究の場合、系は開放系であり、ランダム ポテンシャルは有限領域にのみ存在するので、局在は不完全にしか起こらない。



図 B.1  $R_L^W$ の W 依存性をプロットしたグラフ。小さい二次元正方形領域に渡って積分した。その範囲は、小さい |q|(前方散乱)に対しては、 $0 \le k_F - k_1 \le 10\pi/L, 0 \le k_2 - k_F \le 10\pi/L$ であり、小さい |p|(後方散乱)に対しては、 $0 \le k_F + k_1 \le 10\pi/L, 0 \le k_2 - k_F \le 10\pi/L$ である。パラメータは  $\mu = -1.5$  ( $k_F = \arccos \frac{3}{4}$ ) and L = 201となるように選んだ。文献 [136] より引用した。

# 付録 C

# Linear fitting

本文の図 2.12 において、平衡から遠く離れた非自明な NESS の場合、 $\eta(L)$  は L に関 してほぼ線形であることを示唆している。このことを確かめるために、データを

$$\eta(L) = a_0 - a_1 \frac{L}{L_{\rm C}} \tag{C.1}$$

のような関数でフィッティングを行う。 $a_0 \ge a_1$ はフィッティングパラメータである。 最小自乗法により、それぞれ ( $a_0, a_1$ ) = (0.19,0.096 × (1 - 0.01)), (0.19,0.096 × (1 + 0.04)), (0.19×(1+0.05), 0.096×(1-0.02)) for ( $\Delta \mu, \Delta \mu'$ ) = (0.4, 0.35), (0.3, 0.25), (0.2, 0.15) という値が得られた。これを図示したものが図 C.1 である。したがって、  $a \simeq 0.19 - 0.096 \simeq 0.1$ であることから、本文の条件式 (2.2) は十分に満たされ ている。



図 C.1 このグラフは、本文の図 2.12 のうち、平衡から遠く離れた非自明な NESS の 場合だけをプロットしたものである。 $a_0 \ge a_1$ は  $50 \le L \le 400$ の範囲で計算した。 フィッティングによる誤差は高々 1% であった。文献 [136] より引用した。

# 付録 D

# 前方散乱に由来する項を得る方法

 $\delta N_L^2$ を前方散乱に由来する項  $(\delta N_L^2)^{\rm F}$  と後方散乱に由来する項  $(\delta N_L^2)^{\rm B}$  に分ける (つまり、 $\delta N_L^2 = (\delta N_L^2)^{\rm F} + (\delta N_L^2)^{\rm B}$ )。 $(\delta N_L^2)^{\rm F}$ は束縛状態の寄与を無視すれば、いくつかの NESS の  $\delta N_L^2$ の組み合わせで計算することができる。

図 D.1 は  $\Xi(k_1, k_2)$  をカラーマップで図示したもので、左側の粒子溜は  $\beta^+ = 10$ 、  $\mu^+ = -0.6$  であり、右側の粒子溜は  $\beta^- = \infty$ 、 $\mu^- = 2.0$  (電子は完全に満たされている ことに対応) である。図 D.2 も  $\Xi(k_1, k_2)$  をカラーマップで図示したもので、左側の粒子 溜は  $\beta^+ = 10$ 、 $\mu^+ = -0.6$  であり、右側の粒子溜は  $\beta^- = \infty$ 、 $\mu^- = -2.0$ (電子は完全に 空であることに対応) である。これらは  $k_1 > 0$ ,  $k_2 > 0$ の範囲だけを見れば、図 3.2 と共 通であり、この部分だけを図示したものが図 D.3 である。さらに、図 D.1 と D.2 の残り の領域を合わせると、図 D.4 に一致することが分かる ( $k_2 = k_1$  に関して折り返して良い ことを用いた)。図 D.4 は  $\beta^+ = \beta^- = \infty$ 、 $\mu^+ = 2.0$ 、 $\mu^- = -2.0$  としたときの場合で ある。まとめると、図 3.2 のうち  $k_1 > 0$ ,  $k_2 > 0$ の領域(前方散乱)だけを取り出した 図 D.3 は、3 つの場合(図 D.1、D.2、D.4)を組み合わせから得られる、ということで ある。さらに、これら3 つの場合は  $\beta^+, \beta^-, \mu^+, \mu^-$ を調整すれば得られる、ということ も重要である。同様の議論が  $k_1 < 0$ ,  $k_2 < 0$ の領域(前方散乱)についても当てはまる。 従って、

$$\begin{aligned} (\delta N_L^2)^{\rm F} &= \\ \frac{\delta N_L^2(\mu^- = 2.0) + \delta N_L^2(\mu^- = -2.0) - \delta N_L^2(\mu^+ = 2.0, \mu^- = -2.0)}{2} \\ &+ \frac{\delta N_L^2(\mu^+ = 2.0) + \delta N_L^2(\mu^+ = -2.0) - \delta N_L^2(\mu^+ = 2.0, \mu^- = -2.0)}{2}. \end{aligned}$$
(D.1)

が得られる。

 $S_L \simeq \delta N_L^2$ であることを踏まえると、 $S_L$ についても同様にして前方散乱由来の項を取り出すことができると期待できる。


図 D.1  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を  $(k_1,k_2)$ の 関数としてカラーマップで描画したも の。パラメータは、 $\beta^+ = 10, \beta^- \to \infty$ および  $\mu^+ = -0.6, \mu^- = 2.0$ である。



図 D.3 {(図 D.1) + (図 D.2)  $-2\times$ (図 D.4)}/2 を図示したもの。図 D.1 や図 D.2 の  $k_1 > 0, k_2 > 0$ の部分(前方散 乱の一部)と同じものである。



図 D.2  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を  $(k_1,k_2)$  の 関数としてカラーマップで描画したも の。パラメータは、 $\beta^+ = 10, \beta^- \to \infty$ および  $\mu^+ = -0.6, \mu^- = -2.0$  で ある。



図 D.4  $\Xi_{\beta}^{\overline{\mu},\Delta\mu}(k_1,k_2)$  を  $(k_1,k_2)$  の 関数としてカラーマップで描画したも の。パラメータは、 $\beta^+ \to \infty$ 、 $\beta^- \to \infty$ および  $\mu^+ = 2.0$ 、 $\mu^- = -2.0$  である。

### 付録 E

# 絶対零度と有限温度における、 W = 0、 $\Delta \mu \ge 0$ のときの相関関数 について

#### E.1 絶対零度の場合

絶対零度でW = 0のとき、行列 $\Lambda_{xy}$ は

$$\Lambda_{xy} = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F^-}^{k_F^+} dk e^{ik(-x+y)}$$
(E.1)

$$=\frac{\sin\left[\frac{k_{F}^{+}+k_{F}^{-}}{2}(y-x)\right]}{\pi}\frac{\exp\left[i\frac{k_{F}^{+}-k_{F}^{-}}{2}(y-x)\right]}{y-x}$$
(E.2)

$$=\frac{\sin\left[\overline{k}_F(y-x)\right]}{\pi}\frac{\exp\left[i\frac{\Delta k_F}{2}(y-x)\right]}{y-x}$$
(E.3)

のようになる。

密度相関  $\langle \delta \hat{n}(x) \delta \hat{n}(y) \rangle$  を求める。

$$\langle \delta \hat{n}(x) \delta \hat{n}(y) \rangle = \Lambda_{xy} (\delta_{x,y} - \Lambda_{yx}) \tag{E.4}$$

となる。特に、y > xのときは、

$$\langle \delta \hat{n}(x) \delta \hat{n}(y) \rangle = -|\Lambda_{xy}|^2 \tag{E.5}$$

$$= -\frac{1}{\pi^2} \left( \frac{\sin\left[\overline{k}_F(y-x)\right]}{y-x} \right)^2 \tag{E.6}$$

のように表せる。以上より、密度相関は  $(y - x)^{-2}$  という速さで減衰し、フェルミ波数の 平均値で振動することが分かる。 運動エネルギー相関  $\langle \delta \hat{e}(x) \delta \hat{e}(y) \rangle$  を求める。

$$\langle \delta \hat{e}(x) \delta \hat{e}(y) \rangle = 2 \operatorname{Re} \left[ \Lambda_{x,y+1} \left( \delta_{y-x,1} - \Lambda_{y,x+1} \right) + \Lambda_{x,y} \left( \delta_{y-x,0} - \Lambda_{y+1,x+1} \right) \right]$$
(E.7)

となる。特に、 $y - x \ge 2$ のときは、

$$\langle \delta \hat{e}(x) \delta \hat{e}(y) \rangle = -2 \operatorname{Re} \left[ \Lambda_{x,y+1} \Lambda_{y,x+1} + \Lambda_{x,y} \Lambda_{y+1,x+1} \right]$$

$$= -\frac{1}{\pi^2} \left( \frac{\cos 2\overline{k}_F \cos \Delta k_F}{(y-x)^2 - 1} + \frac{1}{(y-x)^2} \right)$$

$$+ \frac{\cos \left[ 2\overline{k}_F(y-x) \right]}{\pi^2} \left( \frac{\cos \Delta k_F}{(y-x)^2 - 1} + \frac{1}{(y-x)^2} \right)$$

$$(E.9)$$

のようになる。特に、 $y-x \gg 1$ かつ $\Delta \mu = 0$ のときは、 $y-x-1, y-x+1 \sim y-x,$   $k_F^+ = k_F^- = k_F$ により

$$\langle \delta \hat{e}(x) \delta \hat{e}(y) \rangle \sim -\frac{4}{\pi^2} \frac{\sin^2 \left[ k_F(y-x) \right]}{(y-x)^2} \tag{E.10}$$

のように簡単な式になる。以上より、運動エネルギー相関についても  $(y - x)^{-2}$  という速 さで減衰し、フェルミ波数の平均値で振動することが分かる。

#### E.2 有限温度の場合

有限温度の場合、W=0のときの行列<br/>  $\Lambda$ を考える。  $\Delta\mu=0$ のときは、<br/>  $\mu^+=\mu^-=\mu$ として

$$\Lambda_{xy} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk [e^{ik(y-x)} f_\beta(\varepsilon_k - \mu) + e^{-ik(y-x)} f_\beta(\varepsilon_k - \mu)]$$
(E.11)

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} dk \cos\left[k(y-x)\right] f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu)$$
(E.12)

となる。本文より、この項は |x - y| について指数関数的に減衰する。一方で、 $\Delta \mu > 0$ のときは、

$$\Lambda_{xy} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} dk [e^{ik(y-x)} f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^+) + e^{-ik(y-x)} f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^-)]$$
(E.13)  
$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} dk \left[ \cos [k(y-x)] \frac{f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^+) + f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^-)}{2} + i \sin [k(y-x)] \frac{f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^+) - f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu^-)}{2} \right]$$
(E.14)

となる。ここで、 $\cos [k(y-x)]$ を含む項は、 $\Delta \mu = 0$ のときの  $\Lambda_{xy}$ の平均値なので、 |x-y|について指数関数的に減衰する。よって、 $\sin [k(y-x)]$ を含む項から、|x-y|に ついてべき減衰する項が現れる。このことを確かめるためには、

$$\int_0^{\pi} dk (\sin kl) f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu) \tag{E.15}$$

という量を計算すれば良いことが分かる。簡単のため、以下ではlは正の偶数 (l = 2m、 mは正の整数) であるとするが、奇数であっても結果は変わらない。

$$\int_0^{\pi} dk (\sin kl) f_{\beta}(\varepsilon_k - \mu) \tag{E.16}$$

$$=\sum_{n=1}^{m}\int_{0}^{\pi}\frac{dx}{l}(\sin x)[f_{\beta}(\varepsilon_{\left[\frac{x+(2n-2)\pi}{l}\right]}-\mu)-f_{\beta}(\varepsilon_{\left[\frac{x+(2n-1)\pi}{l}\right]}-\mu)]$$
(E.17)

$$\sim \int_0^\pi \frac{dx}{l} (\sin x) \left( \int_0^1 \pi dy f_\beta'(\varepsilon_{y\pi} - \mu) \right)$$
(E.18)

$$= \frac{2}{l} \times \left( f_{\beta}(\varepsilon_{\pi} - \mu) - f_{\beta}(\varepsilon_{0} - \mu) \right)$$
(E.19)

のようになる。途中の ~ は  $l \to \infty$  でイコールになることを意味しており、 $f'_{\beta}(\varepsilon_k - \mu)$  は  $f \circ k$  に関する 1 階微分を表す。この結果から、有限温度の  $\Lambda_{xy}$  は W = 0、 $\Delta \mu > 0$  で  $\Lambda_{xy} \sim \frac{1}{y-x}$  というべきで減衰することが分かる。

## 参考文献

- Albert Einstein. On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat. *Annalen der physik*, Vol. 17, pp. 549–560, 1905.
- [2] Lars Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Physical review*, Vol. 37, No. 4, p. 405, 1931.
- [3] Lars Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. ii. *Physical review*, Vol. 38, No. 12, p. 2265, 1931.
- [4] Sybren Ruurds De Groot and Peter Mazur. Non-equilibrium thermodynamics. Courier Corporation, 2013.
- [5] Ilya Prigogine. Introduction to thermodynamics of irreversible processes. New York: Interscience, 1967, 3rd ed., 1967.
- [6] Lars Onsager and S Machlup. Fluctuations and irreversible processes. *Physical Review*, Vol. 91, No. 6, p. 1505, 1953.
- [7] Masakazu Ichiyanagi. Variational principles of irreversible processes. *Physics reports*, Vol. 243, No. 3, pp. 125–182, 1994.
- [8] Rolf Landauer. Inadequacy of entropy and entropy derivatives in characterizing the steady state. *Physical Review A*, Vol. 12, No. 2, p. 636, 1975.
- [9] Edwin T Jaynes. The minimum entropy production principle. Annual Review of Physical Chemistry, Vol. 31, No. 1, pp. 579–601, 1980.
- [10] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal* of the Physical Society of Japan, Vol. 12, No. 6, pp. 570–586, 1957.
- [11] Ryogo Kubo, Morikazu Toda, and Natsuki Hashitsume. Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics, Vol. 31. Springer Science & Business Media, 2012.
- [12] Joel Keizer. Thermodynamics at nonequilibrium steady states. The Journal of

Chemical Physics, Vol. 69, No. 6, pp. 2609–2620, 1978.

- [13] David Jou, José Casas-Vázquez, and Georgy Lebon. Extended irreversible thermodynamics. In *Extended Irreversible Thermodynamics*, pp. 41–74. Springer, 1996.
- [14] Ingo Müller and Tommaso Ruggeri. Rational extended thermodynamics, Vol. 37. Springer Science & Business Media, 2013.
- [15] Byung Chan Eu. Nonequilibrium statistical mechanics: ensemble method, Vol. 93. Springer Science & Business Media, 2013.
- [16] Hisao Hayakawa. Test of information theory on the boltzmann equation. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 72, No. 10, pp. 2473–2476, 2003.
- [17] Yoshitsugu Oono and Marco Paniconi. Steady state thermodynamics. Progress of Theoretical Physics Supplement, Vol. 130, pp. 29–44, 1998.
- [18] Takahiro Hatano and Shin-ichi Sasa. Steady-state thermodynamics of langevin systems. *Physical review letters*, Vol. 86, No. 16, p. 3463, 2001.
- [19] Shin-ichi Sasa and Hal Tasaki. Steady state thermodynamics. Journal of statistical physics, Vol. 125, No. 1, pp. 125–224, 2006.
- [20] Teruhisa S Komatsu, Naoko Nakagawa, Shin-ichi Sasa, and Hal Tasaki. Steadystate thermodynamics for heat conduction: microscopic derivation. *Physical review letters*, Vol. 100, No. 23, p. 230602, 2008.
- [21] David P Ruelle. Extending the definition of entropy to nonequilibrium steady states. Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol. 100, No. 6, pp. 3054–3058, 2003.
- [22] Shin-ichi Sasa. Possible extended forms of thermodynamic entropy. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2014, No. 1, p. P01004, 2014.
- [23] Takahiro Sagawa and Hisao Hayakawa. Geometrical expression of excess entropy production. *Physical Review E*, Vol. 84, No. 5, p. 051110, 2011.
- [24] Tatsuro Yuge, Takahiro Sagawa, Ayumu Sugita, and Hisao Hayakawa. Geometrical excess entropy production in nonequilibrium quantum systems. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 153, No. 3, pp. 412–441, 2013.
- [25] Tibor Antal, Zoltán Rácz, and László Sasvári. Nonequilibrium steady state in a quantum system: One-dimensional transverse ising model with energy current. *Physical review letters*, Vol. 78, No. 2, p. 167, 1997.
- [26] 箱嶋秀昭. 非平衡量子系の状態数. Master's thesis, 東京大学大学院教養学部総合文 化研究科広域科学専攻相関基礎科学系, 2016.

- [27] James A McLennan Jr. Statistical mechanics of the steady state. *Physical review*, Vol. 115, No. 6, p. 1405, 1959.
- [28] Dmitrii Nikolaevich Zubarev. Nonequilibrium statistical thermodynamics. Plenum Publishing Corporation, 1974.
- [29] Akira Onuki and Kyozi Kawasaki. Nonequilibrium steady state of critical fluids under shear flow: a renormalization group approach. Annals of Physics, Vol. 121, No. 1-2, pp. 456–528, 1979.
- [30] Shuichi Tasaki and Taku Matsui. Note on MacLennan-Zubarev ensembles and quasistatic processes. arXiv preprint math-ph/0605051, 2006.
- [31] Christian Maes and Karel Netočný. Rigorous meaning of mclennan ensembles. Journal of Mathematical Physics, Vol. 51, No. 1, p. 015219, 2010.
- [32] TG Ho and Huzihiro Araki. Asymptotic time evolution of a partitioned infinite two-sided isotropic XY-chain. Труды Математического ин ститутаимени ВА Стеклова, Vol. 228, No. 0, pp. 203–216, 2000.
- [33] Yoshiko Ogata. Nonequilibrium properties in the transverse XX chain. Physical Review E, Vol. 66, No. 1, p. 016135, 2002.
- [34] Takayuki Miyadera. On energy-momentum spectrum of stationary states with nonvanishing current on 1-d lattice systems. *Interdisciplinary Information Sci*ences, Vol. 10, No. 1, pp. 23–29, 2004.
- [35] CNRPC Caroli, Ro Combescot, Ph Nozieres, and D Saint-James. Direct calculation of the tunneling current. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Vol. 4, No. 8, p. 916, 1971.
- [36] Selman Hershfield. Reformulation of steady state nonequilibrium quantum statistical mechanics. *Physical Review Letters*, Vol. 70, No. 14, p. 2134, 1993.
- [37] Frithjof B Anders. Steady-state currents through nanodevices: A scatteringstates numerical renormalization-group approach to open quantum systems. *Physical review letters*, Vol. 101, No. 6, p. 066804, 2008.
- [38] Tatsuro Yuge, Nobuyasu Ito, and Akira Shimizu. Nonequilibrium molecular dynamics simulation of electric conduction. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 74, No. 7, pp. 1895–1898, 2005.
- [39] Tatsuro Yuge and Akira Shimizu. Long-time behavior of velocity autocorrelation function for interacting particles in a two-dimensional disordered system. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 76, No. 9, pp. 093001–093001, 2007.

- [40] Tatsuro Yuge and Akira Shimizu. Long-time tail in an electric conduction system. Progress of Theoretical Physics Supplement, Vol. 178, pp. 64–71, 2009.
- [41] B Derrida, JL Lebowitz, and ER Speer. Free energy functional for nonequilibrium systems: an exactly solvable case. *Physical Review Letters*, Vol. 87, No. 15, p. 150601, 2001.
- [42] B Derrida, JL Lebowitz, and ER Speer. Exact free energy functional for a driven diffusive open stationary nonequilibrium system. *Physical review letters*, Vol. 89, No. 3, p. 030601, 2002.
- [43] Thierry Bodineau and Bernard Derrida. Current fluctuations in nonequilibrium diffusive systems: an additivity principle. *Physical review letters*, Vol. 92, No. 18, p. 180601, 2004.
- [44] B Derrida, JL Lebowitz, and ER Speer. Large deviation of the density profile in the steady state of the open symmetric simple exclusion process. *Journal of statistical physics*, Vol. 107, No. 3-4, pp. 599–634, 2002.
- [45] Michael Prähofer and Herbert Spohn. Current fluctuations for the totally asymmetric simple exclusion process. In *In and out of equilibrium*, pp. 185–204. Springer, 2002.
- [46] Herbert Spohn. Long range correlations for stochastic lattice gases in a nonequilibrium steady state. Journal of Physics A: Mathematical and General, Vol. 16, No. 18, p. 4275, 1983.
- [47] Herbert Spohn. Large scale dynamics of interacting particles. Springer Science & Business Media, 2012.
- [48] Sheldon Katz, Joel L Lebowitz, and Herbert Spohn. Nonequilibrium steady states of stochastic lattice gas models of fast ionic conductors. *Journal of statistical physics*, Vol. 34, No. 3-4, pp. 497–537, 1984.
- [49] Raphael Lefevere and Hal Tasaki. High-temperature expansion for nonequilibrium steady states in driven lattice gases. *Physical review letters*, Vol. 94, No. 20, p. 200601, 2005.
- [50] Kumiko Hayashi and Shin-ichi Sasa. Thermodynamic relations in a driven lattice gas: numerical experiments. *Physical Review E*, Vol. 68, No. 3, p. 035104, 2003.
- [51] Lorenzo Bertini, Alberto De Sole, Davide Gabrielli, Giovanni Jona-Lasinio, and Claudio Landim. Fluctuations in stationary nonequilibrium states of irreversible processes. *Physical Review Letters*, Vol. 87, No. 4, p. 040601, 2001.
- [52] Heinz-Peter Breuer and Francesco Petruccione. The theory of open quantum

systems. Oxford University Press on Demand, 2002.

- [53] Tatsuro Yuge and Ayumu Sugita. A perturbative method for nonequilibrium steady state of open quantum systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 84, No. 1, p. 014001, 2014.
- [54] Tomaž Prosen. Open XXZ spin chain: Nonequilibrium steady state and a strict bound on ballistic transport. *Physical review letters*, Vol. 106, No. 21, p. 217206, 2011.
- [55] Tomaž Prosen. Exact nonequilibrium steady state of a strongly driven open XXZ chain. *Physical review letters*, Vol. 107, No. 13, p. 137201, 2011.
- [56] Amikam Levy and Ronnie Kosloff. The local approach to quantum transport may violate the second law of thermodynamics. *EPL (Europhysics Letters)*, Vol. 107, No. 2, p. 20004, 2014.
- [57] Victor V Albert, Chi Shu, Stefan Krastanov, Chao Shen, Ren-Bao Liu, Zhen-Biao Yang, Robert J Schoelkopf, Mazyar Mirrahimi, Michel H Devoret, and Liang Jiang. Holonomic quantum control with continuous variable systems. *Physical review letters*, Vol. 116, No. 14, p. 140502, 2016.
- [58] Victor V Albert, Barry Bradlyn, Martin Fraas, and Liang Jiang. Geometry and response of lindbladians. *Physical Review X*, Vol. 6, No. 4, p. 041031, 2016.
- [59] Sai Vinjanampathy and Janet Anders. Quantum thermodynamics. Contemporary Physics, Vol. 57, No. 4, pp. 545–579, 2016.
- [60] Giuliano Benenti, Giulio Casati, Keiji Saito, and Robert S Whitney. Fundamental aspects of steady-state conversion of heat to work at the nanoscale. *Physics Reports*, Vol. 694, pp. 1–124, 2017.
- [61] J Onam González, Luis A Correa, Giorgio Nocerino, José P Palao, Daniel Alonso, and Gerardo Adesso. Testing the validity of the 'local' and 'global' gkls master equations on an exactly solvable model. Open Systems & Information Dynamics, Vol. 24, No. 04, p. 1740010, 2017.
- [62] Rolf Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development*, Vol. 1, No. 3, pp. 223–231, 1957.
- [63] M Büttiker, Y Imry, R Landauer, and S Pinhas. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Physical Review B*, Vol. 31, No. 10, p. 6207, 1985.
- [64] Rolf Landauer. Electrical transport in open and closed systems. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, Vol. 68, No. 2, pp. 217–228, 1987.

- [65] Hiroyuki Sakaki. Quantum wire superlattices and coupled quantum box arrays: A novel method to suppress optical phonon scattering in semiconductors. Japanese journal of applied physics, Vol. 28, No. 2A, p. L314, 1989.
- [66] GB Lesovik. Quantum excess noise in two-dimensional ballistic microcontacts. *JETP Lett*, Vol. 49, pp. 594–596, 1989.
- [67] M Büttiker. Scattering theory of thermal and excess noise in open conductors. *Physical Review Letters*, Vol. 65, No. 23, p. 2901, 1990.
- [68] Philip F Bagwell and Terry P Orlando. Landauer's conductance formula and its generalization to finite voltages. *Physical Review B*, Vol. 40, No. 3, p. 1456, 1989.
- [69] Yuan P Li, D Co Tsui, Jo J Heremans, JA Simmons, and GW Weimann. Lowfrequency noise in transport through quantum point contacts. *Applied Physics Letters*, Vol. 57, No. 8, pp. 774–776, 1990.
- [70] Akira Shimizu and Masahito Ueda. Effects of dephasing and dissipation on quantum noise in conductors. *Physical Review Letters*, Vol. 69, No. 9, p. 1403, 1992.
- [71] Akira Shimizu, Masahito Ueda, and Hiroyuki Sakaki. Effects of dephasing and dissipation on nonequilibrium quantum noise. JJAP series, Vol. 9, pp. 189–192, 1993.
- [72] Akira Shimizu. Landauer conductance and nonequilibrium noise of onedimensional interacting electron systems. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 65, No. 5, pp. 1162–1165, 1996.
- [73] Supriyo Datta. Electronic transport in mesoscopic systems. Cambridge university press, 1997.
- [74] Akira Shimizu and Takayuki Miyadera. Interacting one-dimensional electrons driven by two-dimensional reservoir electrons. *Physica B: Condensed Matter*, Vol. 249, pp. 518–522, 1998.
- [75] Yoseph Imry. Introduction to mesoscopic physics. No. 2. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [76] AT Tilke, FC Simmel, H Lorenz, RH Blick, and JP Kotthaus. Quantum interference in a one-dimensional silicon nanowire. *Physical Review B*, Vol. 68, No. 7, p. 075311, 2003.
- [77] Tobias Brandes. Low-Dimensional Systems: Interactions and Transport Properties, Vol. 544. Springer Science & Business Media, 2000.
- [78] Ya M Blanter and Markus Büttiker. Shot noise in mesoscopic conductors.

Physics reports, Vol. 336, No. 1-2, pp. 1–166, 2000.

- [79] Akira Shimizu and Hiroaki Kato. Nonequilibrium mesoscopic conductors driven by reservoirs. Low-Dimensional Systems — Interactions and Transport Properties [ed. T. Brandes], Lecture Notes in Physics (Springer), Vol. 54, pp. 3–22, 2000.
- [80] Richard A Webb, Simon Washburn, CP Umbach, and RB Laibowitz. Observation of h e aharonov-bohm oscillations in normal-metal rings. *Physical Review Letters*, Vol. 54, No. 25, p. 2696, 1985.
- [81] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group. Reviews of modern physics, Vol. 77, No. 1, p. 259, 2005.
- [82] Luigi Amico, Rosario Fazio, Andreas Osterloh, and Vlatko Vedral. Entanglement in many-body systems. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 80, No. 2, p. 517, 2008.
- [83] Jens Eisert, Marcus Cramer, and Martin B Plenio. Colloquium: Area laws for the entanglement entropy. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 82, No. 1, p. 277, 2010.
- [84] Nicolas Laflorencie. Quantum entanglement in condensed matter systems. *Physics Reports*, Vol. 646, pp. 1–59, 2016.
- [85] Xun Jia, Arvind R Subramaniam, Ilya A Gruzberg, and Sudip Chakravarty. Entanglement entropy and multifractality at localization transitions. *Physical Review B*, Vol. 77, No. 1, p. 014208, 2008.
- [86] Nicolas Laflorencie, Erik S Sørensen, Ming-Shyang Chang, and Ian Affleck. Boundary effects in the critical scaling of entanglement entropy in 1d systems. *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 10, p. 100603, 2006.
- [87] Fabien Alet, Sylvain Capponi, Nicolas Laflorencie, and Matthieu Mambrini. Valence bond entanglement entropy. *Physical review letters*, Vol. 99, No. 11, p. 117204, 2007.
- [88] Ann B Kallin, Katharine Hyatt, Rajiv RP Singh, and Roger G Melko. Entanglement at a two-dimensional quantum critical point: A numerical linked-cluster expansion study. *Physical Review Letters*, Vol. 110, No. 13, p. 135702, 2013.
- [89] Irénée Frérot and Tommaso Roscilde. Entanglement entropy across the superfluid-insulator transition: a signature of bosonic criticality. *Physical Re*view Letters, Vol. 116, No. 19, p. 190401, 2016.
- [90] Alexei Kitaev and John Preskill. Topological entanglement entropy. *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 11, p. 110404, 2006.

- [91] Michael Levin and Xiao-Gang Wen. Detecting topological order in a ground state wave function. *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 11, p. 110405, 2006.
- [92] Guifre Vidal, José Ignacio Latorre, Enrique Rico, and Alexei Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Physical Review Letters*, Vol. 90, No. 22, p. 227902, 2003.
- [93] Gil Refael and Joel E Moore. Entanglement entropy of random quantum critical points in one dimension. *Physical Review Letters*, Vol. 93, No. 26, p. 260602, 2004.
- [94] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2004, No. 06, p. P06002, 2004.
- [95] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and conformal field theory. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 42, No. 50, p. 504005, 2009.
- [96] Luca Bombelli, Rabinder K Koul, Joohan Lee, and Rafael D Sorkin. Quantum source of entropy for black holes. *Physical Review D*, Vol. 34, No. 2, p. 373, 1986.
- [97] Mark Srednicki. Entropy and area. Physical Review Letters, Vol. 71, No. 5, p. 666, 1993.
- [98] Curtis Callan and Frank Wilczek. On geometric entropy. *Physics Letters B*, Vol. 333, No. 1-2, pp. 55–61, 1994.
- [99] Christoph Holzhey, Finn Larsen, and Frank Wilczek. Geometric and renormalized entropy in conformal field theory. *Nuclear Physics B*, Vol. 424, No. 3, pp. 443–467, 1994.
- [100] Edward Witten. Notes on some entanglement properties of quantum field theory. arXiv preprint arXiv:1803.04993, 2018.
- [101] Michael A Nielsen and Isaac Chuang. Quantum computation and quantum information, 2002.
- [102] Ryszard Horodecki, Paweł Horodecki, Michał Horodecki, and Karol Horodecki. Quantum entanglement. *Reviews of modern physics*, Vol. 81, No. 2, p. 865, 2009.
- [103] Shinsei Ryu and Tadashi Takayanagi. Holographic derivation of entanglement entropy from the anti-de sitter space/conformal field theory correspondence. *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 18, p. 181602, 2006.
- [104] Don N Page. Information in black hole radiation. *Physical review letters*, Vol. 71,

No. 23, p. 3743, 1993.

- [105] Masahiro Hotta and Ayumu Sugita. The fall of the black hole firewall: natural nonmaximal entanglement for the page curve. Progress of Theoretical and Experimental Physics, Vol. 2015, No. 12, 2015.
- [106] Juan Maldacena and Douglas Stanford. Remarks on the Sachdev-Ye-Kitaev model. *Physical Review D*, Vol. 94, No. 10, p. 106002, 2016.
- [107] Daniel Harlow. Jerusalem lectures on black holes and quantum information. Reviews of Modern Physics, Vol. 88, No. 1, p. 015002, 2016.
- [108] Rajibul Islam, Ruichao Ma, Philipp M. Preiss, M. Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, and Markus Greiner. Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system. *Nature(London)*, Vol. 528, pp. 77–83, 2015.
- [109] Adam M Kaufman, M Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, Robert Schittko, Philipp M Preiss, and Markus Greiner. Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system. *Science*, Vol. 353, No. 6301, pp. 794–800, 2016.
- [110] Matthew B Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2007, No. 08, p. P08024, 2007.
- [111] L Pastur and V Slavin. Area law scaling for the entropy of disordered quasifree fermions. *Physical Review Letters*, Vol. 113, No. 15, p. 150404, 2014.
- [112] Sergey Bravyi, Libor Caha, Ramis Movassagh, Daniel Nagaj, and Peter W Shor. Criticality without frustration for quantum spin-1 chains. *Physical Review Letters*, Vol. 109, No. 20, p. 207202, 2012.
- [113] Dimitri Gioev and Israel Klich. Entanglement entropy of fermions in any dimension and the widom conjecture. *Physical review letters*, Vol. 96, No. 10, p. 100503, 2006.
- [114] Michael M Wolf. Violation of the entropic area law for fermions. *Physical review letters*, Vol. 96, No. 1, p. 010404, 2006.
- [115] Brian Swingle. Entanglement entropy and the fermi surface. Physical Review Letters, Vol. 105, No. 5, p. 050502, 2010.
- [116] Ramis Movassagh and Peter W Shor. Supercritical entanglement in local systems: Counterexample to the area law for quantum matter. Proceedings of the National Academy of Sciences, p. 201605716, 2016.
- [117] Sandy Irani. Ground state entanglement in one-dimensional translationally invariant quantum systems. Journal of Mathematical Physics, Vol. 51, No. 2, p.

022101, 2010.

- [118] G Vitagliano, A Riera, and JI Latorre. Volume-law scaling for the entanglement entropy in spin-1/2 chains. New Journal of Physics, Vol. 12, No. 11, p. 113049, 2010.
- [119] Giovanni Ramírez, Javier Rodríguez-Laguna, and Germán Sierra. From conformal to volume law for the entanglement entropy in exponentially deformed critical spin 1/2 chains. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2014, No. 10, p. P10004, 2014.
- [120] Olof Salberger, Takuma Udagawa, Zhao Zhang, Hosho Katsura, Israel Klich, and Vladimir Korepin. Deformed fredkin spin chain with extensive entanglement. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2017, No. 6, p. 063103, 2017.
- [121] Luca D'Alessio, Yariv Kafri, Anatoli Polkovnikov, and Marcos Rigol. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. Advances in Physics, Vol. 65, No. 3, pp. 239–362, 2016.
- [122] Yuya O Nakagawa, Masataka Watanabe, Hiroyuki Fujita, and Sho Sugiura. Universality in volume-law entanglement of scrambled pure quantum states. *Nature communications*, Vol. 9, No. 1, p. 1635, 2018.
- [123] Hyungwon Kim and David A Huse. Ballistic spreading of entanglement in a diffusive nonintegrable system. *Physical review letters*, Vol. 111, No. 12, p. 127205, 2013.
- [124] Jens H Bardarson, Frank Pollmann, and Joel E Moore. Unbounded growth of entanglement in models of many-body localization. *Physical review letters*, Vol. 109, No. 1, p. 017202, 2012.
- [125] Bela Bauer and Chetan Nayak. Area laws in a many-body localized state and its implications for topological order. *Journal of Statistical Mechanics: Theory* and Experiment, Vol. 2013, No. 09, p. P09005, 2013.
- [126] Maksym Serbyn, Z Papić, and Dmitry A Abanin. Universal slow growth of entanglement in interacting strongly disordered systems. *Physical review letters*, Vol. 110, No. 26, p. 260601, 2013.
- [127] Rahul Nandkishore and David A Huse. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. Annu. Rev. Condens. Matter Phys., Vol. 6, No. 1, pp. 15–38, 2015.
- [128] David J Luitz, Nicolas Laflorencie, and Fabien Alet. Many-body localization edge in the random-field heisenberg chain. *Physical Review B*, Vol. 91, No. 8,

p. 081103, 2015.

- [129] Maksym Serbyn, Z Papić, and Dmitry A Abanin. Local conservation laws and the structure of the many-body localized states. *Physical review letters*, Vol. 111, No. 12, p. 127201, 2013.
- [130] Pasquale Calabrese and John Cardy. Evolution of entanglement entropy in onedimensional systems. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, Vol. 2005, No. 04, p. P04010, 2005.
- [131] Jyotirmoy Bhattacharya, Masahiro Nozaki, Tadashi Takayanagi, and Tomonori Ugajin. Thermodynamical property of entanglement entropy for excited states. *Physical review letters*, Vol. 110, No. 9, p. 091602, 2013.
- [132] V Eisler and Z Zimborás. Entanglement in the XX spin chain with an energy current. *Physical Review A*, Vol. 71, No. 4, p. 042318, 2005.
- [133] Walter H Aschbacher. Non-zero entropy density in the xy chain out of equilibrium. Letters in Mathematical Physics, Vol. 79, No. 1, pp. 1–16, 2007.
- [134] Marianne Hoogeveen and Benjamin Doyon. Entanglement negativity and entropy in non-equilibrium conformal field theory. *Nuclear Physics B*, Vol. 898, pp. 78–112, 2015.
- [135] Rolf Landauer. dQ=TdS far from equilibrium. Physical Review A, Vol. 18, No. 1, p. 255, 1978.
- [136] Hideaki Hakoshima and Akira Shimizu. Anomalous enhancement of entanglement entropy in nonequilibrium steady states driven by zero-temperature reservoirs. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 88, No. 2, p. 023001, 2018.
- [137] John R Taylor. Scattering theory: the quantum theory of nonrelativistic collisions. Courier Corporation, 2006.
- [138] Shuichi Tasaki. Nonequilibrium stationary states of noninteracting electrons in a one-dimensional lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*, Vol. 12, No. 14-15, pp. 2657–2674, 2001.
- [139] Ming-Chiang Chung and Ingo Peschel. Density-matrix spectra of solvable fermionic systems. *Physical Review B*, Vol. 64, No. 6, p. 064412, 2001.
- [140] Siew-Ann Cheong and Christopher L Henley. Many-body density matrices for free fermions. *Physical Review B*, Vol. 69, No. 7, p. 075111, 2004.
- [141] Ingo Peschel and Viktor Eisler. Reduced density matrices and entanglement entropy in free lattice models. *Journal of physics a: mathematical and theoretical*, Vol. 42, No. 50, p. 504003, 2009.

- [142] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, Vol. 109, pp. 1492–1505, Mar 1958.
- [143] Elihu Abrahams, PW Anderson, DC Licciardello, and TV Ramakrishnan. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Physical Review Letters*, Vol. 42, No. 10, p. 673, 1979.
- [144] PW Anderson, DJ Thouless, E Abrahams, and DS Fisher. New method for a scaling theory of localization. *Physical Review B*, Vol. 22, No. 8, p. 3519, 1980.
- [145] Patrick A Lee and TV Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 57, No. 2, p. 287, 1985.
- [146] Mark Fannes, Bart Haegeman, and M Mosonyi. Entropy growth of shiftinvariant states on a quantum spin chain. *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 44, No. 12, pp. 6005–6019, 2003.
- [147] Hal Tasaki. Typicality of thermal equilibrium and thermalization in isolated macroscopic quantum systems. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 163, No. 5, pp. 937–997, 2016.
- [148] P Bocchieri and A Loinger. Ergodic foundation of quantum statistical mechanics. *Physical Review*, Vol. 114, No. 4, p. 948, 1959.
- [149] Ayumu Sugita. On the basis of quantum statistical mechanics. Nonlinear Phenomena in Complex Systems, Vol. 10, No. 2, pp. 192–195, 2007.
- [150] Sheldon Goldstein, Joel L Lebowitz, Roderich Tumulka, and Nino Zanghí. Canonical typicality. *Physical review letters*, Vol. 96, No. 5, p. 050403, 2006.
- [151] Peter Reimann. Typicality for generalized microcanonical ensembles. *Physical review letters*, Vol. 99, No. 16, p. 160404, 2007.
- [152] Sho Sugiura and Akira Shimizu. Thermal pure quantum states at finite temperature. *Physical review letters*, Vol. 108, No. 24, p. 240401, 2012.
- [153] Sho Sugiura and Akira Shimizu. Canonical thermal pure quantum state. *Phys-ical review letters*, Vol. 111, No. 1, p. 010401, 2013.
- [154] Masahiko Hyuga, Sho Sugiura, Kazumitsu Sakai, and Akira Shimizu. Thermal pure quantum states of many-particle systems. *Physical Review B*, Vol. 90, No. 12, p. 121110, 2014.
- [155] Sheldon Goldstein, David A Huse, Joel L Lebowitz, and Roderich Tumulka. Macroscopic and microscopic thermal equilibrium. Annalen der Physik, Vol. 529, No. 7, 2017.
- [156] Hiroyuki Endo, Chisa Hotta, and Akira Shimizu. From linear to nonlinear responses of thermal pure quantum states. *Physical review letters*, Vol. 121, p.

220601, 2018.

[157] Takaaki Monnai and Kazuya Yuasa. Typical pure nonequilibrium steady states. EPL (Europhysics Letters), Vol. 107, No. 4, p. 40006, 2014.