

博士論文

Doctoral Dissertation

揺動散逸定理の量子破綻と電子局在に
対する非対角電流ゆらぎの頑健性

(Quantum violation of fluctuation-dissipation theorem
and robustness of equilibrium off-diagonal current
fluctuation against electron localization)

令和3年12月博士（理学）申請

A Dissertation Submitted for the Degree of Doctor of Philosophy

December 2021

東京大学大学院理学系研究科
物理学専攻

Department of Physics, Graduate School of Science,
The University of Tokyo

久保 賢太郎

Kentaro Kubo

Abstract

不純物が存在する巨視的な二次元電子系のバルク領域における電流ゆらぎの性質を調べた。一般に物理量のゆらぎはどのような測定器で測定したかに依存して大きく変化してしまうが、理想的な古典測定を不確定性原理の範囲内で可能な限り模倣した測定 (準古典測定) をする限り、巨視系のゆらぎは系や測定器の詳細に依らず普遍的に対称化積相関で与えられることが知られている。我々は測定系の性質ではなく、系の性質としてのゆらぎに興味があるため、測定が準古典測定である限り測定の詳細に依存せず得られる対称化積相関で与えられるゆらぎを考察対象とした。

不純物ポテンシャルの形を限定しない一般的な系において、非対角電流ゆらぎ (別方向を流れる電流同士の異時刻相関) を各エネルギー固有状態毎の寄与へと分解する厳密な式変形を行った。そうして得られた表式から、非対角電流ゆらぎには非局在状態だけでなく局在状態も寄与することがわかった。一方、近年まで揺動散逸定理により非対角電流ゆらぎと逆温度の積に一致すると考えられてきた Hall 伝導度には、局在状態は寄与せず化学ポテンシャル以下の非局在状態の寄与のみでその値が決まることが知られている。両者の性質は対照的であり、それぞれが異なる物理に従っていることが明らかになった。また Hall 伝導度と同様に、対角電流ゆらぎや対角伝導度も非局在状態の寄与のみによりその値が決まることが知られている。そのため今回明らかになった局在状態も寄与するという非対角電流ゆらぎの性質は、電流ゆらぎ・電気伝導度の全成分の中で特異的なものになっている。

さらに電子状態の局在化の影響を定量的に調べるため、周期境界条件を課した有限サイズ系の非対角電流ゆらぎを計算した。まず厳密な解析計算により、不純物が存在しない場合には、非対角電流ゆらぎが Landau 準位占有率に対して比例することを示した。傾きの大きさの違いはあるが、Landau 準位占有率に比例するというふるまい自体は、不純物が無い系の Hall 伝導度のふるまいに一致している。次にこの不純物が無い系の厳密解を参照状態とし、短距離型の不純物ポテンシャルを仮定した系における数値計算を行った。パラメタは、電子状態の局在化により Hall 伝導度が不純物が無い系における厳密な比例関係から大きく変化する (整数量子 Hall 効果が生じる) ことで知られている低温強磁場領域に選んだ。この数値計算により、非対角電流ゆらぎの振る舞いは、不純物が無い系のふるまいからほとんど変化せず、Landau 準位占有率に非常に高い精度で比例するという結果が得られた。つまり、非対角電流ゆらぎには局在状態も非局在状態も同程度に寄与することがわかった。この結果は、Hall 伝導度が電子状態の局在化に伴い大きく変化するのと対照的であり、非対角電流ゆらぎが電子状態の局在化に対して強い頑健性を有していることを意味している。このような数値的結果を、相関関数の性質と二次元電子系におけるスペクトル構造に関する知見を用いた解析計算から説明することにも成功した。

また電子状態の局在化に対して、非対角電流ゆらぎが強い頑健性を有していることを、電子数密度推定へと応用する提案を行った。これまで半導体の電子数密度を推定するために用いられてきた典型的な手法は Hall 伝導度と電子数密度の比例関係を利用するものである。しかし、量子効果により両者の比例関係が崩れる低温強磁場領域では、この手法では正しい電子数密度推定ができないことが知られている。我々が新たに提唱した非対角電流ゆらぎと Landau 準位占有率の比例関係を用いて電子数密度を推定する方法は、従来の手法が苦手としていた低温強磁場領域で高精度になる手法であり、整数量子 Hall 効果の実験で典型的に用いられるような設定において、数 % 程度の誤差で電子数密度を推定することができる。

以上の発見は、基礎物理としても、実験への応用としても、一定の有用さを有していると考えている。

Abstract (English)

We study the property of the current fluctuation in a macroscopic two-dimensional electron system with impurities. In general, the observed fluctuation strongly depends on the way of measurements. However, it is known that, as long as the measurement is the quasi-classical one, which simulates the ideal classical one as closely as possible, the observed fluctuation of a macroscopic system is given by symmetrized time correlation. This fact holds universally regardless of the details of the system and the measuring instrument. Since we are interested in fluctuations as an intrinsic property of the system rather than a specific property of the measurement instrument, we consider fluctuations observed by quasi-classical measurement.

In a general system, where the details of the impurity potential are not restricted, we have rigorously decomposed the off-diagonal current fluctuations (the Fourier transform of the temporal correlation function between currents flowing in different directions) into contributions from individual energy eigenstates. From the obtained decomposition, we found that not only the extended states but also the localized states contribute to the off-diagonal fluctuation. On the other hand, it is known that localized states do not affect the Hall conductivity, which has been considered to be equal to the product of the off-diagonal fluctuation and the inverse temperature by the fluctuation-dissipation theorem until recently. These properties contrast each other, and it is clear that they follow different physics. Furthermore, since localized states do not affect not only the Hall conductivity but also the diagonal conductivity and fluctuation, the property of the off-diagonal fluctuation that all states, including localized states, contribute is anomalous among all components of fluctuations and conductivities.

Next, in order to quantitatively evaluate the contributions of the localized states, we calculated the off-diagonal fluctuation in a finite-size system with periodic boundary conditions in both directions. We first rigorously showed that the off-diagonal fluctuation of the pure system is proportional to the Landau level filling factor. Although the magnitude of the slope is different, this proportional relationship coincides with the behavior of the Hall conductivity of the pure system. Then, using the exact solution of the pure system as a reference state, we performed numerical calculations for the system assuming a short-range impurity potential. We assumed parameters as the low-temperature and strong magnetic-field regime, where the Hall conductivity significantly deviates from the exact proportional relationship due to the effect of the localization of the electron states. The obtained results showed that the off-diagonal fluctuation increases almost linearly as a function of the Landau level filling factor. In other words, we found that the contribution of each localized state to the off-diagonal fluctuation is of the same order as that of each extended state. These results mean that the off-diagonal fluctuation has strong robustness against the electron localization in contrast to the Hall conductivity. We have succeeded in explaining this numerical result from analytical calculations using the properties of the correlation function and knowledge of the spectral structure in two-dimensional electron systems.

We have also proposed applying the strong robustness of the off-diagonal current fluctuation to estimate the electron density experimentally. The typical method that has been used to estimate the electron density of semiconductors is based on the proportional relationship between Hall conductivity and electron density. However, it is known that this method does not provide a correct estimation in the low temperature and strong magnetic-field region, where quantum effects break the proportionality between them. The new method we have proposed in this paper is based on the robust proportional relationship between off-diagonal fluctuation and electron density, and hence high-accuracy estimation is possible in the region in which the conventional method is weak. For example, in settings typically used in experiments of the integer quantum Hall effect, this method can estimate the electron density within an error of a few percent.

It is expected that these findings will contribute to both the fundamental physics and applications to experiments.

List of Publications

1. K. Kubo, K. Asano, and A. Shimizu. Macroscopic quantum violation of the fluctuation-dissipation theorem in equilibrium. Phys. Rev. B, Vol. 98, p. 115429, 2018. DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.115429> (本論文第 2 章の一部を公表)
2. K. Kubo, K. Asano, and A. Shimizu. Robustness of equilibrium off-diagonal current fluctuation against localization of electron states in macroscopic two-dimensional systems. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 91, No. 2, p. 024004, 2022. DOI:<https://doi.org/10.7566/JPSJ.91.024004> (selected as a Paper of Editors' Choice, 本論文第 6 章の一部を公表)

目次

第 I 部	序	13
第 1 章	はじめに	15
1.1	背景 -揺動散逸定理とその量子破綻-	15
1.2	巨視系における電流ゆらぎの性質の解明	17
1.3	本論文の構成	18
第 II 部	レビューと解析手法の準備	19
第 2 章	巨視系における揺動散逸定理の量子破綻	21
2.1	揺動散逸定理	21
2.1.1	揺動散逸定理とその歴史	21
2.1.2	揺動散逸定理の応用	22
2.1.3	Kubo 公式	23
2.1.4	Kubo 公式は量子系における FDT としての意味を持つのか?	24
2.2	量子測定理論の概説	25
2.2.1	射影測定	25
2.2.2	一般の間接測定	26
2.2.3	測定誤差	28
2.2.4	測定の反作用	29
2.3	準古典測定により得られる線形応答関数と平衡ゆらぎ	30
2.3.1	ゆらぎを測定するための理想的な測定とはどのような測定か	30
2.3.2	準古典測定の反作用と準古典測定により得られる平衡ゆらぎ	31
2.3.3	準古典測定により得られる線形応答関数と FDT の破れ	32
2.4	FDT の破れ	33
2.4.1	スペクトル強度の定義	33
2.4.2	時間反転対称性と対称・反対称成分	34
2.4.3	相関関数の性質	34
2.4.4	周波数空間における FDT の破れ	36
2.5	巨視系における FDT の非自明な破れとその条件	37
2.5.1	流れに対する FDT の破れ	37
2.5.2	FDT の破れが増大する条件	38

2.5.3	二次元電子系のホール伝導度と対角ゆらぎの関係	39
第 3 章	巨視系における電気伝導度の性質	43
3.1	準備	43
3.1.1	設定	43
3.1.2	Nakano-Kubo 公式	44
3.2	各状態の電気伝導度への寄与	46
3.2.1	電気伝導度の表式	46
3.2.2	対角伝導度の性質	47
3.2.3	Hall 伝導度の性質	48
第 4 章	一様磁場中電子の物理と伝導現象	51
4.1	古典論	51
4.1.1	ラグランジアンとハミルトニアン	51
4.1.2	電場 0 の場合の解	52
4.1.3	静電場が印加された場合の解と電気伝導度	52
4.1.4	Drude モデルと電気伝導度	53
4.1.5	電子数密度推定	55
4.1.6	移動度の定義とその測定法	56
4.2	磁場中の自由電子の量子論	56
4.2.1	正準量子化	57
4.2.2	中心座標と相対座標	57
4.2.3	電場 0 の場合のハミルトニアンの対角化	57
4.2.4	保存運動量と磁場中の並進移動演算子	58
4.3	エネルギー固有関数の表式	60
4.3.1	Landau ゲージ	60
4.3.2	Landau 準位の縮退数と占有率	62
4.3.3	周期境界条件下の波動関数	62
4.3.4	静電場が印加された場合の波動関数と電気伝導度	64
4.4	乱れがある場合	65
4.4.1	不純物散乱の影響の概要	65
4.4.2	SCBA による強磁場領域の状態密度の計算	66
4.4.3	Nakano-Kubo 公式による電気伝導度の計算	69
4.4.4	Kubo-Miyake-Hashitsume 公式の導出と利点	71
4.4.5	Kubo-Miyake-Hashitsume 公式による低温強磁場下の DC 伝導度の計算	73
4.4.6	拡散運動による理解	75
第 5 章	整数量子 Hall 効果	77
5.1	概要と意義	77
5.2	整数量子 Hall 効果の起源	78
5.2.1	準備	78

5.2.2	プラトーが出る理由と局在状態の分布	79
第 III 部	結果	81
第 6 章	巨視系における平衡電流ゆらぎの性質	83
6.1	各状態の電流ゆらぎへの寄与	83
6.1.1	対角電流ゆらぎ	83
6.1.2	非対角電流ゆらぎ	84
6.2	局在状態の寄与の定量的評価	85
6.2.1	不純物が無い系の表式	85
6.2.2	不純物により乱れた系の数値計算手法	86
6.2.3	結果	87
6.3	考察	88
6.3.1	$\text{Im}\sigma_{xy}$ を用いた σ_{xy} の変形	89
6.3.2	$\text{Im}\sigma_{xy}$ を用いた βS_{xy} の変形	90
6.4	応用の可能性	93
6.4.1	電子数密度推定	93
6.4.2	βS_{xy} の測定に関する注意	93
第 IV 部	まとめ	95
第 7 章	結論	97
7.1	まとめ	97
7.2	今後の展望	98
7.2.1	電流ゆらぎの位置依存性測定位置依存性の解明	98
7.2.2	様々な電流測定手法に対する理論的理解の獲得	100
付録 A	準古典測定	105
A.1	系と平衡状態に関する仮定	105
A.2	準古典測定の厳密な定義	105
付録 B	$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter,intra}}$ の大きさのオーダーの見積もり	107
B.1	$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ の大きさのオーダー	107
B.1.1	スペクトルの広がり	107
B.1.2	スペクトルの損失	108
B.1.3	$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ の推定	108
B.2	$\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ の大きさのオーダー	109
参考文献		111

第 I 部

序

第 1 章

はじめに

1.1 背景 -揺動散逸定理とその量子破綻-

巨視系における物理量の平衡ゆらぎは揺動散逸定理 (FDT: Fluctuation-Dissipation Theorem) の観点から盛んに研究されてきた [1–15]. FDT とは物理量の平衡ゆらぎが線形応答関数と温度 $T = 1/\beta$ ($k_B = 1$ にとった) の積に一致することを主張する定理である. 平衡電流ゆらぎと電気伝導度の対応は FDT の最も有名な例として知られている.

FDT はゆらぎ (揺動) が対角伝導度のような散逸を表す線形応答関数 (散逸係数) に一致する関係式として発見された [1–3]. そのためにこのような名前がつけられたのである. しかし, Onsager による相反定理の発表 [4,5], 高橋秀俊による Liouville 方程式を用いた導出 [6] を経て, 古典系ではゆらぎと線形応答関数の全ての成分について成立する関係式であることが証明された. 古典系では非対角電流ゆらぎと Hall 伝導度 (散逸係数でない線形応答関数) の間にも FDT が成立することが明らかになったのである.

FDT の導出過程を見れば明らかだが, FDT が平衡ゆらぎと線形応答関数の関係式であることは強く認識しておく必要がある. 非平衡ゆらぎや非線形応答関数に関する関係式だと誤解してはならない. 非平衡ゆらぎに関する研究としては, 例えば, $1/f$ ノイズやショットノイズなどを含む非平衡電流ゆらぎの研究が盛んに行われてきた [16–24]. それらの研究結果も非平衡ゆらぎは線形応答関数とは一致しないことを示している. ガラス系は平衡系に緩和していないため, 密度ゆらぎが線形応答関数と一致しないこともよく知られている [25]. また非線形応答関数と平衡ゆらぎももちろん一致しない [26,27]. このような非平衡性故に現れる物理量に着目し, それらの間に等号関係が成立しないことを「FDT の破れ」と呼ぶ研究が数多く存在する [25,28]. しかし, ここまでの説明からもわかるように, そのような「FDT の破れ」は本来の意味での FDT が破れたわけではないことには注意する必要がある. また非平衡定常系における FDT に類似した関係式 [29–31] や, ゆらぎの定理を用いた非平衡ゆらぎと非線形応答関数の対応 [32–34], 系のスクランプリングを特徴づける OTOC (Out of Time-Ordered Correlation) と非線形応答関数の対応 [35,36] など, FDT を非平衡系へと拡張する試みも数多く行われてきた. このような背景から, 「FDT」や「FDT の破れ」という言葉の使い方は乱立している. 本論文では混乱を避けるため, 巨視系における平衡ゆらぎと線形応答関数の間の等号関係のみを FDT と呼ぶことにする.

FDT の最も重要な側面は異なる独立な実験により得られる物理量をつなぐという点にある. 線形応答関数は非平衡状態における物理量の応答を測定することによって得られるのに対して, ゆらぎは平衡状態における物理量の時間相関を測定することによって得られる. つまり, 揺動散逸定理を用いれば, 非平衡系で線形応答関数を測定することにより平衡状態における物理量のゆらぎを推定すること, またはその逆が可能なのである.

ゆらぎを測定するよりも線形応答関数の測定の方が容易であることが多いため、この非自明な性質は応用上も非常に便利であり、電子回路 [37,38], 光学デバイス [39–41], 重力波検出器 [42] などのノイズ推定の手法として広く用いられてきた。また線形応答関数とゆらぎの両方を測定すればその比から温度を推定することもできる [43]。このように FDT は応用の観点でも物理学の発展に大きく貢献してきたのである。

しかし、古典系における FDT は厳密に証明されている一方で、量子系における FDT の妥当性については長年の間疑問視されてきた [6]。その理由は量子系の FDT の導出において、測定の反作用が考慮されていないためである [7–15]。古典系では測定の反作用が存在しない理想的な測定を行うことができるが、量子系では不確定性原理による制限のためにそういった測定はできない [44–48]。平衡期待値の測定であれば、同じ状態のアンサンブルを用意することにより、反作用と無関係な測定を行うことが可能だが、時間相関は原理的に複数回の測定をしなければ得られないため、測定の反作用による影響を避けられない。例えば、光子を吸収するタイプの測定器で測った光子相関は光子の生成消滅演算子の正規順序積になる一方で、量子カウンターで測った光子相関は光子の生成消滅演算子の非正規順序積になることが知られている [49,50]。これらの違いは、たとえば検出器が零点振動を測定可能かどうかという点に現れる。そのため零点振動が大きくなる高周波数成分 $\hbar\omega \gg k_B T$ では両者に大きな違いが現れることが知られている [51]。また量子非破壊測定器を用いて測った光子相関は上述の 2 つの例とはまた異なる相関関数で与えられることが知られている [52,53]。このような測定手法による時間相関の変化は光子相関に限られた現象ではない。電流相関も測定器毎に別の関数形の相関が得られることが知られている [54–62]。特にジョセフソン接合を用いたヘテロダイン測定により対称化積相関が得られることが確認されている [63]。これらの事実から明らかなように、ゆらぎの測定結果は測定の反作用に強く依存するため、その効果を考慮せずして量子系における FDT の成否について議論することはできないのである。

この問題に着目した参考文献 [64,65] の著者らは、量子系における FDT の成否について議論するため、原理的に避けることが可能な反作用を全て取り除いた測定をした場合に得られるゆらぎはどのような相関関数で与えられるのか、という問題を考えた。そして量子測定理論と量子中心極限定理を用いた解析の結果、巨視系の平衡ゆらぎの測定に関して、これまで存在し得ないと考えられてきた普遍的な結果が存在することが明らかになったのである。彼らが示したのは、理想的な古典測定を不確定性原理の許す範囲内で可能な限り模倣した測定 (準古典測定) を行う限り、測定されるゆらぎは常に物理量の対称化積相関で与えられる、というものであった (2.3 節参照)。この結果は系が巨視系であり、測定が準古典測定である限り測定器や系の詳細に依らずに普遍的に成立する驚くべき結果である。そして、線形応答関数はカノニカル相関で与えられることが一般的に示されているため [13–15]、原理的に避けることが可能な反作用を全て取り除いた測定を行ったとしても、量子系では FDT が破綻することが明らかになったのである。この破れは前述の非平衡効果による破れとは異なり、巨視的に拡大された量子効果による破れである。この研究以前にも、高周波数領域では前述の零点振動の寄与などにより、FDT に補正が入ることを指摘した研究は存在していた。しかし、[64,65] はそれまでに指摘されてこなかった低周波数領域 $\beta\hbar\omega \ll 1$ 、特に任意の非零の温度に対して低周波数領域にある静的成分 $\omega = 0$ でさえ普遍的に FDT の破れが生じる可能性があることを指摘しており、その点においても重要な意味を持っている。

このようにして原理的に避けることが可能な反作用を全て取り除いた測定を行ったとしても、量子系では FDT が破綻することが明らかになったのである。そしてその破れはこれまで破れが生じ得ないと考えられてきた静的成分でも起こり得ることが指摘された。しかし、[64,65] では FDT の破れがどの程度増大するのかに関する十分な議論はなされていなかった。そのため、彼らの研究内容に対して、破れの原因は量子効果なのだから巨視的な系では無視できる程度の破れしか現れないのではないかと、といった素朴な疑問も出されていた。この問題に着目した我々は、静的成分 $\omega = 0$ における FDT の非自明な破れの大きさを具体的に評価する研究 [66] を行った。そして、相関関数の性質 [15] や熱力学の第二法則など系の詳細に依らない手法のみを用いた

解析により、一般的な系、一般的な流れのゆらぎに対して FDT の破れが巨視的に増大する条件を明らかにすることに成功した。特に二次元電子系における電流ゆらぎと電気伝導度の関係については具体的なモデルを設定した解析も行った。その結果として、対角電流ゆらぎは任意のパラメタに対して対角伝導度と一致するのに対して、非対角電流ゆらぎは量子ホール効果が生じるような低温強磁場領域では Hall 伝導度の数十倍も大きくなりうることを明らかにした。つまり、対角成分の FDT は成立するものの、非対角成分の FDT は大きく破綻するのである。このようにして量子的な効果による FDT の破れが巨視系に拡大される条件が明らかにされたとともに、低温強磁場領域における非対角電流ゆらぎと Hall 伝導度の値の乖離という事実が発見されたのである。

1.2 巨視系における電流ゆらぎの性質の解明

前節では量子系における FDT がなぜ破れるのかについて説明を行い、その重要な例として低温強磁場領域における Hall 伝導度と非対角電流ゆらぎの値の大きな乖離が発見されたことを説明した。我々は FDT の破れを示した研究としてこれらの成果の発表を行った [66]。しかし、研究結果に関して議論を深める中で [66] の結果がこれまで FDT 故に同様の物理に従うと考えられてきた物理量が実は異なる物理に従っていることを明らかした、という意味合いを持つことに気づいた。特に FDT が大きく破綻することがわかっている低温強磁場領域の巨視的な二次元電子系において

- 非対角電流ゆらぎの Landau 準位占有率依存性はこれまで盛んに研究されてきた Hall 伝導度の Landau 準位占有率依存性 [67–79] とどのように異なるのか？またプラトー領域は非対角電流ゆらぎにも現れるのか？
- 局在状態は Hall 伝導度に寄与しないことが知られているが [80]、非対角伝導度にも寄与しないのか？

などの問は輸送現象の観点から非常に興味深い問題になっている。なお本論文で議論しているゆらぎは一貫して巨視系のバルク領域におけるゆらぎでありメゾスコピックな試料に接続された端子における電流ゆらぎ [19–22] とは別物である。この点に関しては 6.4.2 節でより詳しい説明を行うが、両者を混同しないように注意されたい。

このような、巨視系のバルク領域における非対角電流ゆらぎが従う物理を明らかにするためには、研究 [66] とは異なるアプローチを用いた解析が必要である。なぜなら研究 [66] では巨視系における FDT の破れの大きさを具体的に評価することを目的としていたため、その目的に合った近似計算手法である自己無撞着ボルン近似 (SCBA: Self-Consistent Born Approximation) [81] を用いていたためである。SCBA は無限系における破れのオーダーを正しく計算でき、特に低温強磁場極限かつ Landau 準位占有率が整数の場合には厳密に正しい Hall 伝導度が得られることが知られているが、電子状態の局在による効果を扱えないために Landau 準位占有率が中途半端な値の場合には大きな誤差を伴う結果が得られることが知られている。つまり、非対角電流ゆらぎの Landau 準位占有率依存性や電子状態の局在化が非対角電流ゆらぎにどのように影響するのかについて明らかにするためには、SCBA を用いた解析 [66] では不十分なのである。

そこで本研究では、厳密な解析計算と具体的なモデルを仮定した数値計算の 2 種類の手法を用いて、原理的に取り除くことが可能な反作用を全て取り除いた測定 (準古典測定) を行った場合に得られる、巨視的な二次元電子系のバルク領域における電流ゆらぎの解析を行った。まず厳密な解析計算により、非対角電流ゆらぎには局在状態だけでなく非局在状態も寄与することを明らかにした。この性質は広く知られている Hall 伝導度の性質と著しく異なるものであり、両者が従う物理が異なっていることを顕著に示している。また不純物ポテン

シャルの具体形を仮定した数値計算により、非対角電流ゆらぎの占有率依存性を計算した。その結果、低温強磁場領域における非対角電流ゆらぎと Landau 準位占有率は非常に高い精度で比例関係になっていることがわかった。この関係は不純物が無い系における両者の厳密な比例関係からほとんど変化していない。つまり、非対角電流ゆらぎは不純物散乱の効果に対して非常に鈍感なことが明らかになったのである。このふるまいは、不純物散乱の影響により大きく変化する Hall 伝導度のふるまい [80] と対照的である。非対角電流ゆらぎと Hall 伝導度の振る舞いがなぜここまで異なるのかに関しては、解析計算を用いた考察により一定の理解が得られている。また非対角電流ゆらぎの不純物散乱に対する強い頑健性を、電子数密度の推定に応用する可能性を見出した。この手法は低温強磁場領域でも高い精度の電子数密度推定が可能な手法であり、半導体のキャリア密度推定手法として標準的に用いられてきた従来の手法 [82] が苦手とする領域をカバーすることができる。

1.3 本論文の構成

本論文の構成は次のとおりである。II 部には議論を行うために必要となる前提知識をまとめた。その中の 2 章では FDT および量子系における FDT の破れ [64,65] に関して説明を行った。FDT の破れを理解するために必要となる量子測定理論についても簡単にまとめている。また FDT の破れが巨視的に増大する条件を示した我々の 2018 年の研究 [66] についても解説した。続く 3 章では Kubo 公式から出発して巨視系の電気伝導度がどのような性質を持つのかに関して説明を行った。電気伝導度の性質は、本論文の主題である巨視系の電流ゆらぎの性質の重要な比較対象である。対角伝導度には化学ポテンシャル近傍の非局在状態が、Hall 伝導度には化学ポテンシャル以下の全ての非局在状態が寄与するという性質を説明することがこの章の目的である。4 章では FDT の破れや電流ゆらぎの性質を考察する舞台となる二次元電子系の物理についてまとめた。この章で説明する磁場中の乱れた二次元電子系における局在・非局在状態への理解も、本論文の内容を理解するために必要不可欠である。5 章では磁場中の二次元電子系における驚くべき物理現象である整数量子効果の説明を行った。低温強磁場領域における Hall 伝導度の Landau 準位占有率依存性やその理由についての理解を深めることが目的である。そして III 部 6 章が本論文の主要部分である。II 部で整理した知識を駆使して、巨視系の電流ゆらぎの性質について解析した結果をまとめた。6.1 節では解析計算を用いて非対角電流ゆらぎには局在状態が寄与することを明らかにした。続く 6.2 節では数値計算により非対角電流ゆらぎの Landau 準位占有率依存性が、不純物散乱の影響をほとんど受けないことを示し、6.3 節では解析計算を用いてそういったふるまいが生じる理由の考察を行った。6.4 節では得られた結果を電子数密度推定へと応用する方法の提案および、バルク領域の電流ゆらぎの測定に関する注意事項について述べた。最後に IV 部 7 章で本論文の内容をまとめるとともに、今後の展望についても述べた。

第II部

レビューと解析手法の準備

第 2 章

巨視系における揺動散逸定理の量子破綻

この章では、本研究に着手する要因となった揺動散逸定理の破綻に関する先行研究 [64, 65], および自身の 2018 年の研究 [66] のレビューを行う。またそれらの理解に必要な量子測定理論の概要も説明する。

2.1 揺動散逸定理

粒子数 N の平衡状態を用意し、そこに外力 $F(t)$ を印加する。すると系は非平衡状態へと駆動される。このとき、相加物理量 B が平衡状態からどれだけ応答 (変化) したかを考える。もし $F(t)$ が十分に小さければ、 B の変化と外力 F は次のように線形に結びつく。

$$\frac{B(t)}{N} - \frac{B(0)}{N} = \int_{-\infty}^t dt' \phi(t-t')F(t') \quad (2.1.1)$$

この関係式を線形応答関係式、 $\phi(t)$ を線形応答関数と呼ぶ。左辺の $1/N$ は省略されることもあるが、熱力学極限を議論するためには省略してはならない [64, 65]。 F として電場、 B として電流を考えれば $\phi(t)$ は電気伝導度という意味を持つ。

揺動散逸定理とは、物理量の平衡ゆらぎが上記のように定義される線形応答関数と温度 $T = 1/\beta (= 1/k_B T)$ の積に一致することを主張する定理である [1–15]。平衡電流ゆらぎが電気伝導度に一致することがその最も有名な例として知られている。物理量のゆらぎは、何らかの時間相関で与えられるため、揺動散逸定理の主張は次のように表すことができる [64, 65]。

$$\text{物理量の平衡ゆらぎ} = \text{物理量の時間相関} = T \times \text{線形応答関数}. \quad (2.1.2)$$

次小節ではこの定理の歴史を概観する。

2.1.1 揺動散逸定理とその歴史

揺動散逸定理は Einstein が Brown 運動について研究する中で発見された [1]。外力に対して微粒子がどれだけの速度で応答するかを表す移動度 μ と、微粒子のゆらぎを表す拡散係数 D の間に Einstein の関係式

$$D = T\mu \quad (2.1.3)$$

が成立することを導いたのである。

その後, Johnson により, 試料の両端に発生する電圧ゆらぎ G_V がその試料の抵抗値 R と次の関係で結びつくことが実験的に発見された [2].

$$G_V = 4TR \quad (2.1.4)$$

同年に, Nyquist が熱力学的な考察により Johnson の結果に対する理論的説明を与えた [3]. こういった事情から, 上記の関係式は Nyquist の定理, G_V は Johnson-Nyquist ノイズと呼ばれている.

Einstein の関係式や Johnson-Nyquist ノイズの表式は, ゆらぎが散逸を表す線形応答関数 (移動度, 縦抵抗) と一致することを示している. そのためこれらの関係式は揺動散逸定理と呼ばれるようになった. しかし, Onsager による相反定理の発表 [4, 5], 高橋秀俊による Liouville 方程式を用いた導出 [6] を経て, 散逸と直結しない Hall 伝導度のような線形応答関数も, それに対応するゆらぎと逆温度 β の積に一致することが示された. このようにして, 揺動散逸定理は古典系ではゆらぎと線形応答関数のすべての成分に対して成立する普遍的な関係式として広く受け入れられるようになった.

これらの結果を量子系へと拡張する試みは, 量子系において線形応答関数がどのような相関関数で与えられるかという興味の下で数多くの研究者により行われてきた. まず Nyquist が彼自身の理論の拡張について言及している [3]. 彼が Nyquist の定理の証明に用いたエネルギー等分配則は高周波数領域では破れることから, 高周波数成分では Nyquist の定理に補正が入ることを導いたのである. その後の Callen, Welton の研究により, Nyquist が言及した量子補正への理解は更に発展した [7]. さらに輸送係数とゆらぎの間の一般論を Green が論じている [8, 9]. そして電気伝導度が電流のカノニカル相関 (時間相関の一種) で書けることを中野が示しており [12], 同時期中島も同様の結論に達していた [11]. 中野・中島はこの関係式が伝導現象固有の現象論だと認識していたが, 久保は von Neumann 方程式とミクロなハミルトニアンから出発して, 一般の線形応答関数が対応する物理量のカノニカル相関で与えられることを示した [13, 14].

$$\text{線形応答関数} = \beta \times \text{カノニカル相関} \quad (2.1.5)$$

この公式は Kubo 公式と呼ばれている. Kubo 公式は中野, 中島などによるそれまでの結果や, 久保自身による磁気感受立の計算公式 [10] を内包している. また Kubo 公式の古典極限を取ることで, 高橋が導いた古典系の FDT が得られる. このような事実から, Kubo 公式は線形応答関数の計算公式の決定版として広く受け入れられるようになった. そして Kubo 公式が FDT の表式 (2.1.2) を線形応答関数に関して整理したものに見かけ上一致していることから, 量子系でも FDT が成立すると認識されるようになった.

2.1.2 揺動散逸定理の応用

これまで説明してきたように, 揺動散逸定理は線形応答関数の計算公式を与えている. これが物理学の発展に貢献したことは言うまでもない. しかし, 揺動散逸定理の重要性はそれだけにとどまらない. この定理が「全く異なる独立な実験で得られる 2 つの物理量が温度を係数に一致する」という非自明な主張になっていることが, 様々な応用を可能にしたのである.

もっとも有名なのはノイズ (ゆらぎ) の推定への応用である. 線形応答関数は外場を印加したときの相加物理量の期待値を測定することにより得られる. 相加物理量の期待値はまともなマクロ系であれば $\mathcal{O}(N)$ の大きさを持つ. 一方, 相加物理量のゆらぎは $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ の極めて小さな量の測定により得られる. これはゆらぎが線形応答関数に比べて測定が難しい量であることを意味している. しかし, 揺動散逸定理を使えば, 測定の容易な線形応答関数の測定結果から測定の難しい平衡ゆらぎの推定ができるのである. これは非常に強力な手法であり, 電気・電子回路における電流ノイズを推定するために頻繁に用いられてきた [37, 38]. 精密機器を作成する

上で、機器のノイズを正確に見積もっておくことは非常に重要であることから、発光素子や重力波検出器の作成過程においても重宝されている [39–42].

また揺動散逸定理を温度計として用いるという応用も有名である [43]. 線形応答関数とゆらぎの両方を測定しておけば、両者の比から温度を推定することができる. この方法は他の物理量を全く参照せずに、測定結果のみから温度を決定できる非常に強力な手法である.

2.1.3 Kubo 公式

本小節では、量子系における線形応答関数の計算手法を与える Kubo 公式 [13–15] の説明を行う. まず平衡系を考え、初期状態 $\hat{\rho}_{\text{eq}} = \hat{\rho}(0)$ をカノニカル分布に取る. 物理量 \hat{B} の平衡期待値は

$$\langle \hat{B} \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_{\text{eq}} \hat{B} \right] \quad (2.1.6)$$

で与えられる. この系に微小な外力 $F(t)$ を印加する. このとき、系のハミルトニアン $\hat{H}(t)$ は外力を印加する前の平衡系のハミルトニアン \hat{H}_{eq} と外力を記述するハミルトニアン $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$ を用いて

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_{\text{eq}} + \hat{H}_{\text{ext}}(t) \quad (2.1.7)$$

$$\hat{H}_{\text{ext}}(t) = -F(t)\hat{C} \quad (2.1.8)$$

と書けるとする. ここで \hat{C} は外力に共役な物理量である. この設定の下で von Neumann 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \quad (2.1.9)$$

を解き、 $\hat{\rho}(t)$ を $\hat{H}_{\text{ext}}(t)$ の 1 次の精度で求める. そのようにして得られた $\hat{\rho}(t)$ を用いると、物理量 \hat{B} の時刻 t における期待値

$$\langle \hat{B}(t) \rangle = \text{Tr} \left[\hat{\rho}(t) \hat{B} \right] \quad (2.1.10)$$

が計算できる. 詳細は省略するが、具体的な計算結果を式 (2.1.1) と比較することにより、Kubo 公式

$$\phi_{ba}(t) = \theta(t)\beta \langle \Delta \hat{a}; \Delta \hat{b}(t) \rangle_{\text{eq}} \quad (2.1.11)$$

が得られる. ここで $\theta(t)$ は因果律を表すステップ関数であり、

$$\langle \hat{X}; \hat{Y}(t) \rangle = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \langle e^{\lambda \hat{H}_{\text{eq}}} \hat{X} e^{-\lambda \hat{H}_{\text{eq}}} \hat{Y}(t) \rangle_{\text{eq}} d\lambda \quad (2.1.12)$$

はカノニカル相関と呼ばれる時間相関関数である. また

$$\Delta \hat{a} = \frac{\Delta \hat{A}}{\sqrt{N}}, \Delta \hat{b} = \frac{\Delta \hat{B}}{\sqrt{N}}, \Delta \hat{c} = \frac{\Delta \hat{C}}{\sqrt{N}}, \quad (2.1.13)$$

は、 $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ のゆらぎ $\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}, \Delta \hat{C}$ を考察するために、適切にスケールした $\mathcal{O}(1)$ の演算子であり

$$\hat{A} = \dot{\hat{C}} \quad (2.1.14)$$

は \hat{C} の速度である.

Kubo 公式は FDT の表式 (2.1.2) に見かけは一致している. 特に古典極限をとると, カノニカル相関は積の相関に置き換わり, 高橋が導いた古典系の FDT

$$\phi_{ba}(t) = \theta(t)\beta\langle\Delta a\Delta b(t)\rangle_{\text{eq}} \quad (2.1.15)$$

が得られる. これらの結果から, Kubo 公式は量子系における FDT としての意味を持つと考えたくなる. しかし, その安易な見方は誤りであり, 量子系では FDT が破れることが近年の研究により示されている [64, 65]. この点に関しては本章の後半で説明を行う.

上記のカノニカル相関を用いた表式は, 揺動散逸定理を考察する上で非常に重要な式だが, カノニカル相関を恒等変形することにより

$$\phi_{ba}(t) = \phi_{[bc]}(t) \quad (2.1.16)$$

$$\phi_{[bc]}(t) \equiv \theta(t)\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{c}, \hat{b}(t)]\rangle_{\text{eq}} \quad (2.1.17)$$

という交換関係を用いた表式が得られる [13–15]. この表式は具体的な計算を進めるために非常に有用であり, 以降の計算に頻出する. 本論文を通じて, 応答関数をカノニカル相関を用いて書く場合には下付きの添字を付けた $\phi_{ba}(t)$ で書き, 交換関係を用いて書く場合には角括弧で囲んだ下付きの添字をつけた $\phi_{[bc]}(t)$ で書くことにする.

ここで一つ具体例を考える. F として ν 方向の電場 E_ν を印加し, この外力に対する μ 方向の電流の線形応答関数がどのように与えられるのかを Kubo 公式を用いて考察する. まず摂動ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{ext}} = -e \sum_{i=1}^N E_\nu \hat{r}_\nu^i \quad (2.1.18)$$

となる. つまり, $\hat{C} = -\sum_{i=1}^N \hat{r}_\nu^i$ である. このとき \hat{C} の速度 \hat{A} は電流演算子の ν 方向成分

$$\hat{J}_\nu = -e \sum_i \hat{r}_\nu^i \quad (2.1.19)$$

になる. これらを使うと, 電場に対する電流の μ 方向成分の応答関数 (電気伝導度) が

$$\phi_{j_\mu j_\nu}(t) = \theta(t)\beta\langle\Delta\hat{j}_\nu; \Delta\hat{j}_\mu(t)\rangle_{\text{eq}} \quad (2.1.20)$$

と電流演算子のカノニカル相関で与えられることがわかる. このように, 線形応答関数が同じ演算子のカノニカル相関で与えられる場合には, $\phi_{j_\mu j_\nu}(t)$ を $\phi_{\mu\nu}(t)$ のように書くことにする. また交換関係を用いた表式に変形すると

$$\phi_{[j_\mu r_\nu]}(t) = \theta(t)\frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\left(-e\sum_i\Delta\hat{r}_\nu^i\right), \Delta\hat{j}_\mu(t)\right]\right\rangle_{\text{eq}} \quad (2.1.21)$$

と書くことができる.

2.1.4 Kubo 公式は量子系における FDT としての意味を持つのか?

前小節において Kubo 公式がどのように導出されるか, また Kubo 公式が FDT の表式 (2.1.2) に見かけ上一致していることを見た. Kubo 公式による予言がこれまで様々な実験結果を説明してきたように, Kubo 公式が線形応答関数の計算公式を与えているという点は正しいだろう. しかし, 「Kubo 公式が揺動散逸定理と

しての意味を持つのか？」という問は非自明である。これは Kubo 公式の導出の際、測定による反作用の影響が全く考えられていないためである [13–15]。反作用がない理想的な測定は古典系では可能だが、量子系では不確定性原理による制限のために許されない [44–48]。そして、原理的に、ゆらぎは同じ状態に対して多数回の測定を行わなければ得られないため、測定による反作用の影響を避けられない*1。よって、「現実的な測定により得られるゆらぎもカノニカル相関で与えられる。そして Kubo 公式は FDT そのものである。」と考えるのは早計である。

古典系の FDT を証明した高橋は量子系特有のこのような問題を懸念し、彼の理論を量子系へと発展させることをしなかった [6]。また久保の原論文 [13] においても、カノニカル相関と後に説明する対称化相関の比較が行われている。そういった意味で、久保自身はカノニカル相関は測定されるゆらぎではなく、対称化積相関が測定されるゆらぎだと予想していたのだと思われる。しかし、彼は測定による反作用について言及しておらず、あくまで測定されるゆらぎがどのような形で与えられるのかを予想したに過ぎなかった。測定されるゆらぎがどのような相関関数で与えられるのか、また Kubo 公式が FDT としての意味を持つのか、といった問題を正しく理解するためには、量子測定理論 [44–48] と量子中心極限定理 [83, 84] を用いた解析が必要不可欠である。しかし、Kubo 公式が発表された当時はどちらの理論も現在ほど発展しておらず、この問題を議論する術がなかった。この問に対する決定的な答えが得られたのは、Kubo 公式の発表から半世紀以上も後の 2016 年であった [64]。

2.2 量子測定理論の概説

本節では量子系における FDT を論じるために不可欠となる量子測定理論の概要をまとめる。本節の内容は主に文献 [47, 48] を参考にした。

2.2.1 射影測定

まず通常の量子力学の教科書でも説明される射影測定についてまとめる。純粋状態 $|\Psi\rangle$ が用意されているときに、物理量 $\hat{A} = \sum_k \alpha_k \hat{P}_k$ を射影測定することを考える。ここで \hat{P}_k は固有値 α_k に対応する固有空間への射影演算子であり

$$\hat{P}_k^2 = \hat{P}_k \quad (2.2.1)$$

$$\sum_k \hat{P}_k = \hat{I} \quad (2.2.2)$$

を満たす。ボルの確率規則より射影測定の結果は、確率

$$P(k) = \langle \Psi | \hat{P}_k | \Psi \rangle \quad (2.2.3)$$

で α_k となる。また測定結果 α_k を得た直後の状態は射影仮説より

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{P(k)} \hat{P}_k |\Psi\rangle \quad (2.2.4)$$

となる。すなわち測定後の状態は固有値 α_k を持つ、 \hat{A} の固有状態となる。

*1 後で説明するが応答関数は同じ状態に対して多数回の測定を行わずとも測定できる [13]。

ここまで状態が純粋状態で与えられるものとして説明したが、もちろん混合状態

$$\hat{\rho} = \sum_i q_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (2.2.5)$$

を用意した場合も、射影測定は可能である。測定結果 α_k を得る確率は

$$P(k) = \text{Tr} \left[\hat{P}_k \hat{\rho} \right] \quad (2.2.6)$$

であり、測定後の状態は

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{P}_k \hat{\rho} \hat{P}_k}{P(k)} \quad (2.2.7)$$

となる。

2.2.2 一般の間接測定

誤差のある測定を考えるため、一般的な間接測定について説明する。ここで間接測定とは、被測定系（システム）と測定系（プローブ）を相互作用させ、プローブ系に対して射影測定することを意味する。こういった測定を考えることで、測定後の状態が物理量の固有状態とは限らないような一般の測定について議論することができる。

システムの初期状態を

$$\hat{\rho}_S = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (2.2.8)$$

とする。また

$$\hat{\rho}_P = \sum_k q_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k|, \quad (2.2.9)$$

で与えられるプローブを用意する。全系の初期状態は両者の直積

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \quad (2.2.10)$$

にとる。このとき、システムとプローブはエンタングルしていないのでプローブに対する射影測定を行っても、システムの情報を得ることはできない。

次にシステムとプローブを τ 秒間だけ相互作用させる。相互作用後の全系の状態は、全系に作用するユニタリ演算子 $\hat{U}(\tau)$ により

$$\hat{\rho}(\tau) = \hat{U}(\tau) \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \hat{U}^\dagger(\tau) \quad (2.2.11)$$

と書ける。このプロセスにより、システムとプローブがエンタングルするため、プローブの射影測定結果からシステムの情報を取り出すことが可能になる。なおユニタリ演算子の引数 τ は省略することもあるが、 τ を変化させることにより測定誤差や反作用を調節するモデルを考察することもあるため、ここでは明記しておいた。

次に全系の物理量 \hat{R} に対して射影測定を行うことを考える。ここで \hat{R} を

$$\hat{R} = \sum_k r_k \hat{P}_k^R \quad (2.2.12)$$

とスペクトル分解しておく. r_k は固有値 ($k \neq l$ ならば $r_k \neq r_l$ とする), \hat{P}_k^R は r_k に対応する固有空間への射影演算子である. このとき測定結果 k が得られる確率 $P(k)$, 測定後の全系の状態 $\hat{\rho}'_k$ は射影仮説より

$$P(k) = \text{Tr} \left[\hat{P}_k^R \hat{U}(\tau) \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \hat{U}^\dagger(\tau) \right] \quad (2.2.13)$$

$$\hat{\rho}'_k = \frac{1}{P(k)} \hat{P}_k^R \hat{U}(\tau) \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \hat{U}^\dagger(\tau) \hat{P}_k^R \quad (2.2.14)$$

となる. ここで全系がシステムとプローブの複合系であることから対角和 Tr はシステム基底に関する対角和 Tr_S とプローブ基底に関する対角和 Tr_P を用いて

$$\text{Tr}[\cdot] = \text{Tr}_S \text{Tr}_P[\cdot] \quad (2.2.15)$$

と書ける. 測定後のシステムの状態 $\hat{\rho}'_{S,k}$ は式 (2.2.14) に Tr_P を作用させることで得られ, その表式は次の通りである.

$$\hat{\rho}'_{S,k} = \frac{1}{P(k)} \sum_{l,m} q_l \langle \Psi_m | \hat{P}_k^R \hat{U}(\tau) | \Psi_l \rangle \hat{\rho}_S \langle \Psi_l | \hat{U}^\dagger(\tau) \hat{P}_k^R | \Psi_m \rangle \quad (2.2.16)$$

この表式はシステムに作用するクラウド演算子

$$\hat{f}_{k,(l,m)} \equiv \sqrt{q_l} \langle \Psi_m | \hat{P}_k^R \hat{U}(\tau) | \Psi_l \rangle \quad (2.2.17)$$

を定義することで

$$\hat{\rho}'_{S,k} = \frac{1}{P(k)} \sum_{l,m} \hat{f}_{k,(l,m)} \hat{\rho} \hat{f}_{k,(l,m)}^\dagger \quad (2.2.18)$$

と書ける. これは全系に対する測定がシステムに対してどのように作用するかを表しており, クラウド表現と呼ばれている. 測定結果 k について平均をとった後の状態

$$\hat{\rho}'_S = \sum_k P(k) \hat{\rho}'_{S,k} \quad (2.2.19)$$

$$= \sum_{k,l,m} \hat{f}_{k,(l,m)} \hat{\rho} \hat{f}_{k,(l,m)}^\dagger \quad (2.2.20)$$

もよく議論される.

$P(k)$ の表式もプローブに対する対角和を実行することで

$$P(k) = \text{Tr}_S \left[\sum_{l,m} \hat{f}_{k,(l,m)}^\dagger \hat{f}_{k,(l,m)} \hat{\rho} \right] \quad (2.2.21)$$

と書ける. これは POVM \hat{E}_k を

$$\hat{E}_k = \sum_{l,m} \hat{f}_{k,(l,m)}^\dagger \hat{f}_{k,(l,m)} \quad (2.2.22)$$

と定義することで

$$P(k) = \text{Tr}_S \left[\hat{E}_k \hat{\rho} \right] \quad (2.2.23)$$

と書くことができる. クラウド演算子は測定確率も測定後の状態変化も記述できるのに対して, POVM は測定確率は記述できるものの測定後の状態変化は記述できないことには注意が必要である.

2.2.3 測定誤差

システム上の相加物理量

$$\hat{A} = \sum_k \alpha_k \hat{P}_k \quad (2.2.24)$$

の測定を考える。ただし $k \neq l$ なら $\alpha_k \neq \alpha_l$ とする。このとき前小節で説明した間接測定結果の期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{means}} = \sum_k r_k P(k) = \text{Tr} \left[\hat{U}^\dagger \hat{R} \hat{U} \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \right] \quad (2.2.25)$$

である。ここで

$$\hat{E} = \sum_k r_k \hat{E}_k = \text{Tr}_P \left[\hat{U}^\dagger \hat{R} \hat{U} \hat{\rho}_P \right] \quad (2.2.26)$$

を導入すると

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{means}} = \text{Tr}_S \left[\hat{E} \hat{\rho}_S \right] \quad (2.2.27)$$

とも書ける。測定に誤差がある場合、間接測定結果 $\langle \hat{A} \rangle_{\text{means}}$ は真の平衡期待値

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr}_S \left[\hat{A} \hat{\rho}_S \right] \quad (2.2.28)$$

とは異なりうる。また間接測定の結果の分散は

$$\begin{aligned} \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle_{\text{means}} &= \sum_k r_k^2 P(k) - \left(\sum_k r_k P(k) \right)^2 \\ &= \text{Tr}_S \left[\hat{U}^\dagger \hat{R}^2 \hat{U} \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \right] - \left(\text{Tr}_S \left[\hat{U}^\dagger \hat{R} \hat{U} \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \right] \right)^2 \end{aligned} \quad (2.2.29)$$

であり、この量も平衡状態における真の分散

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr}_S \left[\hat{A}^2 \hat{\rho}_S \right] - \left(\text{Tr}_S \left[\hat{A} \hat{\rho}_S \right] \right)^2 \quad (2.2.30)$$

とは異なりうる。つまり、測定結果の期待値と真の期待値の差、測定結果の分散と真の分散の差は測定誤差の尺度を与える量になっている。

ここで次の誤差演算子を導入する。

$$\hat{N}_A = \hat{U}^\dagger \hat{R} \hat{U} - \hat{A} \quad (2.2.31)$$

この演算子の期待値が 0 の場合、

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{means}} = \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} \quad (2.2.32)$$

が成立する。このとき測定は不偏性条件を満たすという。また測定が不偏性を満たすための必要十分条件は、測定誤差演算子とプローブの状態の積をプローブに対して和を取った演算子

$$\hat{n}_A = \text{Tr}_P \left[\hat{N}_A \hat{\rho}_P \right] = \hat{E} - \hat{A} \quad (2.2.33)$$

が

$$\hat{n}_A = 0 \quad (2.2.34)$$

になることだと知られている。ここで間接測定結果の分散を不偏性条件の下で変形すると

$$\begin{aligned} \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle_{\text{means}} &= \sum_k r_k^2 P(k) - \left(\sum_k r_k P(k) \right)^2 \\ &= \text{Tr} \left[\left(\hat{N}_A + \hat{A} \right)^2 \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \right] - \left(\text{Tr} \left[\left(\hat{N}_A + \hat{A} \right) \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \right] \right)^2 \\ &= \text{Tr}_S \left[\hat{A}^2 \hat{\rho}_S \right] + \text{Tr}_S \left[\left(\hat{n}_A \hat{A} + \hat{A} \hat{n}_A \right) \hat{\rho}_S \right] \\ &\quad + \text{Tr} \left[\hat{N}_A^2 \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_P \right] - \left(\text{Tr}_S \left[\hat{n}_A \hat{\rho}_S \right] + \text{Tr}_S \left[\hat{A} \hat{\rho}_S \right] \right)^2 \\ &= \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle_{\text{eq}} + \langle \hat{N}_A^2 \rangle_{\text{eq}} \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

が得られる。つまり、測定結果の分散と真の分散との差が \hat{N}_A^2 の期待値で与えられるのである。このように \hat{N}_A は測定誤差に関する情報を持っていることがわかる。よって、 \hat{A} の測定誤差 δA_{err} を

$$\delta A_{\text{err}} = \sqrt{\langle \hat{N}_A^2 \rangle_{\text{eq}}} \quad (2.2.36)$$

で定義する。この値が0になるための必要十分条件は $r_k = \alpha_k$ かつ $\hat{E}_k = \hat{P}_k$, つまり測定が誤差のない測定であることである。測定誤差を実際に計算する際は、

$$\begin{aligned} \langle \hat{N}_A^2 \rangle_{\text{eq}} &= \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle_{\text{means}} - \langle \Delta \hat{A}^2 \rangle_{\text{eq}} \\ &= \sum_k r_k^2 P(k) - \left(\sum_k r_k P(k) \right)^2 - \text{Tr}_S \left[\hat{A}^2 \hat{\rho}_S \right] + \left(\text{Tr}_S \left[\hat{A} \hat{\rho}_S \right] \right)^2 \end{aligned} \quad (2.2.37)$$

を用いると便利である。

2.2.4 測定の反作用

システムとプローブは相互作用によりエンタングルしているので、間接測定を行ったとしても、その反作用によりシステムの状態が変化してしまう。では \hat{A} を測定した場合の測定の反作用はどのように定量化できるのだろうか？反作用を特徴づける指標としては、測定の前後における物理量 \hat{B} の期待値の変化の二乗平均の平方根 ΔB_{av} , 測定後の状態におけるシステムの物理量 \hat{B} の分散の平均の平方根 ΔB_{var} *2

$$\Delta B_{\text{av}} = \sqrt{\sum_k P(k) \left(\text{Tr} \left[\hat{B} \hat{\rho}'_{S,k} \right] - \text{Tr} \left[\hat{B} \hat{\rho}_S \right] \right)^2} \quad (2.2.38)$$

$$\Delta B_{\text{var}} = \sqrt{\sum_k P(k) \left(\text{Tr} \left[\hat{B}^2 \hat{\rho}'_{S,k} \right] - \left(\text{Tr} \left[\hat{B} \hat{\rho}'_{S,k} \right] \right)^2 \right)} \quad (2.2.39)$$

が考えられる。本論文では [64, 65] に習い、測定による反作用・擾乱といったとき場合には式 (2.2.38), (2.2.39) を指すものとする。

*2 分散の変化でないことに注意。

参考文献 [47] では反作用演算子 $\hat{D}_B = \hat{U}^\dagger \hat{B} \hat{U} - \hat{B}$ を定義し、反作用の大きさを $\langle \hat{D}_B^2 \rangle$ と定義している。任意の $\hat{\rho}$ に対して $\langle \hat{D}_B \rangle = 0$ が成立することを反作用に対する不偏性条件と呼び、この条件が成立する場合は

$$\langle \hat{U}^\dagger \Delta \hat{B}^2 \hat{U} \rangle_{\text{eq}} = \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle_{\text{eq}} + \langle \hat{D}_B^2 \rangle_{\text{eq}} \quad (2.2.40)$$

が成立することを示すことができる。左辺は測定後の \hat{B} のゆらぎであり ΔB_{var} に一致する。そして右辺第一項は測定前の \hat{B} のゆらぎなので、その差 $\langle \hat{D}_B^2 \rangle_{\text{eq}}$ が測定の反作用により加わったゆらぎである。このように $\langle \hat{D}_B^2 \rangle_{\text{eq}}$ は測定による分散の変化を表すので、 ΔB_{var} よりも擾乱の定義としては適切に見えるが、本研究では FDT の破れを議論する際に有用となる ΔB_{var} を擾乱の定義とする。

2.3 準古典測定により得られる線形応答関数と平衡ゆらぎ

本節ではゆらぎを測定するための理想的な測定とはどのような測定かについて考察し、量子測定理論を用いてその測定（準古典測定）の定式化を行う。そしてその理想的な測定により得られるゆらぎや線形応答関数がどのような関数で与えられるのかについて説明する。

2.3.1 ゆらぎを測定するための理想的な測定とはどのような測定か

マクロ系のゆらぎ $\Xi_{ba}(t)$ は次のような測定プロセスにより得られる。

1. 粒子数 N のマクロな平衡状態を用意
2. 初期状態において相加物理量 $\hat{A} = \hat{a}\sqrt{N}$ を測定
3. \hat{A} を測定後の状態が系の平衡ハミルトニアン \hat{H}_{eq} により t 秒間時間発展
4. 相加物理量 $\hat{B} = \hat{b}\sqrt{N}$ (\hat{A} と同じでも良い) を測定
5. \hat{B} の測定後の状態は捨てて 1 に戻る

このプロセスを見るとわかるように、ゆらぎを測定するためには測定後の状態をもう一度測るという操作が避けられない。そして前節で説明したように、測定を行うとその反作用により状態が変化してしまうので、反作用の大きさによりゆらぎの測定結果は変わってしまう [51]。古くは量子光学の分野において、光子を吸収する測定を行った場合は正規順序積の相関関数 [49] が、Quantum counter を使った場合は非正規順序積の相関関数 [50] が得られることが知られていた。しかし、「測定器により結果が変わる」では FDT の成否について議論しようがない。FDT の成否について議論するためには、何か自然で理想的な測定のクラスを定義し、その測定により得られるゆらぎの結果がどのようなようになるのかという問題設定を行う必要がある。

ではゆらぎを測定する際、どのような測定器を使うのが良いのだろうか？ 先行研究 [64, 65] の筆者らは「ゆらぎを測るのだからできるだけ系の状態を乱さないように測定するのが自然だ、取り除くことができる反作用は全て取り除いた測定を行うべきだ」と考えた。これは非常にもっともらしい考え方であろう。そういった測定を定式化する際にポイントになるのは、測定誤差と測定の反作用の間に不確定性関係が成立するということである。もし、 \hat{A} の測定を正確にしすぎてしまうと、つまり $\delta A_{\text{err}} \ll 1$ の測定器を使ってしまうと、不確定性関係から測定の反作用が非常に大きくなってしまふ [44–48]。このとき測定後の状態は元の平衡状態とはかけ離れた状態になってしまうため、このような測定により得られるゆらぎを平衡状態のゆらぎとみなすことはできない。この事実から明らかのように、ゆらぎを測定するという観点から考えると、単に測定誤差の小さい測定をすればよいという単純な問題ではなくなってしまうのである。しかし、系を乱さないようにしたいからと言って、測定誤差を大きくしすぎてしまうのももちろん問題である。相加物理量 \hat{A} は $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ のゆらぎ δA_{eq}

を持っているため [85], 測定誤差はそのゆらぎ程度には小さくなければならない. そこで先行研究 [64, 65] では, ゆらぎを測定することを目的とした場合の理想的な \hat{A} の測定は次の条件を満たすべきであると述べられている.

1. 測定誤差は小さな正の整数 ϵ に対して $\delta A_{\text{err}} = \epsilon \delta A_{\text{eq}} = \mathcal{O}(\sqrt{N})$ *³
2. 測定の反作用は測定誤差 δA_{err} から決まる最小の値 (最小擾乱測定)

また, これらの他にも測定結果の期待値として平衡期待値が得られること (不偏性条件) など, 自然な測定であるための条件を満たすようにしてゆらぎを測定するための理想的測定が定義された (より詳しい定義は付録 A 及び原論文 [64, 65] を参照). その測定は, 「反作用のない理想的な古典測定を量子論の範囲内で可能な限り模倣した測定」と呼べるものになっていることから準古典測定という名前がつけられている [64, 65]. 以降, この準古典測定により得られる平衡ゆらぎと線形応答関数がどのような相関関数で与えられるのかについて説明する.

2.3.2 準古典測定の反作用と準古典測定により得られる平衡ゆらぎ

準古典測定により得られる平衡ゆらぎと線形応答関数がどのような相関関数で与えられるのかについて理解するために, まずは準古典測定の反作用についてももう少し詳しく理解しておく必要がある. \hat{A} の測定を行い, A_{\bullet} を得たとする. 以降, この測定直後の状態における物理量の期待値を $\langle \cdot \rangle_{A_{\bullet}}$ と書くことにする. すると系がまともなマクロ系であり測定が準古典測定であるかぎり, 次の関係式を満たすことが示されている [64, 65].

$$\langle \Delta \hat{A} \rangle_{A_{\bullet}} \equiv \langle \hat{A} \rangle_{A_{\bullet}} - \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} = A_{\bullet} - \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (2.3.1)$$

$$\sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_{A_{\bullet}} - \langle \hat{A} \rangle_{A_{\bullet}}^2} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (2.3.2)$$

この式を言葉で説明するならば, 測定後の状態と測定前の状態における \hat{A} の期待値変化, 測定後の状態における \hat{A} のゆらぎ, の両方が \hat{A} がもともと持っているゆらぎ $\delta A_{\text{eq}} = \mathcal{O}(\sqrt{N})$ 程度になっているということである. さらに \hat{A} に限らない一般の相加物理量 \hat{B} に対しても, 次の関係式が成立することが示されている [64, 65].

$$\langle \Delta \hat{B} \rangle_{A_{\bullet}} \equiv \langle \hat{B} \rangle_{A_{\bullet}} - \langle \hat{B} \rangle_{\text{eq}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (2.3.3)$$

$$\sqrt{\langle \hat{B}^2 \rangle_{A_{\bullet}} - \langle \hat{B} \rangle_{A_{\bullet}}^2} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (2.3.4)$$

測定後の状態と測定前の状態における \hat{B} の期待値変化, 測定後の状態における \hat{B} のゆらぎの両者も, \hat{B} がもともと持っているゆらぎ $\delta B_{\text{eq}} = \mathcal{O}(\sqrt{N})$ 程度になっているのである. これらの結果は, 系がまともなマクロ系で測定が準古典測定である限り, 測定前の状態と測定後の状態はマクロに見ると全く区別できない状態になっていることを意味している. この結果は, 準古典測定を導入するモチベーションとなった「ゆらぎを測るのだからできるだけ系の状態を乱さないような測定するのが自然だ」という考え方を満たすものになっている. また式 (2.3.1), (2.3.3) から

$$\Delta A_{\text{av}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}), \Delta B_{\text{av}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (2.3.5)$$

が, 式 (2.3.2), (2.3.4) から

$$\Delta A_{\text{var}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}), \Delta B_{\text{var}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (2.3.6)$$

*³ 実は ϵ は $\mathcal{O}(1)$ であればよいことが示されている.

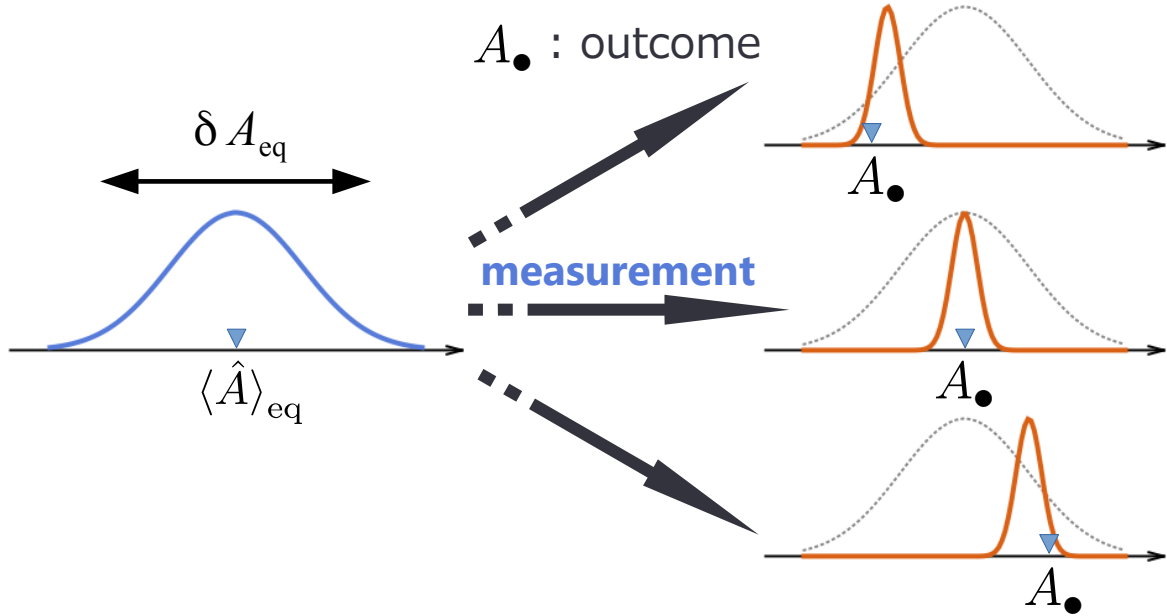


図 2.1 準古典測定のイメージ図.

が得られる. つまり, 前節で説明した意味で, 準古典測定の擾乱は $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ になっていると言える [64, 65].

では準古典測定により得られるゆらぎ $\Xi_{ba}(t)$ はどのような関数で与えられるのだろうか? この点に関して次の関係式が証明されている [64, 65].

$$\Xi_{ba}(t) = \frac{1}{N} \overline{\langle \Delta \hat{A} \rangle_{A_\bullet} \langle \Delta \hat{B}(t) \rangle_{A_\bullet}} = \left\langle \frac{1}{2} \{ \Delta \hat{a}, \Delta \hat{b}(t) \} \right\rangle_{\text{eq}} \quad (2.3.7)$$

ここでオーバーラインは \hat{A} の測定結果 A_\bullet に関する平均を表している. この結果は測定が準古典測定である限り, マクロ系のゆらぎは対称化積相関で与えられることを意味している. 測定の詳細に限らず, このような相関関数が得られるというのは非常に驚くべき結果である.

2.3.3 準古典測定により得られる線形応答関数と FDT の破れ

線形応答関数 $\phi_{ba}(t)$ は印加した外力 $F(t)$ に対する \hat{B} の応答 $\langle \hat{B}(t) \rangle - \langle \hat{B} \rangle_{\text{eq}}$ を測定することにより得られる. 実はこういった物理量 (期待値) は, 状態を用意しては測定するという方法を繰り返せば得られるため, 測定後の状態を再度測定する必要は無い. つまり, 線形応答関数は測定誤差 δB_{err} とは無関係に決定できるのである [13]. この事実は測定誤差の影響を避けられないゆらぎとは本質的に異なっている. しかし, 実際の実験では連続測定が行われることが多いため, 準古典測定を繰り返した場合にどのような線形応答関数が得られるのかを議論しておくことは重要であろう. この問題を考察するために重要となるのは, 式 (2.3.1)-(2.3.4) で示したように, 準古典測定の反作用が $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ であるということである. つまり, $\mathcal{O}(N)$ の期待値, $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ のゆらぎを持つ \hat{B} の測定しか行わない限り, 測定の反作用は測定結果に影響を及ぼさないのである*4. よって, 連

*4 これはゆらぎの測定と対照的である. ゆらぎを得るためには $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ の大きさを持つ $\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}$ の測定が必要だったため, 測定の反作用が測定結果に大きな影響を及ぼしていたのである.

続した準古典測定により得られる線形応答関数は、状態を用意しては測るということを繰り返した場合に得られる線形応答関数と一致するのである。そして、状態を用意しては測るということを繰り返すことにより得られる線形応答関数というのは、測定の反作用を考慮せずに導かれた Kubo 公式 (2.1.11) に一致する。したがって、準古典測定により得られる線形応答関数 $\phi_{ba}(t)$ は逆温度 β とカノニカル相関の積で与えられる。

以上により準古典測定により得られるマクロ系の線形応答関数は逆温度とカノニカル相関の積、平衡ゆらぎは対称化積相関になることがわかった。つまり、カノニカル相関は自然な測定 (準古典測定) により得られる平衡ゆらぎではなかったのである。そして、カノニカル相関と対称化積相関は一般には異なることから、量子系では FDT は破れ得るということもわかった [64, 65]。この破れは古くから研究されている非平衡効果による FDT の破れとは異なり、量子効果により生じるものであることには注意が必要である。破れの起源が量子効果であることは、古典極限をとると FDT が回復することからも簡単に確認できる。次節以降ではこの FDT の破れに関して更に詳しい議論を進める。

2.4 FDT の破れ

本節では線形応答関数と平衡ゆらぎを周波数表示で表し、FDT がどのように破れるのかについてより詳しい説明を行う。

2.4.1 スペクトル強度の定義

周波数表示で FDT を議論するため、線形応答関数のフーリエ変換 (複素アドミッタンス)

$$\chi_{ba}(\omega) = \int_0^{\infty} \phi_{ba}(t) e^{i\omega t} dt \quad (2.4.1)$$

を導入する。周波数空間で FDT が成立するというのは

$$\text{複素アドミッタンス} = \beta \times \text{ゆらぎのスペクトル強度} \quad (2.4.2)$$

が成り立つという意味である。ここで複素アドミッタンスの定義式において積分区間の下限が 0 になっていることは重要である。これは応答関数に因果律によるステップ関数がついているためである。

Kubo の原論文 [13] にもあるように、複素アドミッタンスと $\Xi_{ba}(t)$ のフーリエ変換

$$\tilde{S}_{ba}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \Xi_{ba}(t) e^{i\omega t} dt \quad (2.4.3)$$

の比較がしばしば行われる。しかし、 $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ をゆらぎのスペクトル強度の定義として採用すると、周波数空間では古典極限でも FDT が破れてしまう [64, 65]。こういった本質的でない破れは考察対象から除外し、古典極限では FDT が成立するような定義を採用するべきである。そこで $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ ではなく、 $\Xi_{BA}(t)$ に因果律を課してからフーリエ変換した

$$S_{ba}(\omega) = \int_0^{\infty} \Xi_{ba}(t) e^{i\omega t} dt \quad (2.4.4)$$

をスペクトル強度の定義として採用する。これは、フーリエ変換する前の関数が $t > 0$ の領域で一致しているかどうかを見ることに相当する。

2.4.2 時間反転対称性と対称・反対称成分

以降の議論の見通しを良くするため, $\chi_{ba}(\omega), S_{ba}(\omega), \tilde{S}_{ba}(\omega)$ の対称成分 (+) と反対称成分 (-)

$$\chi_{ba}^{\pm}(\omega) = \frac{\chi_{ba}(\omega) \pm \chi_{ab}(\omega)}{2}, S_{ba}^{\pm}(\omega) = \frac{S_{ba}(\omega) \pm S_{ab}(\omega)}{2}, \tilde{S}_{ba}^{\pm}(\omega) = \frac{\tilde{S}_{ba}(\omega) \pm \tilde{S}_{ab}(\omega)}{2} \quad (2.4.5)$$

を導入する. 対称成分と反対称成分のどちらかは, 系が時間反転対称性を有している場合には 0 になる. これは時間反転対称な系では相反定理

$$\chi_{ba}(\omega) = \epsilon_b \epsilon_a \chi_{ab}(\omega), S_{ba}(\omega) = \epsilon_b \epsilon_a S_{ab}(\omega), \tilde{S}_{ba}(\omega) = \epsilon_b \epsilon_a \tilde{S}_{ab}(\omega) \quad (2.4.6)$$

が成立することが原因である [15]. ここで $\epsilon_{a(b)}$ は時間反転演算子 $\hat{\mathcal{K}}$ に対する \hat{a}, \hat{b} の変換性

$$\hat{\mathcal{K}}\hat{a}\hat{\mathcal{K}}^{-1} = \epsilon_a \hat{a}, \hat{\mathcal{K}}\hat{b}\hat{\mathcal{K}}^{-1} = \epsilon_b \hat{b}, \quad (2.4.7)$$

を定めるものであり, 演算子毎にその値が決まっている. 例えば, 電流密度演算子 \hat{j} の場合には $\epsilon_j = -1$ となる. 外部磁場や自発磁化などにより時間反転対称性が破れている場合には, 相反定理が成立しなくなるため, 対称成分と反対称成分の両方が同時に非ゼロの値を取ることができる. この性質は 2.5 節で説明する FDT の非自明な破れが生じる条件と密接に関係している [64–66].

2.4.3 相関関数の性質

本小節では FDT の破れを議論する際に必要となる相関関数の性質 [15] をまとめる. まずクラマースクローニツヒの関係式

$$\text{Re}\chi_{ba}^{\pm}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \text{Im}\chi_{ba}^{\pm}(\omega') \quad (2.4.8)$$

$$\text{Im}\chi_{ba}^{\pm}(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \text{Re}\chi_{ba}^{\pm}(\omega') \quad (2.4.9)$$

は本論文で繰り返し登場する非常に有用な関係式である. ここで \mathcal{P} は主値を表す. この関係式は複素アドミタンス特有の性質ではなく因果律の帰結であるため, $S_{ba}(\omega)$ に対しても成立する.

$$\text{Re}S_{ba}^{\pm}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \text{Im}S_{ba}^{\pm}(\omega') \quad (2.4.10)$$

$$\text{Im}S_{ba}^{\pm}(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \text{Re}S_{ba}^{\pm}(\omega') \quad (2.4.11)$$

もちろん因果律と無関係な $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ に対しては成立しない.

巨視系においては対称化積相関が理想古典測定を不確定性原理の範囲内で可能な限り模倣した測定により得られるゆらぎになっている. このことは近年の研究 [64, 65] まで明らかにされていなかったが, 久保の原論

文 [13] において $\chi_{ba}(\omega)$ と $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ の比較自体は行われており、以下の関係式が導かれている。

$$\operatorname{Re}\chi_{ba}^+(\omega) = \frac{1}{2I_\beta(\omega)}\beta\operatorname{Re}\tilde{S}_{ba}^+(\omega) \quad (2.4.12)$$

$$\operatorname{Im}\chi_{ba}^+(\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \frac{\beta}{I_\beta(\omega')} \operatorname{Re}\tilde{S}_{ba}^+(\omega') \quad (2.4.13)$$

$$\operatorname{Re}\chi_{ba}^-(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \frac{\beta}{I_\beta(\omega')} \operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}^-(\omega') \quad (2.4.14)$$

$$\operatorname{Im}\chi_{ba}^-(\omega) = \frac{1}{2I_\beta(\omega)}\beta\operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}^-(\omega) \quad (2.4.15)$$

ここで

$$I_\beta(\omega) = \frac{\beta\hbar\omega}{2} \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \sim \begin{cases} 1 & (\beta\hbar|\omega| \ll 1) \\ \beta\hbar|\omega|/2 & (\beta\hbar|\omega| \gg 1) \end{cases} \quad (2.4.16)$$

である。この表式は $\chi_{ba}^\pm(\omega)$ と $\beta S_{ba}^\pm(\omega)$ の関係を議論する際に有用である。またこの表式から、ゆらぎのスペクトル強度を $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ として定義してしまうと、古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ でも $\chi_{ba}^\pm(\omega) \neq \beta\tilde{S}_{ba}^\pm(\omega)$ となってしまうこと、つまり古典極限でも FDT が成立しなくなってしまうことが確認できる。

ステップ関数のフーリエ変換が

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta(t)e^{i\omega t} dt = \pi\delta(\omega) + i\frac{\mathcal{P}}{\omega} \quad (2.4.17)$$

と書けることと、畳み込み積分のフーリエ変換の性質から

$$S_{ba}^\pm(\omega) = \frac{1}{2}\tilde{S}_{ba}^\pm(\omega) - i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \tilde{S}_{ba}^\pm(\omega') \frac{d\omega'}{2\pi} \quad (2.4.18)$$

の関係式を示すことができる。この関係式を使うと、 $S_{ba}^\pm(\omega)$ と $\tilde{S}_{ba}^\pm(\omega)$ が次のように結びつくことが示せる。

$$\operatorname{Re}S_{ba}^+(\omega) = \frac{1}{2}\operatorname{Re}\tilde{S}_{ba}^+(\omega) \quad (2.4.19)$$

$$\operatorname{Im}S_{ba}^+(\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \operatorname{Re}\tilde{S}_{ba}^+(\omega') \frac{d\omega'}{2\pi} \quad (2.4.20)$$

$$\operatorname{Re}S_{ba}^-(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}^-(\omega') \frac{d\omega'}{2\pi} \quad (2.4.21)$$

$$\operatorname{Im}S_{ba}^-(\omega) = \frac{1}{2}\operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}^-(\omega) \quad (2.4.22)$$

また、 \tilde{S}_{ba} の対称・反対称成分はそれぞれ

$$\tilde{S}_{ba}^+(\omega) = \operatorname{Re}\tilde{S}_{ba}(\omega) \quad (2.4.23)$$

$$\tilde{S}_{ba}^-(\omega) = i\operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}(\omega) \quad (2.4.24)$$

と書けることが簡単に確かめられる。これらの関係式は 2.5 節で FDT の破れの大きさを具体的に評価する際に必要となる。

2.4.4 周波数空間における FDT の破れ

前小節で説明した $\chi_{ba}(\omega)$ と $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ の関係式 (2.4.12)-(2.4.15) と, $S_{ba}(\omega)$ と $\tilde{S}_{ba}(\omega)$ の関係式 (2.4.19)-(2.4.22) を組み合わせることにより, $\chi_{ba}(\omega)$ と $S_{ba}(\omega)$ の関係式

$$\operatorname{Re}\chi_{ba}^+(\omega) = \frac{1}{I_\beta(\omega)}\beta\operatorname{Re}S_{ba}(\omega) \quad (2.4.25)$$

$$\operatorname{Im}\chi_{ba}^+(\omega) = \beta\operatorname{Im}S_{ba}^+(\omega) + \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \left[1 - \frac{1}{I_\beta(\omega')} \right] \operatorname{Re}\tilde{S}_{ba}^+(\omega') \frac{d\omega'}{2\pi} \quad (2.4.26)$$

$$\operatorname{Re}\chi_{ba}^-(\omega) = \beta\operatorname{Re}S_{ba}^-(\omega) - \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega' - \omega} \left[1 - \frac{1}{I_\beta(\omega')} \right] \operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}^-(\omega') \frac{d\omega'}{2\pi} \quad (2.4.27)$$

$$\operatorname{Im}\chi_{ba}^-(\omega) = \frac{1}{I_\beta(\omega)}\beta\operatorname{Im}S_{ba}^-(\omega) \quad (2.4.28)$$

が得られる [64, 65]. 以降, この式を用いて FDT の破れ方を考察する.

まず古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ に着目する. このとき $I_\beta \rightarrow 1$ となることから, すべての成分において $\chi_{ba} = \beta S_{ba}$ が成り立っている. つまり, 古典極限では系の詳細や着目する周波数領域に依らず, FDT が厳密に成立することが確かめられた.

次に対称実部 (2.4.25), 反対称虚部 (2.4.28) に着目する. これらの成分では, 応答関数とゆらぎが $I_\beta(\omega)$ を係数にした比例関係になっている. そして $\hbar\omega \ll k_B T$ の低周波数領域では $I_\beta(\omega) \simeq 1$ であるため, FDT が成立していることがわかる. この低周波数領域は古典領域と呼ばれることもある. 一方, $\hbar\omega \gg k_B T$ の高周波数領域では $I_\beta(\omega) \simeq \beta\hbar|\omega|/2$ なので, 着目周波数が大きいほど FDT が大きく破れていることがわかる. この領域は量子領域と呼ばれることもある. このような, 高周波数成分における FDT の量子補正は, 2.1.1 節でも少し触れたように, Nyquist, Callen, Welton などにより論じられている [3, 7]. Nyquist が FDT の導出に用いたエネルギー等分配則が, 高周波数では破れるため, FDT が破れたのだと解釈すれば, この高周波数領域における結果はそれほど驚くべき結果ではない. またこのような量子補正を受けたゆらぎは実験的にも観測されている [63].

次に対称虚部 (2.4.26), 反対称実部 (2.4.27) に着目する. これらの成分における応答関数とゆらぎの関係は, 対称実部, 反対称虚部のような比例関係ではなく, 非常に複雑な形になっており, 任意の周波数領域において非ゼロの破れが存在し得ることがわかる. ここで注目すべきなのは, ナイーブに考えると量子効果が現れそうにない, 低周波数の古典領域 $\beta\hbar\omega \ll 1$ でも FDT の破れが生じる可能性があるということである. これまで古典領域 $\beta\hbar\omega \ll 1$ における FDT の破れは観測されておらず, また Nyquist らによる議論からは決して現れない種類の破れになっていることから, 高周波数成分における FDT の破れよりもより非自明なものになっている. このような低周波数成分における FDT の破れの可能性は参考文献 [64] で初めて指摘された.

以降は任意の温度に対して低周波数領域にある $\omega = 0$ の成分に着目する. このとき応答関数とゆらぎの関係は次のように書ける.

$$\operatorname{Re}\chi_{ba}^+(0) = \beta\operatorname{Re}S_{ba}^+(0) \quad (2.4.29)$$

$$\operatorname{Re}\chi_{ba}^-(0) = \beta\operatorname{Re}S_{ba}^-(0) - \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{P}}{\omega'} \left[1 - \frac{1}{I_\beta(\omega')} \right] \operatorname{Im}\tilde{S}_{ba}^-(\omega') \frac{d\omega'}{2\pi} \quad (2.4.30)$$

ここで虚部に関する関係式を記載していないのは, 相関関数の虚部は $\omega = 0$ において必ず 0 になるためである. まず対称実部に着目すると, 系の詳細に依らず FDT が厳密に成立していることがわかる. 一方, 反対称実

部に着目すると、応答関数とゆらぎの差が有限になりえることがわかる。しかし、この非自明な FDT の破れがどのような条件で生じるのか、また破れはどれほど増大するのか、に関して参考文献 [64,65] では十分な議論がされていない。そのため、彼らの研究が発表された当初は、「FDT は古典系では成立し量子効果により破れるのだから、巨視的な系であれば破れは小さくなるのではないか」という素朴な疑問も出された。この素朴な予想に反し、FDT の破れが巨視的に増大し得ることを我々は 2018 年に示した [66]。次節ではこの巨視的な FDT の破れが生じる条件について説明する。

2.5 巨視系における FDT の非自明な破れとその条件

静的・反対称成分における FDT の破れが巨視的に増大する例は我々が 2018 年に発見した [66]。本節ではその研究内容についてまとめる。

2.5.1 流れに対する FDT の破れ

着目するゆらぎは、「変位ベクトル」 \hat{a} を時間微分した「流れベクトル」 $\dot{\hat{a}}$ のゆらぎ

$$S_{\mu\nu}(\omega) = \int_0^\infty \left\langle \frac{1}{2} \left\{ \Delta \hat{a}_\nu(0), \Delta \hat{a}_\mu(t) \right\} \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} dt \quad (2.5.1)$$

とする。上述のように同種演算子のゆらぎのみを考察対象とするため、ゆらぎの添字において a は省略し、方向成分 μ, ν のみを記載した。これと比較対象となるのは \hat{A}_ν と結合した外力 F_ν に対する \hat{A}_μ の応答関数

$$\chi_{\mu\nu}(\omega) = \int_0^\infty \left\langle \Delta \hat{a}_\nu(0); \Delta \hat{a}_\mu(t) \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} dt \quad (2.5.2)$$

である。

前節で述べたように、静的成分における FDT が非自明な破れを示す可能性があるのは反対称成分のみである。そして、そのような非自明な破れが出現するために、系が満たすべき非常に重要な条件が存在する。それは時間反転対称性が破れていなければならないという条件である。これは時間反転対称な系では $\beta S_{\mu\nu}^-(0) = \chi_{\mu\nu}^-(0) = 0$ となってしまうため^{*5}、系の詳細に依らず静的成分における FDT の破れが生じ得ないためである。おそらくこれが、低周波数領域における FDT の破れが実験的に見つからない理由の一つだと思われる。我々は静的成分における FDT の非自明な破れに興味があるので、以降考察対象とする系は外部磁場や自発磁化などにより時間反転対称性が破れているものとする。

破れの大きさを知るためには $\chi_{\mu\nu}^-(0)$ と $\beta S_{\mu\nu}^-(0)$ を計算し、その差を取れば良い。2.4.3 節で説明したクラマースクローニツヒの関係式、 $S_{\mu\nu}^-(\omega)$ と $\tilde{S}_{\mu\nu}^-(\omega)$ の関係式、そして $\tilde{S}_{\mu\nu}^-(\omega)$ と $\chi_{\mu\nu}(\omega)$ の関係式から、 $\chi_{\mu\nu}^-(0)$ と $S_{\mu\nu}^-(0)$ は次のように書くことができる。

$$\beta S_{\mu\nu}^-(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega'} I_\beta(\omega') \text{Im} \chi_{\mu\nu}^-(\omega') \quad (2.5.3)$$

$$\chi_{\mu\nu}^-(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega'} \text{Im} \chi_{\mu\nu}^-(\omega') \quad (2.5.4)$$

これらの式の比較により、非自明な FDT の破れが生じる条件を考察する。着目すべきなのはゆらぎも応答関数も $\text{Im} \chi_{\mu\nu}^-(\omega)$ の積分で書けていること、そして表式上の両者の差は $I_\beta(\omega)$ という因子の有無のみであるこ

*5 この事実は式 (2.4.6) から証明できる。

とである。 $I_\beta(\omega)$ は低周波数領域 $\hbar\omega \ll k_B T$ では 1 になる関数であった (式 (2.4.16) 参照)。そのため、もし $\text{Im}\chi_{\mu\nu}^-(\omega)$ が ω の関数として低周波数領域に局在しており、低周波数領域の外では 0 になるのであれば、FDT の破れが 0 になることが言える。逆に、 $\text{Im}\chi_{\mu\nu}^-(\omega)$ が低周波数領域の外に非 0 の値を持てば、FDT の破れが増大することも言える。これこそが FDT の非自明な破れが生じるための条件になっている。次小節以降はこの考え方を数式を用いて定式化し、より厳密な議論を行う。なおこれまでにも何度も出てきたように、 $I_\beta(\omega)$ という関数は古典極限では 1 になるため、古典極限では FDT が成立することも上記の 2 式から確認することができる。

2.5.2 FDT の破れが増大する条件

前小節で導いた式 (2.5.3), (2.5.4) を用いると、 $\chi_{\mu\nu}^-(0)$ と $\beta S_{\mu\nu}^-(0)$ の差が次のように書ける。

$$\chi_{\mu\nu}^-(0) - \beta S_{\mu\nu}^-(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{1 - I_\beta(\omega')}{\omega'} \text{Im}\chi_{\mu\nu}^-(\omega') \quad (2.5.5)$$

この量は FDT の破れの大きさの指標になっている。この表式は

$$\chi_{\mu\nu}^L(\omega) = \frac{\chi_{\mu\mu}(\omega) + \chi_{\nu\nu}(\omega)}{2} + i\chi_{\mu\nu}^-(\omega) \quad (2.5.6)$$

という量を用いて、

$$\chi_{\mu\nu}^-(0) - \beta S_{\mu\nu}^-(0) = \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{I_\beta(\omega') - 1}{\beta\omega'} \text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega') \quad (2.5.7)$$

と書き直すことができる。ここで $\chi_{\mu\nu}^L(\omega)$ の実部

$$\text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega') = \frac{\text{Re}\chi_{\mu\mu}(\omega) + \text{Re}\chi_{\nu\nu}(\omega)}{2} - \text{Im}\chi_{\mu\nu}^-(\omega) \quad (2.5.8)$$

は反時計回りに回転する外場の吸収スペクトルを表す量であり、熱力学の第二法則より任意の周波数に対して非負の値をとることが知られている [15]。また偶関数 $\text{Re}\chi_{\mu\mu}(\omega)$ と奇関数 $\text{Im}\chi_{\mu\nu}^-(\omega)$ の差になっているため、 ω が正または負の周波数領域に偏った構造を持つ関数になっている [66]。

以降は式 (2.5.7) を用いて、FDT の非自明な破れが生じる条件を定量的に明らかにする。式 (2.4.16) より式 (2.5.7) 中の $[I_\beta(\omega') - 1]/\beta\omega'$ は低周波数領域 $\beta\hbar|\omega'| \ll 1$ では 0、高周波数領域 $\beta\hbar|\omega'| \gg 1$ では $\beta\hbar \text{sgn}(\omega')/2$ で近似できることがわかる。特に絶対零度極限における FDT の破れの漸近形は

$$\chi_{\mu\nu}^-(0) - \beta S_{\mu\nu}^-(0) \sim \frac{\beta\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \text{sgn}(\omega') \text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega') \quad (2.5.9)$$

と書ける。この表式と $\text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega')$ が非負であることから、 $\hbar\omega \geq 1$ の領域における $\text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega')$ の積分値と $\beta\hbar\omega \leq -1$ の領域における $\text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega')$ の積分値の差が大きいほど FDT の破れが増大することがわかる。この条件を定式化するには $\text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega')$ を確立分布とした ω の一次モーメント [15]

$$\bar{\omega} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \omega' \text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega')}{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \text{Re}\chi_{\mu\nu}^L(\omega')} \quad (2.5.10)$$

を用いると良い。 $\bar{\omega}$ が温度に対して

$$k_B T \lesssim \hbar\bar{\omega} \quad (2.5.11)$$

の条件を満たす場合に FDT の非自明な破れが生じるのである。なお系が時間反転対称性を有している場合は、 $\chi_{\mu\nu}^-(\omega)$ は任意の ω に対して 0 となるため、 $\bar{\omega} = 0$ となり、FDT の破れは生じない。これは 2.5.1 節で述べたことと整合している。 $\bar{\omega}$ を具体的に評価するには相関関数が満たす重要な性質の 1 つであるモーメント総和則 [15]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \omega^n \text{Re} \chi_{\mu\nu}^L(\omega') = \frac{i(-i)^n}{\hbar} \left\langle \left[\dot{\hat{c}}_-, \frac{d^n \hat{c}_+}{dt^n} \right] \right\rangle_{\text{eq}} \quad (2.5.12)$$

を使うと便利である。ここで $\hat{c}_{\pm} = (\hat{a}_{\mu} \pm i\hat{a}_{\nu})/\sqrt{2}$ である。

2.5.3 二次元電子系のホール伝導度と対角ゆらぎの関係

具体例として、 z 軸方向に静磁場 B が印加された二次元電子系における電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu}(0)$ と電流ゆらぎ $S_{\mu\nu}(0)$ の評価を行う。ハミルトニアンは以下のように与えられるとする。

$$\hat{H}_{\text{eq}} = \sum_{i=1}^{N_e} \left\{ \frac{(\hat{\pi}^i)^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}^i) \right\} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} U_{\text{int}}(\hat{\mathbf{r}}^i - \hat{\mathbf{r}}^j) \quad (2.5.13)$$

ここで $\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$ は力学的運動量、 V は電子の感じるポテンシャル、 U_{int} は電子間相互作用を表す。電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu}(0)$ は、 $\hat{A}_{\nu} = \sqrt{\Omega} \hat{a}_{\nu} = -e \sum_{i=1}^{N_e} \hat{\mathbf{r}}_{\nu}^i$ と結合する電場 E_{ν} に対する電流 $\hat{A}_{\mu} = \sqrt{\Omega} \hat{a}_{\mu} = \hat{J}_{\mu}$ の応答を記述する線形応答関数であり、次のように書ける。

$$\sigma_{\mu\nu}(0) = \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} \left\langle \Delta \hat{J}_{\nu}(0); \Delta \hat{J}_{\mu}(t) \right\rangle_{\text{eq}} e^{-\eta t} dt \quad (2.5.14)$$

また電流ゆらぎは

$$\beta S_{\mu\nu}(0) = \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} \left\langle \left\{ \Delta \hat{J}_{\nu}(0), \Delta \hat{J}_{\mu}(t) \right\} \right\rangle_{\text{eq}} e^{-\eta t} dt \quad (2.5.15)$$

で与えられる。

ここで簡単のため、系が z 軸回りに $\pi/2$ 回転対称性を持っていることを仮定する。このとき

$$\sigma_{xx}(\omega) = \sigma_{yy}(\omega), \sigma_{xy}(\omega) = -\sigma_{yx}(\omega) \quad (2.5.16)$$

が成立することから、伝導度の対称・反対称成分が次のように書ける。

$$\sigma_{xx}^+(\omega) = \sigma_{xx}(\omega), \sigma_{xy}^-(\omega) = \sigma_{xy}(\omega) \quad (2.5.17)$$

つまり、 z 軸回りに $\pi/2$ 回転対称性がある場合には、前節までの対称・反対称成分に対する議論を、単なる対角・Hall 伝導度に対する議論に置き換えられるのである。

対角成分の FDT は任意のパラメタに対して成立するのであった。

$$\sigma_{xx}(0) = \beta S_{xx}(0) \quad (2.5.18)$$

一方、非対角 (Hall) 成分の FDT は非自明な破れ

$$\sigma_{xy}(0) - \beta S_{xy}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{1 - I_{\beta}(\omega')}{\omega'} \text{Im} \sigma_{xy}(\omega') \quad (2.5.19)$$

を示し得るのであった. この破れが増大する条件は

$$T \lesssim \hbar\bar{\omega} = \hbar \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \omega \text{Re}\sigma_L(\omega')}{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \text{Re}\sigma_L(\omega')} \quad (2.5.20)$$

である. ここで

$$\text{Re}\sigma_L(\omega) = \text{Re}\sigma_{xx}(\omega) - \text{Im}\sigma_{xy}(\omega) \quad (2.5.21)$$

は反時計回りに円偏光した電場の吸収スペクトルを表す. モーメント総和則 (B.1.9) から

$$\int_{-\infty}^{\infty} \text{Re}\sigma_L(\omega) \frac{d\omega}{\pi} = \frac{ne^2}{m}, \quad (2.5.22)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega \text{Re}\sigma_L(\omega) \frac{d\omega}{\pi} = \frac{ne^3 B}{m^2} \quad (2.5.23)$$

が成り立つため, ω の一次モーメントは

$$\bar{\omega} = \omega_c = \frac{eB}{m} \quad (2.5.24)$$

と求まる. したがって, FDT の破れが増大する条件は

$$k_B T \leq \hbar\omega_c \quad (2.5.25)$$

と書ける. $\omega_c = eB/m$ は $\text{Re}\sigma_L(\omega)(\text{Im}\sigma_{xy}(\omega))$ のピーク位置を与えるサイクロトロン周波数であり, 磁場が大きいほど大きくなるため, この条件式は低温強磁場を示している. また $\text{Re}\sigma_L(\omega)(\text{Im}\sigma_{xy}(\omega))$ のピーク構造の幅を Γ としたとき,

$$\Gamma \ll \hbar\omega_c \quad (2.5.26)$$

であれば, スペクトルがシャープになり, $\text{Re}\sigma_L(\omega)$ の $\omega > 0$ の領域への局在がより顕著になる. この条件は不純物による乱れが小さく, 磁場が強いことを意味している (4 章参照). 特に $T \rightarrow 0$, $\Gamma \ll \hbar\omega_c \rightarrow \infty$ の低温強磁場極限では, Hall 伝導度とゆらぎの関係が次の値に漸近する.

$$|\sigma_{xy}(0) - \beta S_{xy}(0)| \sim \left| I_{\beta}(\omega_c) \frac{e^2}{h} \nu \right| \quad (2.5.27)$$

上記の結果は電子間相互作用の有無や不純物ポテンシャルの具体系に依らない一般論になっている. この章の締めくくりとして, 具体的な系の解析結果が上記の一般論と整合していることを確認した結果についても説明しておく. 次のハミルトニアンで与えられる電子間相互作用なしの二次元電子系を仮定する.

$$\hat{H}_{\text{eq}} = \sum_{i=1}^{N_e} \left\{ \frac{(\hat{\pi}^i)^2}{2m} + \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} u \delta(\mathbf{r}^i - \mathbf{R}^j) \right\} \quad (2.5.28)$$

ここで u は不純物ポテンシャル強度, N_{imp} は不純物の数である. また不純物ポテンシャルの位置 \mathbf{R} は一様分布するランダム変数とした. この系における電気伝導度と電流ゆらぎを SCBA (4 章参照) により計算した結果を図 2.2 に示した. まず図 2.2(a) を見ると, $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ のピーク位置が ω_c 程度になっていることがわかる. これは式 (2.5.24) と整合している. また図 2.2(b) に示した σ_{xy} の計算結果は Landau 準位占有率が整数の場合 $-e^2/h$ の整数倍になっており, 先行研究により知られている結果 (5 参照) と整合している. そして図 2.2(c)

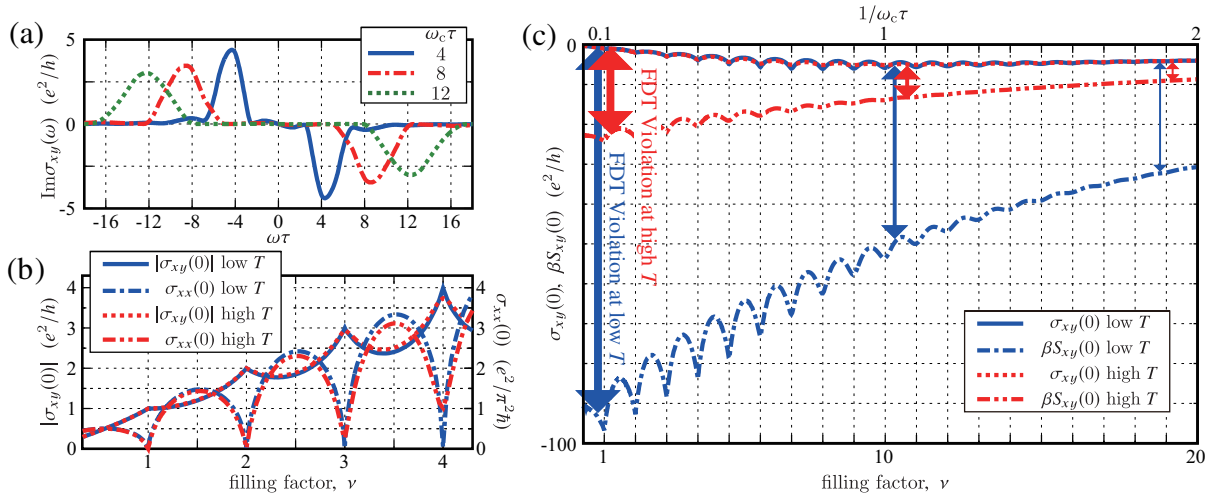


図 2.2 論文 [66] の FIG.1. (a) $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ を周波数 ω の関数として書いたもの。パラメタは $\omega_c\tau = 4$ (青), 8 (赤), 12 (緑), 温度 $T = \hbar/20\tau$, 電子数密度 $n = 10m/h\tau$. ここで τ は磁場なしの系における不純物散乱の緩和時間. (b) $|\sigma_{xy}(0)|$ と $\sigma_{xx}(0)$ を Landau 準位占有率 ν の関数として書いたもの. 電子数密度は $n = 10m/h\tau$ に固定しているため横軸の変化は $\omega_c\tau$ の変化に対応する. 青色のデータは低温 $T = \hbar/20\tau$, 赤色のデータは高温 $T = \hbar/5\tau$ の場合の結果. (c) $\sigma_{xy}(0)$ と $\beta S_{xy}(0)$ を Landau 準位占有率 ν の関数として書いたもの. パラメタ設定は (b) と同様.

の計算結果は, 低温強磁場であるほど $\sigma_{xy}(0)$ と $\beta S_{xy}(0)$ の差 (FDT の破れ) が大きくなることを示している. これは一般論において示した FDT の破れが増大する条件式 (2.5.25), (2.5.26) と整合している. また破れの大きさも一般論で示した式 (2.5.27) と整合している. このようにして具体的な系を仮定した解析結果が, 本小節前半で説明した一般論と整合していることを確認することができた.

第 3 章

巨視系における電気伝導度の性質

電流ゆらぎの性質を考察するための準備として、本章では電気伝導度の性質についてまとめる。

3.1 準備

3.1.1 設定

系は z 軸方向に静磁場 B が印加された電子間相互作用のない二次元電子系とする。この系の一電子ハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + V(\hat{r}) \quad (3.1.1)$$

$$\hat{\pi} = \hat{r} + e\mathbf{A}(\hat{r}) \quad (3.1.2)$$

ここで \hat{r} , \hat{p} , $\hat{\pi}$ は電子の位置, 運動量, 力学的運動量演算子である。電子の有効質量と電荷は $m, -e$ とした。 \mathbf{A} はベクトルポテンシャル, $V(\hat{r})$ は不純物ポテンシャルである。また系は一辺 L の正方形, 内包する電子数は N_e とする。

i 番目の電子の一電子ハミルトニアンを \hat{H}^i と書き直すと全ハミルトニアン \hat{H} は

$$\hat{H} = \sum_i^{N_e} \hat{H}^i \quad (3.1.3)$$

である。第二量子化表示では

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha} \quad (3.1.4)$$

と書ける。ここで \hat{H} の固有値, 固有ベクトルを $E_{\alpha}, |\alpha\rangle$ とした。 $\hat{c}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha}$ は α で指定される電子状態の生成・消滅演算子であり, 以下の反交換関係を満たす。

$$\{\hat{c}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha'}\} = \delta_{\alpha, \alpha'}, \{\hat{c}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{c}_{\alpha'}^{\dagger}\} = \{\hat{c}_{\alpha}, \hat{c}_{\alpha'}\} = 0 \quad (3.1.5)$$

本論文を通してこの系の平衡状態はグランドカノニカル分布

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta(\hat{H} + \mu\hat{N})}}{Z} \quad (3.1.6)$$

$$Z = e^{-\beta(\hat{H} + \mu\hat{N})} \quad (3.1.7)$$

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{N}_{\alpha}, \hat{N}_{\alpha} = \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha} \quad (3.1.8)$$

として扱う。ここで $\beta = 1/k_{\text{B}}T$ は系の逆温度, μ は電子の化学ポテンシャル, $\hat{N}_{\alpha} = \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha}$ は状態 α の電子数演算子である。物理量 \hat{A} の平衡期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr} [\hat{A} \hat{\rho}] \quad (3.1.9)$$

で与えられる。特に相互作用が無い、もしくは摂動的に扱えるほど弱い系を考える場合は、 $\hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha'}$ の平衡期待値が以下のように与えられることが重要である。

$$\langle \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha'} \rangle_{\text{eq}} = f(E_{\alpha}) \delta_{\alpha, \alpha'} \quad (3.1.10)$$

$$f_{\beta, \mu}(E_{\alpha}) = \frac{1}{e^{\beta(E_{\alpha} - \mu)} + 1} \quad (3.1.11)$$

ここで $f_{\beta, \mu}(E)$ は逆温度 β , 化学ポテンシャル μ の系における、エネルギー E の電子状態の占有数を表すフェルミ分布関数である。

3.1.2 Nakano-Kubo 公式

電気伝導度は Kubo 公式を用いて次のように書けるのであった (2.1.3 節参照)。

$$\phi_{\mu\nu}(t) = \theta(t) \beta \left\langle \frac{\hat{J}_{\nu}}{\sqrt{\Omega}}; \frac{\hat{J}_{\mu}(t)}{\sqrt{\Omega}} \right\rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.12)$$

ここで $\langle \hat{J}_{\mu} \rangle_{\text{eq}} = 0$ であり, $\Delta \hat{J}_{\mu} = \hat{J}_{\mu}$ が成立することから, Δ を省略した。FDT を考察する際, この表式は非常に重要だったが, 具体的な計算を進めるには交換関係を用いた表式

$$\phi_{\mu\nu}(t) = \theta(t) \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Omega} \left\langle \left[e \sum_i^{N_e} \hat{x}_{\nu}^i, \hat{J}_{\mu}(t) \right] \right\rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.13)$$

$$\equiv \theta(t) \tilde{\phi}_{\mu\nu}(t) \quad (3.1.14)$$

が便利である。表記の簡略化のため, $\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)$ を導入した。この表式から出発し, 周波数表示の電気伝導度

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[i\omega t] \phi_{\mu\nu}(t) \quad (3.1.15)$$

を計算したい。そのために非常に強力な公式である Nakano-Kubo 公式 [13, 15] を導出することを本小節の目的とする。

式 (3.1.14) の変形を行うには, 電流演算子 \hat{J}_{μ} の具体的表式が必要となる。我々が考察しているのは外部磁場が印加された系なので, 電子の速度演算子 $\dot{\hat{r}}$ は \hat{p}/m とは一致せず

$$\dot{\hat{r}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{r}, \hat{H}] = \frac{\hat{\pi}}{m} \quad (3.1.16)$$

と与えられることには十分に注意が必要である。これを使うと、全電流演算子 \hat{J}_μ が次のように書ける*1。

$$\hat{J}_\mu = -e \sum_i^{N_e} \frac{\hat{p}_\mu^i}{m} \quad (3.1.17)$$

式 (3.1.17) を式 (3.1.15) に代入し、部分積分を実行すると、

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{i\omega} \tilde{\phi}_{\mu\nu}(t) \exp[i\omega t] \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{\exp[i\omega t]}{i\omega} \frac{d\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)}{dt} dt \quad (3.1.18)$$

$$= -\frac{1}{i\omega} \tilde{\phi}_{\mu\nu}(0) - \int_0^\infty \frac{\exp[i\omega t]}{i\omega} \frac{d\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)}{dt} dt \quad (3.1.19)$$

$$= -\int_0^\infty \frac{\exp[i\omega t] - 1}{i\omega} \frac{d\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)}{dt} dt \quad (3.1.20)$$

が得られる。ここで $t \rightarrow \infty$ では物理量の相関が無くなり、 $\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t) \rightarrow 0$ となることを仮定した。右辺の積分中の $d\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)/dt$ は次のように書ける。

$$\frac{d\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{e^2}{\Omega} \sum_i^{N_e} \sum_j^{N_e} \frac{d}{dt} \langle [\hat{x}_\nu^i, \hat{x}_\mu^j(t)] \rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.21)$$

この表式は、考察している系の時間反転対称性から

$$\frac{d\tilde{\phi}_{\mu\nu}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{e^2}{\Omega} \sum_i^{N_e} \sum_j^{N_e} \frac{d}{dt} \langle [\hat{x}_\nu^i(-t), \hat{x}_\mu^j] \rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.22)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \frac{e^2}{\Omega} \sum_i^{N_e} \sum_j^{N_e} \langle [-\dot{\hat{x}}_\nu^i(-t), \hat{x}_\mu^j] \rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.23)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Omega} \sum_i^{N_e} \sum_j^{N_e} \langle [\hat{J}_\nu, \hat{J}_\mu(t)] \rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.24)$$

と変形できる。式 (3.1.24) を式 (3.1.20) に代入すると、

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{i\omega} [\chi_{[\mu\nu]}(\omega) - \chi_{[\mu\nu]}(0)] \quad (3.1.25)$$

$$\chi_{[\mu\nu]}(\omega) = \frac{1}{\Omega} \left(-\frac{1}{i\hbar}\right) \int_0^\infty dt \langle [\hat{J}_\mu(t), \hat{J}_\nu] \rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t - \eta t} \quad (3.1.26)$$

が得られる。この式が電気伝導度の性質理解のために非常に有用な Nakano-Kubo 公式 [13, 15] である。

*1 次元を見れば分かるように、実はこの演算子の期待値は電流期待値を表していない。この演算子の期待値を適切な距離で除したものが電流期待値となる。しかし、この演算子を定義しておくこと計算上便利であり、一般にこの演算子が電流演算子と呼ばれているため、本論文でも \hat{J}_μ を電流演算子と呼ぶことにする。

$\chi_{[\mu\nu]}(0)$ は

$$\chi_{[\mu\nu]}(0) = -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Omega} \frac{e^2}{m} \sum_i^{N_e} \sum_j^{N_e} \int_0^\infty dt \langle [\hat{x}_\mu^i(t), \hat{\pi}_\nu^j] \rangle_{\text{eq}} \quad (3.1.27)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Omega} \frac{e^2}{m} \sum_{i,j} [\langle [\hat{x}_\mu^i(\infty), \hat{\pi}_\nu^j] \rangle_{\text{eq}} - \langle [\hat{x}_\mu^i, \hat{\pi}_\nu^j] \rangle_{\text{eq}}] \quad (3.1.28)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Omega} \frac{e^2}{m} \sum_{i,j} i\hbar \delta^{ij} \delta_{\mu\nu} \quad (3.1.29)$$

$$= \frac{ne^2}{m} \delta_{\mu\nu} \quad (3.1.30)$$

と書ける. この式の導出の際, $t \rightarrow \infty$ で物理量の相関が切れること, つまり

$$[\hat{x}_\mu^i(\infty), \hat{\pi}_\nu^j] = 0 \quad (3.1.31)$$

を仮定した. 次節では Nakano-Kubo 公式を用いて電気伝導度を計算し, その性質を考察する.

3.2 各状態の電気伝導度への寄与

本節では前節で導いた Nakano-Kubo 公式を更に変形し, 電気伝導度の性質を考察する.

3.2.1 電気伝導度の表式

まず電流演算子の表式 (3.1.17) を第二量子化表示

$$\hat{J}_\mu = -e \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{\langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle}{m} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_{\alpha'} \quad (3.2.1)$$

にする. これを用いると, 式 (3.1.26) 中の交換関係が次のように変形できる.

$$\left\langle \left[\hat{J}_\mu(t), \hat{J}_\nu \right] \right\rangle_{\text{eq}} = \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\beta, \beta'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \beta | \hat{\pi}_\nu | \beta' \rangle \langle [\hat{c}_\alpha^\dagger(t) \hat{c}_{\alpha'}(t), \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_{\beta'}] \rangle_{\text{eq}} \quad (3.2.2)$$

$$= \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\beta, \beta'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \beta | \hat{\pi}_\nu | \beta' \rangle e^{i(E_\alpha - E_{\alpha'})t/\hbar} \times (f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})) \delta_{\alpha, \beta'} \delta_{\alpha', \beta} \quad (3.2.3)$$

$$= \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle e^{i(E_\alpha - E_{\alpha'})t/\hbar} (f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})) \quad (3.2.4)$$

ここで一行目から二行目への式変形には, Heisenberg 方程式より消滅演算子の時間依存性が

$$\hat{c}_\alpha(t) = e^{-iE_\alpha t/\hbar} \hat{c}_\alpha \quad (3.2.5)$$

で与えられること及び Wick の定理を用いた. 式 (3.2.4) を式 (3.1.26) に代入すると

$$\begin{aligned} \chi_{[\mu\nu]}(\omega) &= \frac{1}{\Omega} \left(-\frac{1}{i\hbar} \right) \left(\frac{e}{m} \right)^2 \\ &\times \int_0^\infty dt \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle (f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})) e^{i(\hbar\omega + i\eta + E_\alpha - E_{\alpha'})t/\hbar} \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

$$= -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\eta} \quad (3.2.7)$$

が得られる. さらに式 (3.2.7) を式 (3.1.25) に代入することで

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{1}{i\omega} \left(-\frac{1}{\Omega} \right) \left(\frac{e}{m} \right)^2 \\ &\times \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle (f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})) \frac{-\hbar\omega}{(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\eta)(E_\alpha - E_{\alpha'} + i\eta)} \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

$$= -\frac{i\hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \frac{\langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\eta} \quad (3.2.9)$$

が得られる*2. 次の二小節で説明するように, この式を用いることで伝導度の重要な性質が理解できる.

3.2.2 対角伝導度の性質

FDT の破れの研究でも着目した DC 極限 $\omega \rightarrow 0$ の対角伝導度 $\sigma_{xx} \equiv \sigma_{xx}(0)$ の性質を考察する. Dirac の恒等式

$$\frac{1}{\omega + i\eta} = \frac{\mathcal{P}}{\omega} - i\pi\delta(\omega) \quad (3.2.10)$$

を使うと, 式 (3.2.9) が次のように変形できる.

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{i\hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle \\ &\times \left\{ \frac{\mathcal{P}}{E_\alpha - E_{\alpha'}} - i\pi\delta(E_\alpha - E_{\alpha'}) \right\} \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

$$= \frac{\pi\hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle \delta(E_\alpha - E_{\alpha'}) \quad (3.2.12)$$

$$= \frac{\pi\hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \int dE \left(-\frac{\partial f_{\beta, \mu}(E)}{\partial E} \right) \left| \langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \right|^2 \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_{\alpha'}) \quad (3.2.13)$$

二行目から三行目の変形には, δ 関数により積分に寄与する E が $E \simeq E_\alpha \simeq E_{\alpha'}$ に制限されることから, 次のような書き換えが使えることを用いた.

$$\frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \rightarrow \frac{\partial f_{\beta, \mu}(E)}{\partial E} \quad (3.2.14)$$

*2 Dirac の恒等式 (3.2.10) を用いると

$$\frac{f(E_\alpha) - f(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'} + i\eta} = \mathcal{P} \frac{f(E_\alpha) - f(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} - i\pi(f(E_\alpha) - f(E_{\alpha'}))\delta(E_\alpha - E_{\alpha'})$$

が成立する. この式の実部は $E_\alpha \rightarrow E_{\alpha'}$ で発散しないため \mathcal{P} を省略できる. また虚部は $E_\alpha \rightarrow E_{\alpha'}$ で δ 関数の係数が 0 となり消える. これらを用いて式 (3.2.9) への変形において収束因子 η を省略した.

以降は簡単のため、絶対零度 $T = 0$ の場合を考察する。このとき

$$-\frac{\partial f_{\beta,\mu}(E)}{\partial E} = \delta(E - \mu) \quad (3.2.15)$$

が成立するので、 σ_{xx} は次のように書ける。

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi\hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \sum_{\alpha,\alpha'} \int dE \left| \langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \right|^2 \delta(E - \mu) \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_{\alpha'}) \quad (3.2.16)$$

この式から対角伝導度 σ_{xx} に寄与する電子状態は化学ポテンシャル上の電子状態のみだとわかる。これは対角伝導度を特徴づける非常に重要な性質の一つである。さらに、各状態の寄与は電子状態 $|\alpha\rangle$ が局在しているかどうかによって大きく異なる。このことは次のようにして理解できる。波動関数 $\langle \mathbf{r} | \alpha \rangle$ が \mathbf{r} の関数として指数関数的に局在していれば、 $\hat{\mathbf{r}}$ の行列要素が有限確定値となるため、Heisenberg 方程式を用いて

$$\frac{1}{m} \langle \alpha | \hat{\pi} | \alpha' \rangle = \langle \alpha | \dot{\hat{\mathbf{r}}} | \alpha' \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \alpha | [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] | \alpha' \rangle = \frac{1}{i\hbar} (E_\alpha - E_{\alpha'}) \langle \alpha | \hat{\mathbf{r}} | \alpha' \rangle \quad (3.2.17)$$

と変形することが許される。対角伝導度の表式 (3.2.16) は $\delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_{\alpha'})$ を含んでいることから、式 (3.2.17) の変形が可能な局在状態の対角伝導度への寄与は 0 となる。そのため、化学ポテンシャル上の状態がすべて局在状態の場合には $\sigma_{xx} = 0$ となり、系は絶縁体となることが結論付けられる。一方、 $|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle$ が共に非局在状態の場合には、熱力学極限において $\hat{\mathbf{r}}$ の行列要素の値が不定となるため、式 (3.2.17) の変形が許されない。そのため化学ポテンシャル上の非局在状態は対角伝導度 σ_{xx} に寄与し得るのである。逆に言えば、 σ_{xx} が非 0 となるには、化学ポテンシャル上に少なくとも一つの非局在状態が存在しなければならない [86-89]。

3.2.3 Hall 伝導度の性質

前小節の対角伝導度の性質に続き、本節では Hall 伝導度 $\sigma_{xy} \equiv \sigma_{xy}(0)$ の性質を考察する。簡単のため z 軸周り $\pi/2$ 回転対称性を仮定する。このとき

$$\sigma_{xy}(\omega) = -\sigma_{yx}(\omega) \quad (3.2.18)$$

が成立するため、Hall 伝導度を

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{1}{2} (\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega)) \quad (3.2.19)$$

と書き直すことができる*3。この式の右辺に式 (3.2.9) を代入し、DC 極限 $\omega \rightarrow 0$ を取ることで

$$\sigma_{xy} = \frac{\hbar}{2i\Omega} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \sum_{\alpha,\alpha'} \frac{f_{\beta,\mu}(E_\alpha) - f_{\beta,\mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \frac{\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_{\alpha'} + i\eta} \quad (3.2.20)$$

$$= \frac{\hbar}{i\Omega} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \sum_{\alpha,\alpha' (E_\alpha \neq E_{\alpha'})} f_{\beta,\mu}(E_\alpha) \frac{\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle}{(E_\alpha - E_{\alpha'})^2} \quad (3.2.21)$$

を得る。ここで $E_\alpha = E_{\alpha'}$ を満たす項が $\alpha \leftrightarrow \alpha'$ の入れ替えに対して反対称であり、 α, α' について和を取るとキャンセルすることから、分母の $i\eta$ を省略した。

*3 z 軸周り $\pi/2$ 回転対称性がない場合は Hall 伝導度の反対称成分に対して以下の議論が成り立つ。

式 (3.2.21) を

$$\sigma_{xy} = \sum_{\alpha} f_{\beta,\mu}(E_{\alpha}) C_{\alpha} \quad (3.2.22)$$

$$C_{\alpha} = \frac{\hbar e^2}{i\Omega m^2} \sum_{\alpha' (E_{\alpha} \neq E_{\alpha'})} M_{\alpha,\alpha'} \quad (3.2.23)$$

$$M_{\alpha,\alpha'} = \frac{\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle}{(E_{\alpha} - E_{\alpha'})^2} \quad (3.2.24)$$

と書き直しておくと, Hall 伝導度 σ_{xy} には化学ポテンシャル以下のすべての電子状態が寄与し得ることがわかりやすい. これは前小節で説明した σ_{xx} の性質と著しく異なっている. それぞれの状態の寄与を評価するには状態が局在しているか否かが再び重要となる. 前小節で説明したように, $|\alpha\rangle$ が局在状態の場合には

$$\frac{1}{m^2} \langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle = \langle \alpha | \dot{\hat{x}} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \dot{\hat{y}} | \alpha \rangle = \frac{1}{\hbar^2} (E_{\alpha'} - E_{\alpha})^2 \langle \alpha | \hat{x} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{y} | \alpha \rangle \quad (3.2.25)$$

の変形が許される. そのため局在状態 $|\alpha\rangle$ に対して

$$C_{\alpha} = \frac{e^2}{i\hbar\Omega} \sum_{\alpha' (E_{\alpha} \neq E_{\alpha'})} (\langle \alpha | \hat{x} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{y} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{y} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{x} | \alpha \rangle) \quad (3.2.26)$$

$$= \frac{e^2}{i\hbar\Omega} \sum_{\alpha'} (\langle \alpha | \hat{x} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{y} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{y} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{x} | \alpha \rangle) \quad (3.2.27)$$

$$= \frac{e^2}{i\hbar\Omega} \langle \alpha | [\hat{x}, \hat{y}] | \alpha \rangle = 0 \quad (3.2.28)$$

を得る. ここで一行目から二行目への変形には, $\alpha' = \alpha$ の場合を和の範囲に含めても値が不変なことを用いた. この結果は局在状態が Hall 伝導度 σ_{xy} に寄与しないことを意味している. 一方, $|\alpha\rangle$ が非局在状態の場合, 式 (3.2.25) が成立しないため, C_{α} が非 0 になり得る. 以上により, σ_{xy} には化学ポテンシャル以下の全ての非局在状態が寄与し得ることがわかった. 逆に言えば, σ_{xy} が非 0 となるためには, 化学ポテンシャル以下に少なくとも一つの非局在状態が存在しなければならない [80, 86–89].

第 4 章

一様磁場中電子の物理と伝導現象

第 III 部の内容を理解するための準備として、本章では主に文献 [86–89] を参考に、一様静磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ が印加された二次元電子系の物理についてまとめた。

4.1 古典論

まずはこの系の物理を直感的に把握するため、電子の運動を古典的に取り扱う。

4.1.1 ラグランジアンとハミルトニアン

電場 \mathbf{E} 、磁場 \mathbf{B} 中の電子が従う運動方程式は

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4.1.1)$$

と書ける。この運動方程式を与えるラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e\phi - e\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (4.1.2)$$

と与えられる。ここで $\phi(\mathbf{r})$ はスカラーポテンシャル、 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ はベクトルポテンシャルであり

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.1.3)$$

を満たす。

ラグランジアンをルジャンドル変換することによりハミルトニアンを求める。この系の正準運動量 \mathbf{p} は

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A} \quad (4.1.4)$$

だから、ハミルトニアンは

$$H = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{p}) - L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{p})) = \frac{\pi^2}{2m} - e\phi \quad (4.1.5)$$

となる。ここで力学的運動量

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A} \quad (4.1.6)$$

を導入した。式 (4.1.4) と式 (4.1.6) からわかるように、磁場中の電子の速度は \mathbf{p}/m ではなく、 $\boldsymbol{\pi}/m$ であることには注意が必要である。

4.1.2 電場 0 の場合の解

まず $E = 0$ の場合を考察する. このとき運動方程式は

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (4.1.7)$$

と書ける. この微分方程式を解くと

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}(t) \quad (4.1.8)$$

$$\boldsymbol{\rho}(t) = \rho(\sin(\omega_c(t - t_0)), -\cos(\omega_c(t - t_0))) \quad (4.1.9)$$

$$\mathbf{v}(t) = v_0(\cos(\omega_c(t - t_0)), \sin(\omega_c(t - t_0))) \quad (4.1.10)$$

が得られる. ここで \mathbf{R}, v_0, t_0 は積分定数である. この解は電子が中心座標 \mathbf{R} の周りを半径 $\rho = v_0/\omega_c$, 角速度 ω_c で反時計回りに等速円運動することを表している. この運動はサイクロトロン運動と呼ばれている. また

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \quad (4.1.11)$$

はサイクロトロン周波数である. この量は磁場中の電子の運動を考察する上で非常に重要な量であり, 本論文全体に渡って何度も登場する.

相対座標 $\boldsymbol{\rho}$ の各成分は

$$\rho_\mu(t) = -\frac{1}{\omega_c} \epsilon_{\mu\nu z} v_\nu(t) = \frac{l^2}{\hbar} \epsilon_{\mu\nu z} \pi_\nu \quad (4.1.12)$$

と書くこともできる. ここで $\epsilon_{\mu\nu\rho}$ は Levi-Civita 記号である. この書き方は, 後の量子化に便利である. ここで

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (4.1.13)$$

は磁気長と呼ばれる量であり, 量子系における量子化されたサイクロトロン半径の最小値を与える (4.2.3 節参照).

4.1.3 静電場が印加された場合の解と電気伝導度

次に, 一様電場 $\mathbf{E}_0 = (E, 0)$ が印加された場合を考える. このとき運動方程式は

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e(\mathbf{E}_0 + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4.1.14)$$

で与えられる. この微分方程式を解くと

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) + \boldsymbol{\rho}(t), \quad (4.1.15)$$

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_0 + \mathbf{v}_D(t - t_0), \quad (4.1.16)$$

$$\mathbf{v}_D = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} = \left(0, -\frac{E}{B}\right), \quad (4.1.17)$$

$$\boldsymbol{\rho}(t) = \rho(\sin(\omega_c(t - t_0)), -\cos(\omega_c(t - t_0))), \quad (4.1.18)$$

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_D + v_0(\cos(\omega_c(t - t_0)), \sin(\omega_c(t - t_0))), \quad (4.1.19)$$

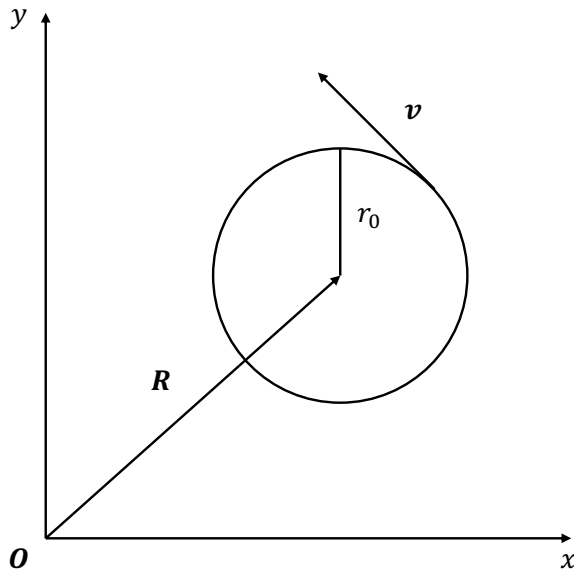


図 4.1 古典力学によるサイクロトロン運動.

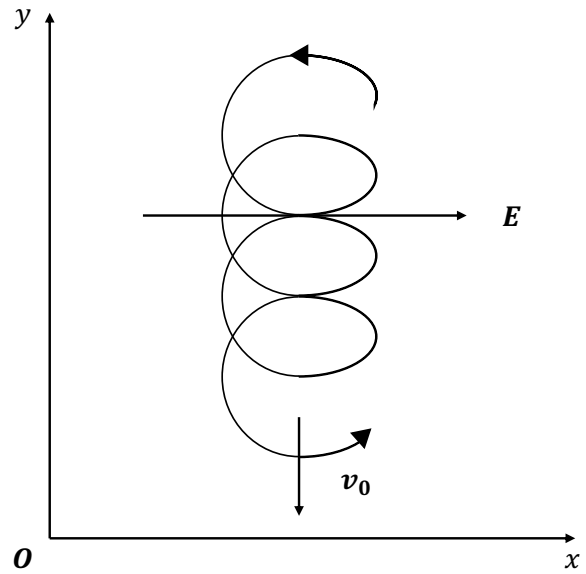


図 4.2 電磁と磁場中の電子の軌跡.

が得られる. この解は電子が中心座標 $\mathbf{R}(t)$ の周りを半径 $\rho = v_0/\omega_c$, 角速度 ω_c で反時計回りに等速円運動することを表している. 前小節で解説した電場なしの解と異なる点は, 中心座標 \mathbf{R} が速度 \mathbf{v}_D で移動するところである. ここで \mathbf{v}_D が \mathbf{E} にも \mathbf{B} にも垂直なベクトルになっていることには注意が必要である. このような電子の運動は $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ドリフトと呼ばれている.

この結果を用いると, 不純物散乱が無い場合の電気伝導度を求めることができる. 各電子は平均速度 \mathbf{v}_D で運動しているため, 電流密度は

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}_D = \left(0, en\frac{E}{B}\right), \quad (4.1.20)$$

となる. ここで電子数密度を n とした. この式を電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu}$ の定義式

$$j_\mu = \sigma_{\mu\nu}E_\nu \quad (4.1.21)$$

と比較することにより次式が得られる*1.

$$\sigma_{xx} = 0, \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{ne}{B} \quad (4.1.22)$$

「不純物がない場合は対角伝導度が 0 になる」という結果は, 後で見るように量子論でも成立する重要な結果である.

4.1.4 Drude モデルと電気伝導度

本小節では電場 \mathbf{E} , 磁場 \mathbf{B} に加えて, さらに不純物散乱の影響を考慮する. 平均して τ 秒間に一度の間隔で電子が不純物と衝突し速度を失う, というモデルを考える. τ は不純物散乱の緩和時間である. このとき, Δt

*1 この結果は平均速度を用いて得られたものだから, 後で出てくる $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ の $\omega = 0$ 成分に対応している.

秒の間の運動量変化 $\mathbf{p}(t + \Delta t) - \mathbf{p}(t)$ は平均して $-m\mathbf{v}(t)\Delta t/\tau$ となるため、このモデルにおける電子の運動方程式は

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) + m\frac{\mathbf{v}}{\tau} \quad (4.1.23)$$

で与えられる。このような運動方程式で記述されるモデルを Drude モデルと呼ぶ。

前小節までは運動方程式の解から、DC 伝導度 $\sigma_{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu}(0)$ のみを議論してきたが、Drude モデルの結果は前小節までの結果を内包しており、量子論との比較にも非常に役立つため、本小節では任意の周波数成分に対する伝導度 $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ を求め、その DC 極限として σ_{xx}, σ_{xy} を計算することにする。

式 (4.1.23) をフーリエ変換すると、 $\mathbf{v}(t)$ のフーリエ変換 $\mathbf{v}(\omega)$ と $\mathbf{E}(t)$ のフーリエ変換 $\mathbf{E}(\omega)$ の関係が得られる。そこから電流密度 $\mathbf{j}(t)$ のフーリエ変換

$$\mathbf{j}(\omega) = -en\mathbf{v}(\omega) \quad (4.1.24)$$

と $\mathbf{E}(\omega)$ の関係を計算する。その表式を電気伝導度の定義式

$$\begin{pmatrix} j_x(\omega) \\ j_y(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(\omega) & \sigma_{xy}(\omega) \\ \sigma_{yx}(\omega) & \sigma_{yy}(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x(\omega) \\ E_y(\omega) \end{pmatrix} \quad (4.1.25)$$

と比較することにより $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ を求める。式 (4.1.25) に適切なユニタリ行列を作用させ

$$\begin{pmatrix} j_x(\omega) - ij_y(\omega) \\ j_x(\omega) + ij_y(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_L(\omega) & 0 \\ 0 & \sigma_R(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x(\omega) - iE_y(\omega) \\ E_x(\omega) + iE_y(\omega) \end{pmatrix} \quad (4.1.26)$$

と伝導度の行列を対角化したときの固有値

$$\sigma_{L(R)}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) \pm i\sigma_{xy}(\omega) \quad (4.1.27)$$

は円偏光の電気伝導度と呼ばれる重要な量である。この量の実部 $\text{Re}\sigma_{L(R)}(\omega)$ は反時計回り (時計回り) に円偏光した電場の吸収スペクトルを表す。Drude モデルにおいては

$$\sigma_{L(R)}(\omega) = i\frac{ne^2}{m} \frac{1}{(\omega \mp \omega_c) + i/\tau} \quad (4.1.28)$$

となり、この解は円偏光した電場の吸収スペクトルが $\omega = \pm\omega_c$ に半値幅 $1/\tau$ の共鳴ピークを持つことを示している。これをサイクロン共鳴と呼ぶ。この現象は古典系、量子系に依らずに見られる重要な現象である。そして、この結果から Drude モデルの DC 伝導度が

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(0) = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2} \quad (4.1.29)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy}(0) = -\frac{\sigma_0(\omega_c\tau)}{1 + (\omega_c\tau)^2} \quad (4.1.30)$$

と求まる。ここで σ_0 は Drude モデルで求めた $\mathbf{B} = 0$ の場合の σ_{xx} であり

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (4.1.31)$$

と書ける。不純物を考慮したことにより、対角伝導度が非ゼロになっていること、また散乱がなくなる $\tau \rightarrow +\infty$ の極限において、前小節の結果を再現することが確認できる。

通常の実験では電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ ではなく抵抗率 $\rho_{\mu\nu}(\omega)$ を測定するため、抵抗率の表式についてもまとめておく。抵抗率は

$$\begin{pmatrix} E_x(\omega) \\ E_y(\omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{xx}(\omega) & \rho_{xy}(\omega) \\ \rho_{yx}(\omega) & \rho_{yy}(\omega) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x(\omega) \\ j_y(\omega) \end{pmatrix} \quad (4.1.32)$$

と定義される量である。式 (4.1.25), (4.1.32) を比較するとわかるように、 $\rho_{\mu\nu}$ を表す行列は $\sigma_{\mu\nu}$ を表す行列の逆行列になっている。よって、抵抗率の固有値 $\rho_{L(R)}(\omega)$ は電気伝導度の固有値 $\sigma_{L(R)}$ と

$$\rho_{L(R)}(\omega) = \rho_{xx}(\omega) \pm i\rho_{xy}(\omega) = \frac{1}{\sigma_{L(R)}} \quad (4.1.33)$$

の関係にある。この関係を用いて、DC 伝導度の結果から DC 抵抗率を計算すると

$$\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0}, \rho_{xy} = \frac{B}{ne} \quad (4.1.34)$$

が得られる。

Drude モデルは、簡単な古典論だが、弱磁場領域では実験結果と非常によく一致することが知られている。一方、強磁場領域では Drude モデルと実験結果は一致せず、強磁場における伝導現象を記述するためには量子論が不可欠だと知られている。

4.1.5 電子数密度推定

弱磁場領域では Drude モデルが実験結果とよく一致するため、その事実を用いた電子数密度推定が行われている。図 4.1.5 のような z 軸正方向に磁場 B が印加された二次元系を用意し、 x 方向に定電流源を接続して電流 I を流す。このとき x 方向に生じる電位差 V と、Hall 効果により y 方向に生じる電位差 (Hall 電圧) V_H を測定する。この測定結果から

$$\rho_{xx} = \frac{E_x}{j_x} = \frac{V/L}{I/W}, \rho_{yx} = \frac{E_y}{I} = \frac{V_H/W}{I/W} = \frac{V_H}{I} = R_H \quad (4.1.35)$$

のようにして抵抗率が得られる。ここで L, W はそれぞれ x, y 方向の電位差を測定する電極間の距離である。Hall 抵抗率 ρ_{yx} と Hall 抵抗 R_H が一致するのは二次元電子系の特有の性質である。電流密度・電場を測定するよりも、電流・電位差を測定するほうが容易なため、二次元電子系のこの特殊事情は、Hall 抵抗率の精密測定を可能にしている。Hall 抵抗率の測定結果を式 (4.1.34) に代入することにより、

$$n = \frac{B}{e\rho_{xy}} \quad (4.1.36)$$

と電子数密度 n の推定ができる。

本論文では電子電流のみを考察するが、多数キャリアが正孔の場合も存在する。電化 q , 数密度 n_q のキャリアが運ぶ電流を Drude モデルを使って計算し直し、そこからホール抵抗を計算すると

$$R_H = \frac{B}{qn_q} \quad (4.1.37)$$

が得られる。よってより一般に、 R_H の測定結果の符号と大きさから、多数キャリア判定とキャリア密度推定ができる。

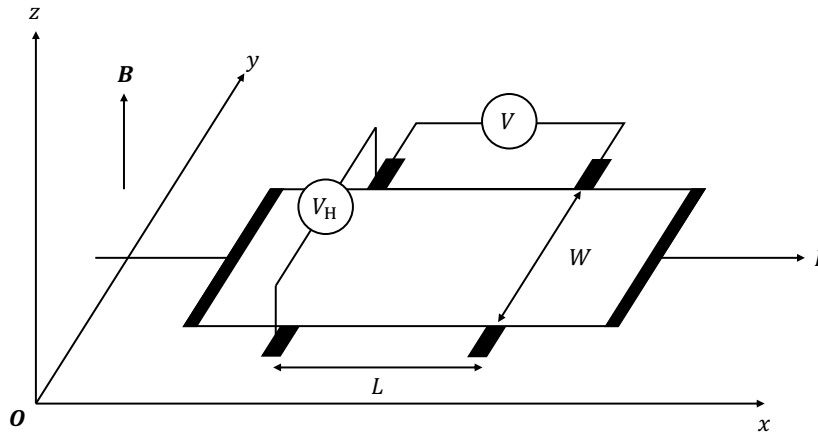


図 4.3 Hall 抵抗率, 縦抵抗率の測定で用いる設定.

4.1.6 移動度の定義とその測定法

伝導現象を議論する際, 移動度 (易動度) μ と呼ばれる量が頻出する. この量は磁場 0 の系において, 印加した電場 E と電場により加速された電子の平均速度 v の比例係数として定義される.

$$v = \mu E \quad (4.1.38)$$

つまり, 移動度は電子の流れやすさの指標となる. よって不純物密度が小さい綺麗な系の方が大きな値を取る. 実際, Drude モデルでは

$$\mu = \frac{e\tau}{m} \quad (4.1.39)$$

であり, 不純物散乱の緩和時間が長いほど, 移動度が大きくなっている. そして磁場無しの系における対角伝導度は

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{\rho_{xx}} = en\mu \quad (4.1.40)$$

と書ける. この式と前小節の手法を合わせれば移動度を推定することが可能となる. 具体的には, まず試料に磁場を印加し, 前小節の方法で電子数密度 n を推定する. 次に磁場の印加をやめ, ρ_{xx} を測定する. 得られた ρ_{xx} と n を式 (4.1.40) に代入することで

$$\mu = \frac{1}{en\rho_{xx}} \quad (4.1.41)$$

と移動度 μ が定まる.

4.2 磁場中の自由電子の量子論

前節では直感的理解を得るため古典論を用いて二次元電子系の運動を扱った. 本節では量子論を用いた取り扱いについてまとめる.

4.2.1 正準量子化

\mathbf{r}, \mathbf{p} を正準変数に選び, 古典系のハミルトニアン (4.1.5) を正準量子化することにより, 量子系のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{\pi}}^2}{2m} + e\phi(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.2.1)$$

が得られる. $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ は以下の正準交換関係を満たす.

$$[\hat{r}_\mu, \hat{p}_\nu] = i\hbar\delta_{\mu\nu}, [\hat{r}_\mu, \hat{r}_\nu] = 0, [\hat{p}_\mu, \hat{p}_\nu] = 0. \quad (4.2.2)$$

また力学的運動量演算子は,

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.2.3)$$

と与えられ, 以下の交換関係に従う.

$$[\hat{r}_\mu, \hat{\pi}_\nu] = i\hbar\delta_{\mu\nu}, [\hat{\pi}_\mu, \hat{\pi}_\nu] = -i\epsilon_{\mu\nu z} \frac{\hbar^2}{l^2}. \quad (4.2.4)$$

運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ の各成分は可換だが, 力学的運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ の各成分は非可換になっていることには注意が必要である.

4.2.2 中心座標と相対座標

4.1 節で磁場中の電子の運動を古典論で取り扱った際, 中心座標 $\mathbf{R} = (X, Y)$ と相対座標 $\boldsymbol{\rho} = (\xi, \eta)$ を導入することで系の物理を把握しやすくなったのであった. 量子論でもそれに対応する演算子を定義しておくと便利である. 式 (4.1.8), (4.1.12) を参照して, 相対座標演算子 $\hat{\rho}_\mu$, 中心座標演算子 \hat{R}_μ を

$$\hat{\rho}_\mu = \frac{1}{\omega_c} \epsilon_{\mu\nu z} \dot{\hat{r}}_\nu = \frac{l^2}{\hbar} \epsilon_{\mu\nu z} \hat{\pi}_\nu \quad (4.2.5)$$

$$\hat{R}_\mu = \hat{r}_\mu - \hat{\rho}_\mu \quad (4.2.6)$$

と定義する. これらは交換関係

$$[\hat{\rho}_\mu, \hat{\rho}_\nu] = -i\epsilon_{\mu\nu z} l^2 \quad (4.2.7)$$

$$[\hat{R}_\mu, \hat{R}_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu z} l^2 \quad (4.2.8)$$

$$[\hat{\rho}_\mu, \hat{R}_\nu] = 0 \quad (4.2.9)$$

を満たす.

4.2.3 電場 0 の場合のハミルトニアンの対角化

本小節では $\phi = 0$ の系について考察する. この系のハミルトニアンを新たに

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\boldsymbol{\pi}}^2}{2m}, \quad (4.2.10)$$

と置く。このハミルトニアンは前小節で導入した演算子を用いることで

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2ml^4} \hat{\rho}^2 \quad (4.2.11)$$

のように中心座標を含まない形で書くことができる。式 (4.2.9) より、中心座標と相対座標は可換なため、中心座標とハミルトニアンは同時対角化可能だとわかる。しかし、式 (4.2.8) より、 \hat{X} と \hat{Y} は不確定性関係

$$[\Delta X, \Delta Y] = 2\pi l^2 \quad (4.2.12)$$

を満たすため、中心座標の両成分を同時に対角化することはできない。

固有エネルギーを求めるため

$$\hat{a} = -\frac{1}{\sqrt{2}l}(\hat{\eta} + i\xi), \quad \hat{a}^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}l}(\hat{\eta} - i\xi), \quad (4.2.13)$$

を導入する。この演算子は

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (4.2.14)$$

を満たす昇降演算子になっている。昇降演算子を使うと $\hat{\rho}^2$ が

$$\hat{\rho}^2 = (2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)l^2 \quad (4.2.15)$$

と書き直せるので、 \hat{H}_0 を

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega_c \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.2.16)$$

と書き直すことができる。調和振動子の量子力学でよく学んだように、昇降演算子の性質から、 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値は 0 以上の整数なので、エネルギー固有値 E は 0 以上の整数 N で区別され

$$E_N = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (N = 0, 1, 2, \dots) \quad (4.2.17)$$

となる。この等間隔のエネルギー準位を Landau 準位と呼ぶ。これは量子化されたサイクロトロン運動のエネルギーである。 N 番目の Landau 準位を占有する電子の量子化されたサイクロトロン運動の半径は、式 (4.2.15) の期待値の二乗根をとることにより $\sqrt{2N+1}l$ 程度だとわかる。つまり、磁気長 l は最低 Landau 準位を占有する電子のサイクロトロン運動の半径 (サイクロトロン半径) である。

本小節の式変形では特に必要なかったが、 $\hat{\pi}_\mu$ を昇降演算子の線形結合で書いた表式

$$\hat{\pi}_x = -\frac{\hbar}{l^2}\hat{\eta} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{\pi}_y = \frac{\hbar}{l^2}\hat{\xi} = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}l}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (4.2.18)$$

は有用であり、以降の計算に頻出するので、ここで触れておく。

4.2.4 保存運動量と磁場中の並進移動演算子

本小節ではハミルトニアンと同時対角化可能な保存運動量についてまとめる。保存運動量の考え方はハミルトニアンと中心座標を対角化する表示の波動関数を求める際に非常に有用である。

力学的運動量の時間依存性はハイゼンベルグ方程式により

$$\dot{\hat{\pi}}_\mu = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\pi}_\mu, \hat{H}_0] = -\omega_c \epsilon_{\mu\nu z} \hat{\pi}_\nu = -\frac{\hbar}{l^2} \epsilon_{\mu\nu z} \dot{\hat{r}}_\nu \quad (4.2.19)$$

と書ける。この式から明らかなように、力学的運動量は保存量ではない。しかし、次の量は保存量になっていることがわかる。

$$\hbar\hat{K}_\mu \equiv \hat{\pi}_\mu + \frac{\hbar}{l^2}\epsilon_{\mu\nu z}\hat{r}_\nu \quad (4.2.20)$$

そこで以降は $\hbar\hat{K}$ を保存運動量と呼ぶことにする。磁場中では運動量演算子には正準運動量演算子 \hat{p}_μ 、力学的運動量演算子 $\hat{\pi}_\mu$ 、保存運動量演算子 \hat{K}_μ の三種類があることに注意しなければならない。

単純な計算により、保存運動量は次の交換関係を満たすことが確認できる。

$$[\hat{K}_\mu, \hat{K}_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu z}\frac{1}{l^2}, \quad (4.2.21)$$

$$[\hat{\pi}_\mu, \hat{K}_\nu] = 0, \quad (4.2.22)$$

$$[\hat{R}_\mu, \hat{K}_\nu] = [\hat{r}_\mu, \hat{K}_\nu] = i\delta_{\mu\nu}, \quad (4.2.23)$$

\hat{K} の各成分は非可換であり、同時固有状態は作れない。また中心座標 \hat{R} を用いると、

$$\hat{K}_\mu = \frac{1}{l^2}\epsilon_{\mu\nu z}\hat{R}_\nu \quad (4.2.24)$$

と書ける。つまり、大雑把に言えば保存運動量は中心座標の成分を入れ替え、定数倍したものになっている。

保存運動量 \hat{K} はもちろんエルミート演算子である。そこで \hat{K} を生成子とするようなユニタリ変換

$$\hat{T}(\mathbf{u}) = \exp(-i\hat{K} \cdot \mathbf{u}) \quad (4.2.25)$$

を考える。交換関係 (4.2.7), (4.2.8), (4.2.9) と Campbell-Baker-Hausdorff 公式

$$e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2!}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \frac{1}{3!}[\hat{B}, [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]] + \dots \quad (4.2.26)$$

より、

$$\hat{T}^\dagger(\mathbf{u})\hat{\rho}\hat{T}(\mathbf{u}) = \hat{\rho} \quad (4.2.27)$$

$$\hat{T}^\dagger(\mathbf{u})\hat{R}\hat{T}(\mathbf{u}) = \hat{R} + \mathbf{u} \quad (4.2.28)$$

の成立が確かめられる。この表式から、ユニタリー演算子 $\hat{T}(\mathbf{u})$ は、相対座標 $\hat{\rho}$ には変化を与えないままに、中心座標 \hat{R} を \mathbf{u} だけずらす磁場中の並進移動演算子になっていることがわかる。そしてこの関係は交換関係を用いて

$$[\hat{\rho}, \hat{T}(\mathbf{u})] = 0, [\hat{R}, \hat{T}(\mathbf{u})] = \mathbf{u}\hat{T}(\mathbf{u}) \quad (4.2.29)$$

と書くことができる。これを使うと \hat{H}_0 と \hat{X} の同時固有状態

$$\hat{H}_0|NX_0\rangle = E_N|NX_0\rangle, \hat{X}|NX_0\rangle = X_0|NX_0\rangle, \quad (4.2.30)$$

に対して、

$$\hat{H}_0\hat{T}(\Delta Xe_x)|NX_0\rangle = \hat{T}(\Delta Xe_x)\hat{H}_0|NX_0\rangle = E_N\hat{T}(\Delta Xe_x)|NX_0\rangle \quad (4.2.31)$$

$$\hat{X}\hat{T}(\Delta Xe_x)|NX_0\rangle = (\Delta X\hat{T}(\Delta Xe_x) + \hat{T}(\Delta Xe_x)\hat{X})|NX_0\rangle = (X_0 + \Delta X)\hat{T}(\Delta Xe_x)|NX_0\rangle \quad (4.2.32)$$

が成立することが確かめられる。つまり、 $\hat{T}(\Delta X \mathbf{e}_x)$ は次のように X を ΔX だけ変化させる演算子になっている。

$$\hat{T}(\Delta X \mathbf{e}_x) |NX\rangle = |NX + \Delta X\rangle \quad (4.2.33)$$

このようにしてエネルギー固有値を1つ上げる(下げる)昇降演算子 \hat{a} と中心座標の X 成分期待値を変化させる磁場中の並進移動演算子 \hat{T} が揃ったので、

$$\hat{a} |00\rangle = \hat{X} |00\rangle = 0 \quad (4.2.34)$$

を満たす「真空状態」を求めておけば、

$$|NX\rangle = \frac{1}{N!} (\hat{a}^\dagger)^N \hat{T}(X \mathbf{e}_x) |00\rangle \quad (4.2.35)$$

と規格直行完全系が構成できる。

4.3 エネルギー固有関数の表式

本節ではゲージを固定して、固有関数を頭書き下すことを目的とする。波動関数の具体系を知っておくことは、この系の物理を直感的に把握するため、また具体的な数値計算を行うために必要である。

4.3.1 Landau ゲージ

静磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ を与えるベクトルポテンシャルは無数に存在するが、波動関数の形はゲージに依存する。そこで本節では Landau ゲージ

$$\mathbf{A}_L(\mathbf{r}) = (0, B\hat{x}) \quad (4.3.1)$$

をとった場合の波動関数について考察する。

このゲージでは力学的運動量演算子、中心座標演算子、保存運動量演算子が次のように書ける。

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \left(\hat{p}_x, \hat{p}_y + \frac{\hbar}{l^2} \hat{x} \right) \quad (4.3.2)$$

$$\hat{\mathbf{R}} = \left(-\frac{l^2}{\hbar} \hat{p}_y, \hat{y} + \frac{l^2}{\hbar} \hat{p}_x \right) \quad (4.3.3)$$

$$\hat{\mathbf{K}} = \left(\frac{1}{\hbar} \hat{p}_x + \frac{\hat{y}}{l^2}, \frac{1}{\hbar} \hat{p}_y \right) \quad (4.3.4)$$

この表式を見ると、 \hat{X} が非常に単純な形になっていることがわかる。そのため、このゲージは \hat{H}_0 と \hat{X} の同時固有関数の計算に適している。またこのゲージにおける昇降演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger は

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i \frac{l}{\hbar} \hat{p}_x + \frac{\hat{x} - \hat{X}}{l} \right), \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-i \frac{l}{\hbar} \hat{p}_x + \frac{\hat{x} - \hat{X}}{l} \right) \quad (4.3.5)$$

と書ける。

ここまで整理した内容を用いて波動関数を計算する。まず $\hat{X} |00\rangle = 0$ を位置表示で書くと

$$il^2 \partial_y \langle \mathbf{r} | 00 \rangle = 0 \quad (4.3.6)$$

となるため, 波動関数 $\psi_{00}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | 00 \rangle$ は

$$\psi_{00}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \phi_0(x) \quad (4.3.7)$$

の形になることがわかる. さらに $\hat{a} | 00 \rangle = 0$ も位置表示で書くと

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(l \partial_x + \frac{x}{l} \right) \frac{1}{\sqrt{L}} \phi_0(x) = 0 \quad (4.3.8)$$

となるため, この微分方程式を解くことにより

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} l}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \quad (4.3.9)$$

が得られる. したがって

$$\psi_{00}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} l}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \quad (4.3.10)$$

である. この表式に \hat{a}^\dagger を N 回作用させると $\psi_{N0}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | N0 \rangle$ が

$$\psi_{N0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \phi_N(x) \quad (4.3.11)$$

$$\phi_N(x) = \frac{1}{N!} (\hat{a}^\dagger)^N \phi_0(x) \quad (4.3.12)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^N N! \pi^{1/2} l}} H_N\left(\frac{x}{l}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \quad (4.3.13)$$

と求まる. ここで

$$H_N(x) = (-1)^N e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^N e^{-x^2} \quad (4.3.14)$$

はエルミート多項式である. さらに, Landau ゲージでは磁場中の並進移動演算子が

$$\hat{T}(X \mathbf{e}_x) = \exp\left(-i \frac{X}{l^2} y\right) \exp\left(-i \frac{\hat{p}_x}{\hbar} X\right) \quad (4.3.15)$$

と書けることから $\psi_{NX}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | NX \rangle$ は

$$\psi_{NX}(\mathbf{r}) = \hat{T}(X \mathbf{e}_x) \psi_{N0}(x, y) \quad (4.3.16)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(-i \frac{X}{l^2} y\right) \exp\left(-i \frac{\hat{p}_x}{\hbar} X\right) \phi_N(x) \quad (4.3.17)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(-i \frac{X}{l^2} y\right) \phi_N(x - X) \quad (4.3.18)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(-i \frac{X}{l^2} y\right) \frac{1}{\sqrt{2^N N! \pi^{1/2} l}} H_N\left(\frac{x - X}{l}\right) \exp\left(-\frac{(x - X)^2}{2l^2}\right) \quad (4.3.19)$$

となる. これが Landau ゲージにおける \hat{H}_0 と \hat{X} の同時固有関数である. y 方向の波動関数が平面波になっているのは, X を対角化したために, 不確定性関係により Y が不定になっていることを表している.

4.3.2 Landau 準位の縮退数と占有率

ここで十分に大きい $L \times L$ の系を考え, y 方向に周期境界条件

$$\hat{T}(Le_y)\psi_{NX}(\mathbf{r}) = \psi_{NX}(\mathbf{r}) \quad (4.3.20)$$

を採用する. このとき X は離散的になり

$$X = X_j = \frac{2\pi l^2}{L} j \in \mathbb{Z} \quad (4.3.21)$$

の値しか取り得なくなる. $L \rightarrow \infty$ の極限においては取り得る X の間隔が無限小になるため

$$\sum_X = \frac{L}{2\pi l^2} \int_0^L dX = \frac{L^2}{2\pi l^2} \quad (4.3.22)$$

のように和を積分で実行することができる. この表式から各 Landau 準位 E_N は中心座標 X に関して $N_\phi = L^2/2\pi l^2$ だけ縮退していることがわかった. すなわち, 中心 X は面積が $2\pi l^2$ の領域に 1 個の割合で存在するといえる. 特にスピン自由度を除いた単位面積あたりの縮退数は $1/2\pi l^2$ である. 電子数 N_e と Landau 準位の縮退数 N_ϕ の比

$$\nu = \frac{N_e}{N_\phi} = 2\pi l^2 n \quad (4.3.23)$$

はこの系の物理を理解するために非常に重要な占有率と呼ばれる量である.

また状態密度は

$$D_{\text{Landau}}(E) = \frac{1}{L^2} \sum_{NX} \delta(E - E_N) = \frac{1}{2\pi l^2} \delta(E - E_N) \quad (4.3.24)$$

と書ける. これはエネルギーによらず一定なゼロ磁場での二次元電子系の状態密度

$$D_{2d} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}\right) = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \quad (4.3.25)$$

と比べて著しく異なっている. 各 Landau 準位の縮退数 N_ϕ は $D_{2d} \times \hbar\omega_c \times L^2$ に等しい.

4.3.3 周期境界条件下の波動関数

式 (4.3.19) は無限系の波動関数である. 本節では数値計算を行う場合に必要となる有限系の波動関数についてまとめる.

磁場中の周期境界条件

$$\hat{T}(Le_x)\psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r}) = \hat{T}(Le_y)\psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r}) = \psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r}) \quad (4.3.26)$$

を課した $L \times L$ の有限系における波動関数 $\psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r})$ を考える. このとき波動関数は

$$\hat{T}(Le_x)\hat{T}(Le_y)\psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r}) = \hat{T}(Le_y)\hat{T}(Le_x)\psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r}) \quad (4.3.27)$$

も満たさなければならない。もし $\hat{T}(Le_x)$ と $\hat{T}(Le_y)$ が可換であれば、上記の関係式が満たされるが、一般には磁場中の並進移動演算子は非可換な操作である。しかし、数学の定理

$$e^A e^B = e^{[A,B]} e^B e^A \quad \text{when } [A, B] = \text{const} \quad (4.3.28)$$

を使うと

$$\hat{T}(Le_x)\hat{T}(Le_y) = e^{[-i\hat{K}_x L, -i\hat{K}_y L]}\hat{T}(Le_y)\hat{T}(Le_x) = e^{-i\frac{L^2}{l^2}}\hat{T}(Le_y)\hat{T}(Le_x) \quad (4.3.29)$$

の成立が確かめられるので、系の大きさを正の整数 N_ϕ に対して

$$\frac{L^2}{l^2} = 2\pi N_\phi \quad (4.3.30)$$

を満たすように取れば、 $\hat{T}(Le_x)$ と $\hat{T}(Le_y)$ が可換になり、式 (4.3.27) が満たされることがわかる。 N_ϕ は前出の Landau 準位縮退数であり、それが整数になるように系の大きさを設定すればよいのである。ここで N_ϕ は系を貫く磁束 $\Phi = BL^2$ を磁束量子 $\Phi_0 = h/e$ で除したものになっていることもわかった。つまり、Landau 準位の縮退数 N_ϕ は系を貫く磁束量子の本数という意味を持っている。

式 (4.3.30) を満たすように試料サイズを選んでおけば、

$$[\hat{H}_0, \hat{T}(Le_x)] = [\hat{H}_0, \hat{T}(Le_y)] = [\hat{T}(Le_x), \hat{T}(Le_y)] = 0 \quad (4.3.31)$$

が成立する。つまり、 \hat{H}_0 、 $\hat{T}(Le_x)$ 、 $\hat{T}(Le_y)$ の同時固有状態を構築することができる。そして、その同時固有状態こそが $\psi_{NX}^{\text{PB}}(\mathbf{r})$ である。 y 方向の条件と $0 \leq X \leq L$ の条件 (X も $[0, L]$ の範囲に還元して考える必要がある) から、 X の値が離散的な値

$$X_j = \frac{2\pi l^2}{L} j = \frac{L}{N_\phi} j \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N_\phi - 1) \quad (4.3.32)$$

に制限される。ここから N_ϕ が Landau 準位の縮退数としての意味を持つことを再確認できた。さらに x 方向の条件を頭に書いたもの

$$e^{-iyL/l^2} e^{-i\hat{p}_x L/\hbar} \psi_{NX_j}^{\text{PB}}(x, y) = e^{-iyL/l^2} \psi_{NX_j}^{\text{PB}}(x - L, y) = \psi_{NX_j}^{\text{PB}}(x, y) \quad (4.3.33)$$

を考慮する。この条件を満たすような波動関数を構成するため

$$\psi_{NX_j}^{\text{PB}}(x, y) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n \psi_{NX_j}(x + nL, y) \quad (4.3.34)$$

とおく。左辺は周期境界条件を満たす波動関数、右辺は無限系の波動関数の重ね合わせになっていることに注意。これを式 (4.3.33) に代入すると

$$\sum_{n' \in \mathbb{Z}} c_{n'+1} \psi_{NX_j}(x + n'L, y) = e^{iyL/l^2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n \psi_{NX_j}(x + nL, y) \quad (4.3.35)$$

が得られる。任意の座標に対してこの関係が満たされるようにするためには

$$c_n = e^{iynL/l^2} c_0 \quad (4.3.36)$$

に取れば良い。さらに規格化条件を満たすように

$$c_0 = 1 \quad (4.3.37)$$

と決めると, $\psi_{NX_j}^{\text{PB}}(x, y)$ が

$$\begin{aligned}
\psi_{NX_j}^{\text{PB}}(x, y) &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{iynL/l^2} \psi_{NX_j}(x + nL, y) \\
&= \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{iynL/l^2} \frac{1}{\sqrt{L}} \exp \left[-i \frac{X_j y}{l^2} \right] \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{2^N N! \sqrt{\pi} l}} H_N \left(\frac{x + nL - X_j}{l} \right) \exp \left[-\frac{1}{2l^2} (x + nL - X_j)^2 \right] \\
&= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \psi_{NX_j - nL}(x, y) \tag{4.3.38}
\end{aligned}$$

と求まる. これが磁場中の周期境界条件下の波動関数である. またこの波動関数に対応する周期境界条件下の状態 $|NX_i\rangle$ は

$$\langle \mathbf{r} | NX_i \rangle = \psi_{NX_j}^{\text{PB}}(\mathbf{r}) \tag{4.3.39}$$

により定義される.

4.3.4 静電場が印加された場合の波動関数と電気伝導度

本小節では, x 方向に電場 E_0 が印加された場合の波動関数を考える. ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - eE_0 \hat{x} \tag{4.3.40}$$

で与えられる. そして,

$$\dot{\hat{K}}_x = \frac{eE_0}{\hbar} \tag{4.3.41}$$

$$\dot{\hat{K}}_y = 0 \tag{4.3.42}$$

$$\tag{4.3.43}$$

が成立する. つまり, 電場印加前は保存量だった \hat{K}_x が保存量ではなくなっている. しかし, \hat{K}_y は電場印加後も保存量のままであるため, 波動関数を求める際は, \hat{K}_y が簡単な表式になる Landau ゲージをとって議論すると良い.

少し変形するとわかるように, 電場が印加された後のハミルトニアンも電場印加前と同じ調和振動子型になっている. そのため, この系の波動関数も, これまでに説明してきた手法により厳密に計算できる. 繰り返しになるので導出は省くが, エネルギー固有値, 波動関数は次のようになる.

$$E_{NX}^{E_0} = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right) - eE_0 X + \frac{m}{2} \left(\frac{E_0}{B} \right)^2 \tag{4.3.44}$$

$$\psi_{NX}^{E_0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L} \exp \left(-i \left(\frac{X}{l^2} + \frac{eE_0 m l^2}{\hbar^2} \right) y \right) \frac{1}{\sqrt{2^N N! \pi^{1/2} l}} H_N \left(\frac{x - X}{l} \right) \exp \left(-\frac{(x - X)^2}{2l^2} \right) \tag{4.3.45}$$

$$X = \frac{2\pi l^2}{L} j - \frac{eE_0 m l^4}{\hbar^2} \quad (j \in \mathbb{Z}) \tag{4.3.46}$$

なお y 方向には周期境界条件を仮定した. 固有エネルギーの第一項は量子化されたサイクロトロン運動のエネルギー, 第二項は電場によるポテンシャルエネルギー, 第三項は中心座標のドリフト運動の運動エネルギーである. これは第一項が量子化していることを除いて古典論と同じ表式になっている. 波動関数は X が変更を受

けたこと以外電場印加前と同じである。X が変更を受けたことはドリフト運動による中心座標の等速運動の反映である。この波動関数に対応する状態 $|\psi_{NX}^{E_0}\rangle$ は $\psi_{NX}^{E_0}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_{NX}^{E_0} \rangle$ により定義される。

この状態に対する電子の速度期待値は次のように求まる。

$$\langle \psi_{NX}^{E_0} | \dot{\hat{x}} | \psi_{NX}^{E_0} \rangle = \langle \psi_{NX}^{E_0} | \frac{1}{m} \hat{p}_x | \psi_{NX}^{E_0} \rangle = 0 \quad (4.3.47)$$

$$\langle \psi_{NX}^{E_0} | \dot{\hat{y}} | \psi_{NX}^{E_0} \rangle = \langle \psi_{NX}^{E_0} | \frac{1}{m} (\hat{p}_y - eB\hat{x}) | \psi_{NX}^{E_0} \rangle \quad (4.3.48)$$

$$= \langle \psi_{NX}^{E_0} | \left(\frac{eB}{m} (X - \hat{x}) - \frac{E_0}{B} \right) | \psi_{NX}^{E_0} \rangle \quad (4.3.49)$$

$$= -\frac{E_0}{B} \quad (4.3.50)$$

よって電気伝導度の静的成分は

$$\sigma_{xx} = 0, \sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{ne}{B} \quad (4.3.51)$$

となる。この結果は古典論の結果と厳密に一致している。つまり、量子系であっても不純物がなければ、対角伝導度は非 0 にならないことがわかった。

4.4 乱れがある場合

前節までハミルトニアンが \hat{H}_0 で記述される不純物が存在しない綺麗な系を考察してきた。本節では不純物による乱れが存在する系を考察する。そのため以下の一電子ハミルトニアンを仮定する。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.4.1)$$

ここで $V(\hat{\mathbf{r}})$ は不純物ポテンシャルであり、特に断らない限り以下の形で与えられるとする。

$$V(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_i^{N_{\text{imp}}} V_0 \delta(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_i) \quad (4.4.2)$$

\mathbf{R}_i はランダムに分布する i 番目の不純物の位置、 N_{imp} は不純物の総数である。

4.4.1 不純物散乱の影響の概要

不純物が存在しないとき、各 Landau 準位毎の電子状態は N_ϕ 重に縮退していた。不純物散乱を考慮すると、この縮退が解けて固有エネルギーが有限の幅を持って分布ようになる。以降、この分布の半幅を Γ と書くことにする。 Γ は不純物散乱により、電子が他の状態に遷移するまでの時間 (電子状態の寿命) τ と

$$\Gamma\tau \simeq \hbar \quad (4.4.3)$$

の関係にある。

Landau 準位の間隔 $\hbar\omega_c$ と状態幅 Γ の大小関係により、系の状態密度の振る舞いは大きく変化する。まず両者が

$$\hbar\omega_c \gg \Gamma \quad (4.4.4)$$

の関係にあるとき状態密度は離散化している。このような領域を強磁場領域と呼ぶ。強磁場領域では「離散化した Landau 準位」という描像が成り立つため摂動計算では Landau 準位の固有状態を参照状態にとって行うと良い。一方、両者が

$$\hbar\omega_c \ll \Gamma \quad (4.4.5)$$

の関係にある領域を弱磁場領域と呼ぶ。実は Γ はこの領域のエネルギースケールとして適切な量ではない。なぜなら弱磁場領域では状態密度は激しく重なっており、Landau 準位の状態密度 (4.3.24) よりも磁場なしの二次元系の状態密度 (4.3.25) に近い形状をとるためである。このような事情から、弱磁場領域において摂動計算する際は、磁場無しの系の固有状態を参照状態にとって行うのが良い [90, 91].

4.4.2 SCBA による強磁場領域の状態密度の計算

本小節では、前小節で定性的に説明した強磁場領域における状態密度の振る舞いを、計算により示す。そのためには N, X 基底の一粒子 Green 関数

$$G_N(E)\delta_{NN'}\delta_{XX'} = \left\langle \langle NX | \hat{G}(E) | N'X' \rangle \right\rangle_{\text{imp}} \quad (4.4.6)$$

の計算を進めれば良い。ここでレゾルベント演算子

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H}} \quad (4.4.7)$$

を導入した。また $\langle \dots \rangle_{\text{imp}}$ は不純物の配置による平均

$$\langle A(\mathbf{R}^i) \rangle_{\text{imp}} = \int \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{d\mathbf{R}^i}{\Omega} \right) A(\mathbf{R}^i) \quad (4.4.8)$$

を意味する。簡単な計算により後で使う公式

$$\left\langle \langle NX | \hat{V} | N'X' \rangle \right\rangle_{\text{imp}} = V_0 n_{\text{imp}} \delta_{N,N'} \delta_{X,X'} \quad (4.4.9)$$

$$\left\langle \sum_{X_1} \langle NX | \hat{V} | N_1 X_1 \rangle \langle N_1 X_1 | \hat{V} | N'X' \rangle \right\rangle_{\text{imp}} = V_0^2 n_{\text{imp}}^2 \delta_{N,N_1} \delta_{N_1,N'} \delta_{X,X'} + \frac{n_{\text{imp}} V_0^2}{2\pi l^2} \delta_{N,N'} \delta_{X,X'} \quad (4.4.10)$$

を導くことができる。本小節の主題である一粒子状態密度は、一粒子 Green 関数を用いて

$$D(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{NX} \left\langle \langle NX | \delta(E - \hat{H}) | NX \rangle \right\rangle_{\text{imp}} = \frac{1}{2\pi l^2} \left(-\frac{1}{\pi} \right) \sum_N \text{Im} G_N^{\text{R}}(E) \quad (4.4.11)$$

と書ける。ここで

$$G_N^{\text{R(A)}}(E) = G_N(E \pm i\eta) \quad (4.4.12)$$

は一粒子遅延 (先進) Green 関数である。

一粒子 Green 関数を計算するため、レゾルベント演算子を次のように展開する。

$$\hat{G}(E) = \hat{G}^0(E) + \hat{G}^0(E)V(\hat{r})\hat{G}^0(E) + \hat{G}^0(E)V(\hat{r})\hat{G}^0(E)V(\hat{r})\hat{G}^0(E) + \dots \quad (4.4.13)$$

ここで

$$\hat{G}^0(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0} \quad (4.4.14)$$

である。さらに式 (4.4.13) を N, X 表示し、その不純物平均を取る。すると左辺は式 (4.4.6) そのものになる。右辺第一項からは非摂動一粒子 Green 関数

$$G_N^{(0)}(E)\delta_{NN'}\delta_{XX'} = \frac{1}{E - E_N}\delta_{NN'}\delta_{XX'} \quad (4.4.15)$$

が得られる。右辺第二項からは V の一次の寄与

$$G_N^{(0)}(E)\langle\langle NX|V(\hat{r})|N'X'\rangle\rangle_{\text{imp}}G_{N'}^{(0)}(E) = G_N^{(0)}(E)V_0n_{\text{imp}}G_{N'}^{(0)}(E)\delta_{N,N'}\delta_{X,X'} \quad (4.4.16)$$

が得られる。この項は

$$V(\mathbf{r}) \rightarrow V(\mathbf{r}) - V_0n_{\text{imp}} \quad (4.4.17)$$

のように不純物ポテンシャルの原点を変えることで無視することができる。つまり、摂動の一次の寄与を考えるだけでは、不純物ポテンシャルの影響は現れない。右辺第三項からは V の一次の寄与

$$\begin{aligned} & G_N^{(0)}(E) \sum_{N_1 X_1} \langle\langle NX|\hat{V}|N_1 X_1\rangle\rangle G_{N_1}^{(0)}(E) \langle\langle N_1 X_1|\hat{V}|N'X'\rangle\rangle_{\text{imp}} G_{N'}^{(0)}(E) \\ &= G_N^{(0)}(E)V_0n_{\text{imp}}G_N^{(0)}(E)V_0n_{\text{imp}}G_{N'}^{(0)}(E)\delta_{N,N'}\delta_{X,X'} \\ &+ G_N^{(0)}(E)\frac{n_{\text{imp}}V_0^2}{2\pi l^2} \sum_{N_1} G_{N_1}^{(0)}(E)G_{N'}^{(0)}(E)\delta_{N,N'}\delta_{X,X'} \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

が得られる。一項目は摂動の一次の寄与の繰り返しであり、不純物ポテンシャルの原点をずらすことで無視できる。一方、二項目は、電子が一つの不純物によって散乱され別の状態へと伝搬される過程を表しており、このような散乱過程が伝導現象に主要な寄与を与えることが知られている。そこで、ダイソン方程式

$$G_N(E) = G_N^{(0)}(E) + G_N^{(0)}(E)\Sigma_N(E)G_N(E) \quad (4.4.19)$$

で定義される自己エネルギー $\Sigma_N(\epsilon)$ として、このような散乱過程のダイアグラムを集めたものを考えることにする。

$$\Sigma_N(E) = \frac{n_{\text{imp}}V_0^2}{2\pi l^2} \sum_{N_1} G_{N_1}^{(0)}(E) \quad (4.4.20)$$

これは Born 近似と呼ばれており、磁場無しの系では頻繁に用いられている。しかし、素直にこの表式の評価を進めようとする、右辺の和を実行する際に、ほとんどすべての項が発散してしまうという困難に直面する。この困難の原因は一粒子自由グリーン関数の虚部が δ 関数になっているためである。よって、計算を進めるにはもう少し工夫が必要である。そこで考案されたのが、自己エネルギー中の $G_N^{(0)}(E)$ を $G_N(E)$ で置き換えたもの

$$\Sigma_N(E) = \frac{n_{\text{imp}}V_0^2}{2\pi l^2} \sum_{N_1} G_{N_1}(E) \quad (4.4.21)$$

を扱うという近似方法である。こうしておけば式 (4.4.19), (4.4.21) を連立させ、自己無撞着に $G_N^R(E)$ を決めることができる。この近似法はセルフコンシステント Born 近似 (SCBA) [81] と呼ばれており、強磁場下の伝導現象の解析によく用いられている。

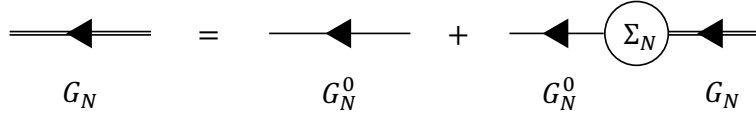


図 4.4 Dyson 方程式のダイアグラム. 二重線は G_N で実線が $G_N^{(0)}$ を表す.

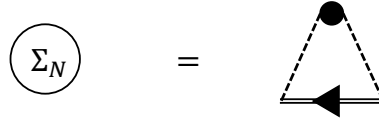


図 4.5 自己エネルギーのダイアグラム. 黒丸は不純物, 点線は不純物散乱ポテンシャルを表す.

ここで

$$\Gamma^2 = 4 \frac{n_{\text{imp}} V_0^2}{2\pi l^2} \quad (4.4.22)$$

と置く. この Γ は SCBA+ 強磁場極限における Landau 準位の半幅になっている. 確認は後で行うことにし, まずはこの事実を認めて議論を進めることにする. 強磁場領域で Landau 準位の状態密度が重なっていない場合には, 各 Landau 準位はほぼ独立とみなせるため,

$$\Sigma_N(E) \simeq \frac{\Gamma^2}{4} G_N(E) \quad (4.4.23)$$

と近似してよい. この表式は強磁場極限 $\Gamma/\hbar\omega_c \rightarrow 0$ において厳密に成立する. この近似を使うと, 因果律

$$\text{Im}G_N^{\text{R}}(E) \leq 0 \quad (4.4.24)$$

と境界条件

$$G_N^{\text{R}}(E) \rightarrow 0 \text{ at } E \rightarrow \pm\infty \quad (4.4.25)$$

の下で $G_N^{\text{R}}(E)$ が

$$G_N^{\text{R}}(E) = \begin{cases} 2\frac{E-E_N}{\Gamma^2} + \frac{2}{\Gamma}\sqrt{\left(\frac{E-E_N}{\Gamma}\right)^2 - 1} & (E - E_N < -\Gamma) \\ 2\frac{E-E_N}{\Gamma^2} - i\frac{2}{\Gamma}\sqrt{1 - \left(\frac{E-E_N}{\Gamma}\right)^2} & (|E - E_N| < \Gamma) \\ 2\frac{E-E_N}{\Gamma^2} - \frac{2}{\Gamma}\sqrt{\left(\frac{E-E_N}{\Gamma}\right)^2 - 1} & (E - E_N > \Gamma) \end{cases} \quad (4.4.26)$$

と求まる. したがって, 状態密度は

$$D(E) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi l^2} \sum_N \frac{2}{\pi\Gamma} \sqrt{1 - \left(\frac{E-E_N}{\Gamma}\right)^2} & (|E - E_N| < \Gamma) \\ 0 & (|E - E_N| > \Gamma) \end{cases} \quad (4.4.27)$$

となる. つまり状態密度は中心 E_N , 半幅 Γ の半楕円形になっている. このようにして式 (4.4.22) が Landau 準位の半幅そのものであることが確認できた. また磁場なしの場合の不純物散乱の緩和時間 τ_0 が

$$\tau_0 = \frac{2\pi}{\hbar} n_{\text{imp}} V_0^2 D_{2\text{d}} = \frac{2\pi}{\hbar} n_{\text{imp}} V_0^2 \frac{m}{2\pi\hbar^2} \quad (4.4.28)$$

と与えられることを用いると, SCBA による Landau 準位の半幅 Γ は

$$\Gamma = \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{\hbar}{\tau_0} \hbar \omega_c} \quad (4.4.29)$$

と書ける. $\hbar \omega_c \propto B$, $\Gamma \propto B^{1/2}$ だから, この結果は $\hbar \omega_c \gg \Gamma$ を意味しており, Landau 準位が離散化しているという仮定と矛盾の無い結果になっている. また

$$\frac{\Gamma}{\hbar \omega_c} \simeq \sqrt{\frac{1}{\omega_c \tau_0}} \quad (4.4.30)$$

であることから, $\omega_c \tau_0$ が大きい場合も強磁場領域と呼べることがわかる.

ここで導いた表式は強磁場極限において厳密に成立する表式である. 一般の強磁場領域での計算を行う場合には式 (4.4.26) を参照状態として式 (4.4.21) に代入し, 逐次計算を行うことで一粒子 Green 関数と状態密度を数値的に求めることになる.

4.4.3 Nakano-Kubo 公式による電気伝導度の計算

本小節では Nakano-Kubo 公式を一粒子 Green 関数を用いて書き直し, 電気伝導度を計算する. まず式 (3.2.7) を

$$\begin{aligned} \chi_{[\mu\nu]}(\omega) &= \int_0^\infty dt \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle (f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})) e^{i(\hbar\omega + i\eta + E_\alpha - E_{\alpha'})t/\hbar} \right\rangle_{\text{imp}} \\ &= -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\eta} \right\rangle_{\text{imp}} \\ &= -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \\ &\quad \times \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha | \hat{\pi}_\mu | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_\nu | \alpha \rangle \int d\epsilon f_{\beta, \mu}(\epsilon) \left(\frac{\delta(\epsilon - E_\alpha)}{\epsilon - E_{\alpha'} + \hbar\omega + i\eta} - \frac{\delta(\epsilon - E_{\alpha'})}{E_\alpha - \epsilon + \hbar\omega + i\eta} \right) \right\rangle_{\text{imp}} \\ &= -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \frac{1}{2\pi i} \int d\epsilon f_{\beta, \mu}(E) \\ &\quad \times \left\langle \text{Tr} \left\{ \hat{\pi}_\mu \hat{G}(E + \hbar\omega + i\eta) \hat{\pi}_\nu (\hat{G}(E - i\eta) - \hat{G}(E + i\eta)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \hat{\pi}_\nu \hat{G}(E - \hbar\omega - i\eta) \hat{\pi}_\mu (\hat{G}(E - i\eta) - \hat{G}(E + i\eta)) \right\} \right\rangle_{\text{imp}} \quad (4.4.31) \end{aligned}$$

と変形する. この式中には, 一粒子 Green 関数の計算には現れなかった, 二粒子 Green 関数の不純物平均が現れている. 導出は省略するが, 今回のように δ 関数型のポテンシャル (4.4.2) を仮定している場合には, SCBA と同様のレベルで取り込んだ頂点補正は 0 になることを導くことができる. よって不純物平均は一体の Green 関数に対して個別に作用する. その結果

$$\begin{aligned} \chi_{[\mu\nu]}(\omega) &= \frac{1}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \frac{1}{\pi} \int d\epsilon f_{\beta, \mu}(\epsilon) \\ &\quad \times \sum_{N, X} \sum_{N', X'} \langle NX | \pi_\mu | N'X' \rangle \langle N'X' | \pi_\nu | NX \rangle \\ &\quad \times (G_{N'}^R(\epsilon + \hbar\omega) \text{Im} G_N^R(\epsilon) + \text{Im} G_{N'}^R(\epsilon) G_N^A(\epsilon - \hbar\omega)) \quad (4.4.32) \end{aligned}$$

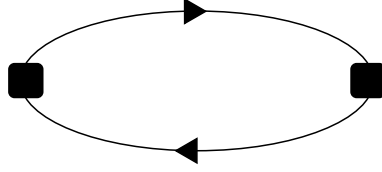


図 4.6 右 (左) 向きの実線は $G^{R(A)}$ を表す. またそれらをつなぐ四角形は $\hat{\pi}$ の行列要素を表す. この項は有限に残る.

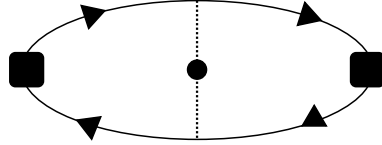


図 4.7 SCBA と同じレベルで図 4.6 に頂点補正を加えたもの. この項は計算すると 0 になる.

が成立する. これを式 (3.1.25) に代入することにより

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{1}{i\omega} \frac{1}{\Omega} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{\pi} \int d\epsilon f_{\beta,\mu}(\epsilon) \\ &\times \left[\sum_{N,X} \sum_{N',X'} \langle NX | \pi_\mu | N'X' \rangle \langle N'X' | \pi_\nu | NX \rangle \right. \\ &\quad \left. \times \left(G_{N'}^R(\epsilon + \hbar\omega) \text{Im}G_N^R(\epsilon) + \text{Im}G_{N'}^R(\epsilon) G_N^A(\epsilon - \hbar\omega) \right) - \frac{ne^2}{m} \delta_{\mu\nu} \right] \end{aligned} \quad (4.4.33)$$

が得られる. さらに $\hat{\pi}_\mu$ の行列要素が式 (4.2.18) で与えられることを用いると, $\text{Re}\sigma_{L(R)}$ が

$$\begin{aligned} \text{Re}\sigma_{L(R)}(\omega) &= \frac{1}{\omega} \frac{e^2 \omega_c^2}{2\pi^2} \sum_N N \int d\epsilon f_{\beta,\mu}(\epsilon) \\ &\times \left\{ \text{Im}G_{E_{N-1}}^R(\epsilon + \hbar\omega) \text{Im}G_{E_N}^R(\epsilon) + \text{Im}G_{E_N}^A(\epsilon - \hbar\omega) \text{Im}G_{E_{N-1}}^R(\epsilon) \right\} \end{aligned} \quad (4.4.34)$$

と求まる. $\text{Im}\sigma_{L(R)}(\omega)$ はこの表式の Kramers-Kronig 変換により求まる. そして $\sigma_{L(R)}(\omega)$ を式 (4.1.27) に代入することで, $\sigma_{xx}(\omega), \sigma_{xy}(\omega)$ が求まる. 表式 (4.4.34) は $\text{Re}\sigma_{L(R)}(\omega)(\text{Re}\sigma_{xx}(\omega), \text{Im}\sigma_{xy}(\omega))$ を $N-1$ 番目の Landau 準位と N 番目の Landau 準位との間の電子遷移の和で表したものになっている. サイクロトロン共鳴はまさにこの描像がぴったりあてはまる物理現象であり, この表式は $\omega \simeq \omega_c$ の物理を解析するのに適した表式になっている. しかし, Landau 準位が離散化している場合に $\omega \simeq 0$ の物理を考察する際は, バンド間遷移ではなくバンド内遷移が重要になるはずである. もしそういった物理を上記の表式で無理やり計算しようとすると, 微小量 (状態密度の裾の値の積) の足し引きを繰り返す計算になってしまう. これはこの表式が, 強磁場領域における $\omega \simeq 0$ の物理の解析には適していないことを意味している. また SCBA+ 低温強磁場極限でこの問題を扱おうとすると, Landau 準位が完全に離散化しているために, 化学ポテンシャルが Landau 準位上にあつたとしても $\sigma_{xx}(0) = 0$ になるという誤った結果を導いてしまう. つまり Nakano-Kubo 公式による計算は, 最低 Landau 準位に射影して考えることができないのである. 次小節ではこのような問題を解決し, 強磁場領域において $\omega \simeq 0$ の物理を解析するために強力な手法となる Kubo-Miyake-Hashitsume 公式 [92] を導出する.

4.4.4 Kubo-Miyake-Hashitsume 公式の導出と利点

本小節では強磁場領域の $\omega \simeq 0$ の物理を解析するために強力な手法となる Kubo-Miyake-Hashitsume 公式 [92] の導出を行う。まず Nakano-Kubo 公式 (3.1.25) を

$$\sigma_{L(R)} = \frac{1}{i\omega} \left(\chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) - \chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(0) \right) \quad (4.4.35)$$

$$\chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) = \frac{1}{\Omega} \left(-\frac{1}{i\hbar} \right) \int_0^\infty \langle [\hat{J}_{R(L)}(t), \hat{J}_{L(R)}(0)] \rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t - \eta t} \quad (4.4.36)$$

$$\hat{J}_{L(R)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \right) \quad (4.4.37)$$

と変形する。 $\chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega)$ は部分積分により

$$(i\omega - \eta) \chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{i\hbar} \langle [J_{R(L)}, J_{L(R)}] \rangle_{\text{eq}} - \chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) \quad (4.4.38)$$

と書き直すことができる。さらに

$$[\hat{J}_R, \hat{J}_L] = \frac{e^2 N}{m} \hbar \omega_c \quad (4.4.39)$$

$$\dot{\hat{J}}_{L(R)} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{J}_{L(R)}, \hat{H}] = \pm i\omega_c \hat{J}_{L(R)} - \frac{e}{m} \hat{F}_{L(R)} \quad (4.4.40)$$

$$\hat{F}_{L(R)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{F}_x + i\hat{F}_y) \quad (4.4.41)$$

$$\hat{F}_\mu \equiv \sum_i^{N_e} \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_\mu^i, V(\hat{\mathbf{r}}^i)] \quad (4.4.42)$$

を使うと、

$$(i\omega - \eta) \chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) = \mp i \frac{e^2 n}{m} \omega_c \pm i\omega_c \chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) + \frac{e}{m} \chi_{[F_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) \quad (4.4.43)$$

ゆえに

$$\chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) = \mp \frac{ne^2}{m} \frac{\omega_c}{\omega \mp \omega_c + i\eta} + \frac{e}{m} \frac{1}{i} \frac{\chi_{[F_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega)}{\omega \mp \omega_c + i\eta} \quad (4.4.44)$$

が成立することを確かめられる。同様の手法により

$$\chi_{[F_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) = \frac{1}{i} \frac{1}{\omega \mp \omega_c + i\eta} \left(\frac{1}{\Omega} \left(-\frac{1}{i\hbar} \right) \langle [\hat{F}_{R(L)}, \hat{J}_{L(R)}] \rangle_{\text{eq}} - \frac{e}{m} \chi_{[F_{R(L)}, F_{L(R)}]}(\omega) \right) \quad (4.4.45)$$

も導ける。これらを使うと

$$\chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(\omega) = \mp \frac{e^2 n}{m} \frac{\omega_c}{\omega \mp \omega_c + i\eta} - \frac{e}{m} \frac{\frac{1}{\Omega} \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{F}_{R(L)}, \hat{J}_{L(R)}] \rangle_{\text{eq}} - \frac{e}{m} \chi_{[F_{R(L)}, F_{L(R)}]}(\omega)}{(\omega \mp \omega_c + i\eta)^2} \quad (4.4.46)$$

が得られる。また式 (3.1.30) より $\chi_{[J_{R(L)}, J_{L(R)}]}(0) = ne^2/m$ だから

$$\frac{1}{\Omega} \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{F}_{R(L)}, \hat{J}_{L(R)}] \rangle_{\text{eq}} = \frac{e}{m} \chi_{[F_{R(L)}, F_{L(R)}]}(0) \quad (4.4.47)$$

ゆえに

$$\chi_{[J_{R(L)}J_{L(R)}]}(\omega) = \mp \frac{e^2 n}{m} \frac{\omega_c}{\omega \mp \omega_c + i\eta} + \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{\chi_{[F_{R(L)}F_{L(R)}]}(\omega) - \chi_{[F_{R(L)}F_{L(R)}]}(0)}{(\omega \mp \omega_c + i\eta)^2} \quad (4.4.48)$$

が成立する。\$\hat{F}_\mu\$ の波動関数に対する作用は

$$\hat{F}_\mu \psi(\mathbf{r}) = \sum_i^{N_e} (-\partial_\mu V(\mathbf{r}_i)) \psi(\mathbf{r}) \quad (4.4.49)$$

となることから、\$\hat{F}_\mu\$ は電子に働く力の総和を表していることがわかる。そのため表式 (4.4.48) は電流相関 \$\chi_{[J_{R(L)}J_{L(R)}]}(\omega)\$ を力の相関 \$\chi_{[F_{R(L)}F_{L(R)}]}(\omega)\$ で書き直した表式になっていると言える。

中心座標, 相対座標の時間依存性は Heisenberg 方程式より

$$\dot{\hat{X}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{X}, V(\hat{\mathbf{r}})] = -\frac{1}{i\hbar} \frac{l^2}{\hbar} [\hat{p}_y, V(\hat{\mathbf{r}})] \quad (4.4.50)$$

$$\dot{\hat{Y}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{Y}, V(\hat{\mathbf{r}})] = \frac{1}{i\hbar} \frac{l^2}{\hbar} [\hat{p}_x, V(\hat{\mathbf{r}})] \quad (4.4.51)$$

$$\dot{\hat{\xi}} = -\omega_c \hat{\eta} + \frac{1}{i\hbar} \frac{l^2}{\hbar} [\hat{p}_y, V(\hat{\mathbf{r}})] \quad (4.4.52)$$

$$\dot{\hat{\eta}} = \omega_c \hat{\xi} - \frac{1}{i\hbar} \frac{l^2}{\hbar} [\hat{p}_x, V(\hat{\mathbf{r}})] \quad (4.4.53)$$

となる。これを用いると

$$\hat{F}_{L(R)} = \mp i \frac{\hbar}{l^2} \sum_i^{N_e} \dot{\hat{R}}_\pm^i = \pm B \hat{J}_{L(R)}^R \quad (4.4.54)$$

$$\hat{R}_\pm^i = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X}^i \pm i\hat{Y}^i) \quad (4.4.55)$$

$$\hat{J}_{L(R)}^R = -e \sum_i^{N_e} \dot{\hat{R}}_\pm^i \quad (4.4.56)$$

と、\$\hat{F}_\mu\$ を \$\hat{R}_\mu\$ で表すことができる。\$\hat{J}_{L(R)}^R\$ は中心座標運動が担う電流である。これらを用いると、伝導度も次のように相対座標を用いない形で書くことができる。

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{\sigma_L(\omega) + \sigma_R(\omega)}{2}, \sigma_{xy}(\omega) = \frac{\sigma_L(\omega) - \sigma_R(\omega)}{2i} \quad (4.4.57)$$

$$\sigma_{L(R)}(\omega) = \sigma_{L(R)}^{(\text{pure})}(\omega) + \Delta\sigma_{L(R)}(\omega) \quad (4.4.58)$$

$$\sigma_{L(R)}^{(\text{pure})}(\omega) = i \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\omega \mp \omega_c + i\eta} \quad (4.4.59)$$

$$\Delta\sigma_{L(R)}(\omega) = \frac{e^2 \omega_c^2}{(\omega \mp \omega_c + i\eta)^2} \frac{\chi_{[J_{R(L)}^R J_{L(R)}^R]}(\omega) - \chi_{[J_{R(L)}^R J_{L(R)}^R]}(0)}{-i\omega} \quad (4.4.60)$$

$$\chi_{[J_{R(L)}^R J_{L(R)}^R]}(\omega) = \frac{1}{\Omega} \left(-\frac{1}{i\hbar}\right) \frac{\hbar^2}{l^2} \int_0^\infty \left\langle \left[\sum_i^{N_e} \dot{\hat{R}}_{R(L)}^i(t), \sum_j^{N_e} \dot{\hat{R}}_{L(R)}^j(0) \right] \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t - \eta t} \quad (4.4.61)$$

これらの式の DC 極限をとったもの

$$\sigma_{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu}^{(\text{pure})} + \Delta\sigma_{\mu\nu} \quad (4.4.62)$$

$$\sigma_{xx}^{(\text{pure})} = 0 \quad (4.4.63)$$

$$\sigma_{xy}^{(\text{pure})} = -\nu \frac{e^2}{h} \quad (4.4.64)$$

$$\Delta\sigma_{\mu\nu}(\omega) = e^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\chi_{[J_{R(L)}^R, J_{L(R)}^R]}(\omega) - \chi_{[J_{R(L)}^R, J_{L(R)}^R]}(0)}{-i\omega} \quad (4.4.65)$$

が Kubo-Miyake-Hashitume 公式である。伝導度が中心座標だけで書けていることから中心座標 Kubo 公式とも呼ばれている。

この公式は Nakano-Kubo 公式が苦手としていた、強磁場 $\Gamma/\hbar\omega_c \ll 1$ かつ $\omega \simeq 0$ の物理を解析する際に非常に強力な手法となる。電子は不純物と衝突して別の状態へと遷移されるまでに、 $\omega_c\tau (\gg 1)$ 周期程度の回転運動を行う。また回転運動の半径 (サイクロトロン半径) l は磁場 B の平方根に反比例して小さくなる。 l が不純物の平均間隔 $\sqrt{1/n_{\text{imp}}}$ と比べて非常に小さくなるような強磁場領域では不純物散乱は極稀にしか生じない。つまり電子はドリフト運動する中心座標の周りを、とてつもなく激しい角速度で非常に小さい半径の円運動を繰り返しているのである。このような非常に激しい相対運動の寄与 $\sigma_{L(R)}^{(\text{pure})}$ を予め抜き出して計算しておくことにより、中心座標の運動のみに着目した計算ができるところが、Kubo-Miyake-Hashitume 公式の強みである。そして、そのために、最低 Landau 準位に射影した計算が可能になる (次節参照)。これが強磁場極限の電気伝導度を議論する際に使われる理由である。しかし、導出過程で部分積分を 2 回行ったことにより、 $\omega = \omega_c$ に二次の極が現れてしまっている (式 (4.4.60))。これはいわば計算の都合上現れた「偽の極」であり、本来の自然な極よりも特異性が強い。こういった事情からこの公式は $\omega \simeq \omega_c$ の物理を調べるのには適していない。このように Nakano-Kubo 公式と Kubo-Miyake-Hashitume は、得意・不得意とする領域が違いため、目的に応じて使い分けるのが良い。

4.4.5 Kubo-Miyake-Hashitume 公式による低温強磁場下の DC 伝導度の計算

本小節では Kubo-Miyake-Hashitume 公式を用いてこれまでに考察してきた系の電気伝導度を計算する。Kubo-Miyake-Hashitume 公式を使うと、対角伝導度を

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi\hbar e^2}{\Omega} \sum_{\alpha, \alpha'} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \left\langle \left| \langle \alpha | \dot{X} | \alpha' \rangle \right|^2 \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_{\alpha'}) \right\rangle_{\text{imp}} \quad (4.4.66)$$

$$= \frac{\pi\hbar e^2}{\pi^2\Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \left\langle \text{Tr} \left[\dot{X} \text{Im}[\hat{G}^R(E)] \dot{X} \text{Im}[\hat{G}^R(E)] \right] \right\rangle_{\text{imp}} \quad (4.4.67)$$

と書くことができる。対角和を NX 基底で実行すると

$$\sigma_{xx} = \frac{\pi\hbar e^2}{\pi^2\Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_N \sum_{X, X'} \left\langle \left| \langle NX | \dot{X} | NX' \rangle \right|^2 \right\rangle_{\text{imp}} (\text{Im}G_N^R(E))^2 \quad (4.4.68)$$

となる。Nakano-Kubo 公式を用いたときとは異なり、 \dot{X} の行列成分の不純物平均もとらなければならないことには注意が必要である。力学的運動量 (相対座標) の行列成分は異なる Landau 準位間のものしか非ゼロにならなかったのに対して \dot{X} の行列成分は、同一の Landau 準位間のものも非ゼロになる。そのため、この公式

は最低 Landau 準位のみに着目した計算を可能にしている. 行列成分の計算を進めると

$$\begin{aligned} |\langle NX | \dot{X} | NX' \rangle|^2 &= \left(\frac{l^2}{\hbar}\right)^2 V_0^2 \sum_i \sum_j \\ &\times \int d\mathbf{r}_1 \psi_{NX}^*(\mathbf{r}_1) (\partial_{y_1} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)) \psi_{NX'}(\mathbf{r}_1) \\ &\times \int d\mathbf{r}_2 \psi_{NX'}^*(\mathbf{r}_2) (\partial_{y_2} \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)) \psi_{NX}(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (4.4.69)$$

$$= \frac{V_0^2}{\hbar^2} (X - X')^2 \sum_{i,j} \psi_{NX}^*(\mathbf{R}_i) \psi_{NX'}(\mathbf{R}_i) \psi_{NX'}^*(\mathbf{R}_j) \psi_{NX}(\mathbf{R}_j) \quad (4.4.70)$$

となる. ここで二行目への変形には部分積分を用いた. 式 (4.4.68) に代入し, 不純物平均を実行することで

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\pi \hbar e^2}{\pi^2 \Omega} \int dE \left(-\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \sum_N (\text{Im} G_N^R(E))^2 \\ &\times \frac{V_0^2}{\hbar^2} n_{\text{imp}} \sum_{X, X'} \int d\mathbf{R}_i |\psi_{NX}^*(\mathbf{R}_i) \psi_{NX'}(\mathbf{R}_i)|^2 (X - X')^2 \end{aligned} \quad (4.4.71)$$

を得る. 更に X, X' に関する和と, 座標に関する積分は

$$\begin{aligned} &\sum_{X, X'} \int d\mathbf{R}_i |\psi_{NX}^*(\mathbf{R}_i) \psi_{NX'}(\mathbf{R}_i)|^2 \\ &= \int d\mathbf{R}_i \int \frac{LdX}{2\pi l^2} \int \frac{LdX'}{2\pi l^2} \frac{1}{L^2} \phi_{NX}(\mathbf{R}_i) \phi_{NX}(\mathbf{R}_i) \phi_{NX'}(\mathbf{R}_i) \phi_{NX'}(\mathbf{R}_i) (X - X')^2 \end{aligned} \quad (4.4.72)$$

$$= \int d\mathbf{R}_i 2 \int \frac{dX}{2\pi l^2} \phi_{NX}(\mathbf{R}_i) X^2 \phi_{NX}(\mathbf{R}_i) \int \frac{dX'}{2\pi l^2} \phi_{NX'}(\mathbf{R}_i) \phi_{NX'}(\mathbf{R}_i) \quad (4.4.73)$$

$$= \int d\mathbf{R}_i \left(\frac{1}{2\pi l^2} \right)^2 2 \left(N + \frac{1}{2} \right) l^2 \quad (4.4.74)$$

$$= \Omega \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{2\pi l^2} \right) \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (4.4.75)$$

と実行できる. 一行目から二行目の変形には XX' の項が対称性から消えること, 二行目から三行目の変形にはエルミート多項式の性質を用いた. さらに強磁場極限の一粒 Green 関数 (4.4.26) も使うと, 強磁場極限 +SCBA で求めた, 絶対零度かつ化学ポテンシャルが N 番目の Landau 準位にかかっているときの対角伝導度の表式

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \sum_N \left(N + \frac{1}{2} \right) \left(1 - \left(\frac{\mu - E_N}{\Gamma} \right)^2 \right) \quad (4.4.76)$$

が得られる. この解は化学ポテンシャルが Landau 準位中央付近にあるとき対角伝導度が極大化することを示しており, そのふるまいは実験的にも確かめられている.

計算が複雑なので詳細は省略するが強磁場極限 +SCBA で求めた, 絶対零度かつ化学ポテンシャルが N 番目の Landau 準位にかかっているときの Hall 伝導度は次のようになる.

$$\Delta\sigma_{xy} = \frac{1}{\hbar\omega_c} (-2\text{Im}\Sigma_N(\mu))\sigma_{xx} \quad (4.4.77)$$

$$= \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right) \frac{\Gamma}{\hbar\omega_c} \left[1 - \left(\frac{\mu - E_N}{\Gamma} \right)^2 \right]^{3/2} \quad (4.4.78)$$

しばしば、 $-2\text{Im}\Sigma_N = \hbar/\tau$ と置けば、この関係が Drude モデルにおける σ_{xx} と σ_{xy} の関係と一致しているということが主張される。しかし、これは古典系に特有の関係であり、量子系では一般的には成立しないことには注意しなければならない。式 (4.4.78) を見ると、化学ポテンシャルが Landau 準位の端にかかっているとき、つまり $\mu = E_N \pm \Gamma$ のとき、 $\Delta\sigma_{xy} = 0$ が成立していることがわかる。これは Widom-Streeter 公式 [93]^{*2} により厳密に示されているよく知られた結果に一致しており、SCBA が既存の結果を再現する良い近似になっていることを示している。

4.4.6 拡散運動による理解

サイクロトロン運動を行う電子の中心座標が不純物との衝突により移り変わる運動は、拡散運動として理解できる。本小節では SCBA による Landau 準位の広がり と対角伝導度の結果を、拡散運動に着目した直感的な考察により導出することを目的とする。

始状態を $|i\rangle$ 、終状態を $|f\rangle$ 、終状態の状態密度を D とすると、不純物散乱によりこの遷移が起こる確率 $T_{i \rightarrow f}$ はフェルミの黄金律により

$$T_{i \rightarrow f} \simeq \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V_{\text{imp}} | i \rangle|^2 D \quad (4.4.79)$$

と見積もることができる。ここで Γ は $\hbar T_{i \rightarrow f}$ 程度、状態密度は Landau 準位の縮退数 N_ϕ を準位幅 Γ で除したものの $D \sim N_\phi/\Omega\Gamma = (2\pi l^2\Gamma)^{-1}$ 程度であることから、

$$\Gamma \sim 2\pi n_{\text{imp}} V_0^2 \frac{1}{2\pi l^2} \frac{1}{\Gamma} \quad (4.4.80)$$

の関係が成立することがわかる。この表式から Γ が次のように決まる。

$$\Gamma^2 \sim \frac{n_{\text{imp}} V_0^2}{2\pi l^2} \quad (4.4.81)$$

これは SCBA による見積もりと同程度になっている。

対角伝導度は Einstein の関係式 [1] より

$$\sigma_{xx} = e^2 D^* D(\mu) \quad (4.4.82)$$

と与えられる。ここで D^* は拡散運動の拡散係数である。散乱体との衝突による中心座標のジャンプはサイクロトロン半径 $\sqrt{2N+1}l$ 程度だから、拡散係数は不純物散乱の緩和時間 τ を用いて

$$D^* \sim \frac{(2N+1)l^2}{\tau} \quad (4.4.83)$$

^{*2} 化学ポテンシャルが Landau 準位のバンドギャップ中にあるとき Hall 伝導度が

$$\sigma_{xy} = -e \frac{\partial n}{\partial B}$$

と表せるという公式。非平衡状態を特徴づける電気伝導度が、熱力学量で計算できている点は注目に値する。これは化学ポテンシャルがバンドギャップ中にある場合、対角伝導度が 0 となり散逸 (Joule 熱) が 0 になるという特殊事情に起因している。化学ポテンシャルが p 番目と $p+1$ 番目の Landau 準位間のバンドギャップ中にある場合、電子数密度は

$$n = \frac{1}{2\pi l^2} \times p = \frac{eB}{h} \times p \quad (p \text{ は正の整数})$$

と与えられることから、 $\Delta\sigma_{xy} = 0$ が導ける。

と見積もることができる. この見積もりと, $D \sim (2\pi l^2 \Gamma)^{-1}$, そして不確定性関係 $\Gamma \tau \sim 2\pi \hbar$ を用いることで

$$\sigma_{xx} \sim \frac{e^2}{\hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (4.4.84)$$

を得る. この結果を見たときに, 不純物なしの場合には 0 になる対角伝導度の値が, 散乱強度に比例していないことを不思議に思うかもしれない. 確かに伝導度は散乱強度に比例するのだが, 散乱が増加することにより Landau 準位の幅が増大し, 終状態の密度が減少しているため, この 2 つの効果がうまく消しあい, 伝導度が散乱強度によらなくなっているのである.

第 5 章

整数量子 Hall 効果

本章では磁場中の二次元電子系で生じる興味深い物理現象の一つである整数量子 Hall 効果について説明する。整数量子 Hall 効果の理解は、第 III 部の結果を理解するために必要となる。本章をまとめるにあたり参考文献 [86–89] を参考にした。

5.1 概要と意義

整数量子 Hall 効果とは、Landau 準位占有率 ν が整数 p 近傍の場合に、Hall 抵抗 (率) が

$$R_H = \rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \times \frac{1}{p}, \quad (5.1.1)$$

に量子化するプラトー領域が現れる現象である。またプラトー領域における対角抵抗の値は 0 になる。しばしば、占有率が整数の場合に R_H が物理定数のみから決まる量子化値を取ることだけが着目されがちだが、それ自体は量子 Hall 効果の発見以前から Widom-Stredar 公式 [93] によりよく理解されていた。また古典論 (Drude モデル) や簡単な近似 (SCBA) を用いた量子論でも同様の結果が得られることが知られている (4 章参照)。これらの理論で説明できない事実は、 ν を変化させても R_H が変化しないプラトー領域が現れるという点である。この非自明なプラトーをバンドギャップ中で化学ポテンシャルを動かした場合に現れる自明なプラトーと混同してはならない。

占有率 ν を整数 p にぴったり合わせずとも、式 (5.1.1) の関係が成立し、 R_H が物理定数だけから決まる値を取るとするのは非常に驚くべき現象である。現在ではプラトー領域における R_H の値が式 (5.1.1) に 8 桁の精度で一致することが確認されている。また数多ある独立な実験結果の比較により、整数量子 Hall 効果のプラトーの値の普遍性は 10 桁の精度で確かめられている。この非常に高い精度が注目を集め、1990 年以降は量子 Hall 効果による測定結果から電気抵抗の国際標準が定められている。量子化 Hall 抵抗の測定精度に関してより詳しく知りたい読者は文献 [94] を参考にしてほしい。

また整数量子 Hall 効果の発見当初、 h や e の測定における不確かさは比較的大きなものだったのに対して、量子 Hall 効果の普遍性は極めて高い精度で確認されていたため、その測定結果は微細構造定数

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \quad (5.1.2)$$

を従来の方法 (電子の異常磁気能率の測定) とは独立に決定するための手法としても注目された [68]。微細構造定数は電子と電磁場の相互作用の強さを示す結合定数なので、基礎物理学上重要な量子電磁力学の成否を確かめるためにも貢献したと言える。

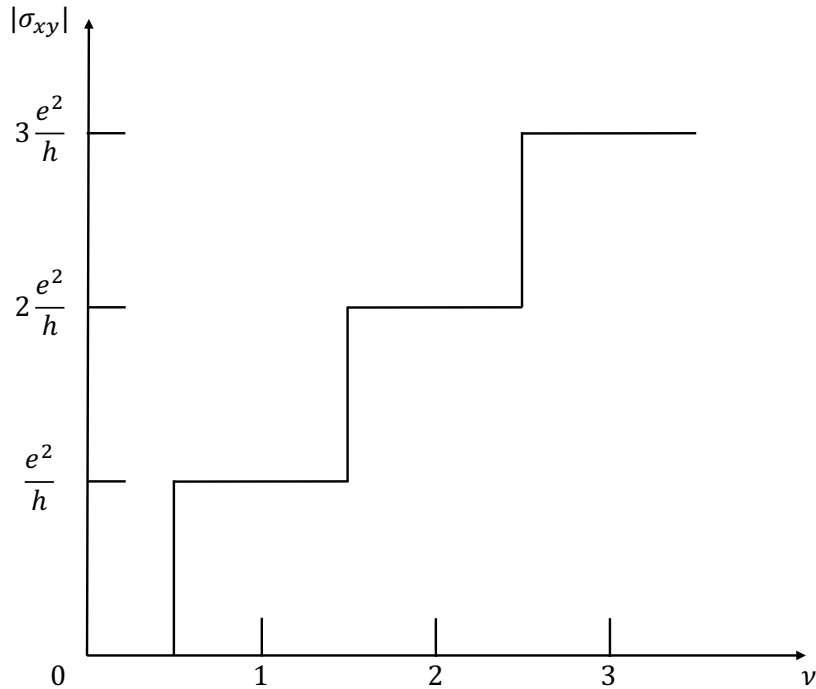


図 5.1 無限系における Hall 伝導度の占有率依存性の模式図. 無限系では非局在状態が各 Landau 準位あたり 1 つしか存在しないためこのような振る舞いになる. 有限系では各 Landau 準位ごとの非局在状態の数が複数個存在するため, この模式よりもなめらかな変化となる.

5.2 整数量子 Hall 効果の起源

本節では整数量子 Hall 効果が生じる理由について説明する.

5.2.1 準備

前節では実験的背景や応用を意識して, Hall 抵抗 (率) の言葉で整数量子 Hall 効果を説明してきたが, 理論的には電気伝導度を用いた説明のほうがわかりやすい. Landau 準位占有率 ν が整数 p 近傍のプラトー領域にあるとき, 電気伝導度は次の値を取る.

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}p, \sigma_{xx} = 0 \quad (5.2.1)$$

さて, 整数量子 Hall 効果は占有率 ν の変化に対してプラトーが現れることが重要なのであった. 占有率 $\nu = 2\pi l^2 n = hn/eB$ を変化させる方法には以下の 2 種類の方法が存在する.

1. 電子数密度 n (化学ポテンシャル μ) を一定に保ったまま外部磁場 B を変化させる.
2. 外部磁場 B を一定に保ったまま電子数密度 n (化学ポテンシャル μ) を変化させる.

実験でよく用いられる方法は前者である. 一方, 理論的には化学ポテンシャルを変化させると考えたほうがわ

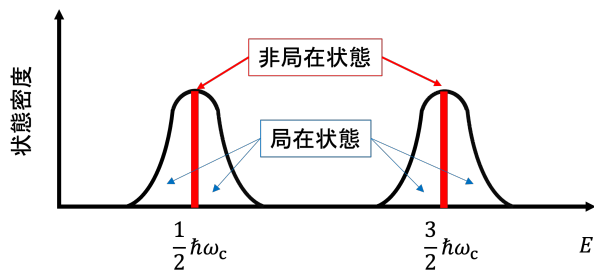


図 5.2 不純物ポテンシャルにより広がった Landau 準位におけるの局在状態・非局在状態の分布. 各 Landau 準位中央の赤い領域にだけ非局在状態が存在しており, その他の領域の状態は全て局在している.

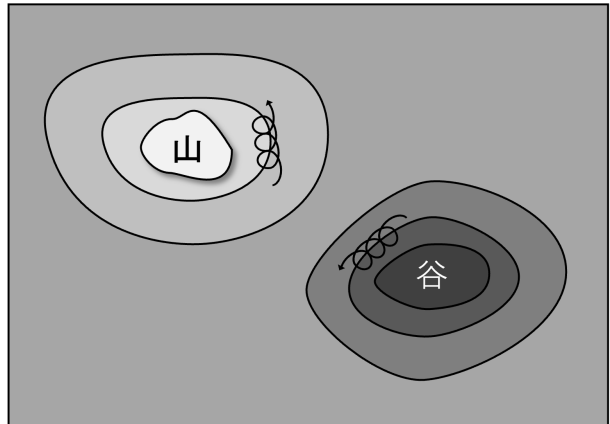


図 5.3 強磁場中での電子の運動の模式図. 実線は古典力学での電子軌道. 電子はポテンシャルの等高線に沿って半径 l 程度の $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ドリフト運動を行う. 量子力学における波動関数はこの古典軌道において大きな確率振幅を持つ.

かりやすい. 本論文では後者の方法により占有率を変化させることを約束して議論を進める.

5.2.2 プラトーが出る理由と局在状態の分布

前章で Hall 伝導度は式 (3.2.22) のように書けることを述べた. そして, 局在状態 $|\alpha\rangle$ について $C_\alpha = 0$ が成立することも説明した. つまり, 整数量子 Hall 効果が起こるということは, プラトー領域に対応するエネルギー領域の中でどれだけ化学ポテンシャル μ を増やしたとしても, 系に新たに加わる電子はすべて局在状態を占有する, ということを意味している. そしてこれは, さまざまな研究により正しいことが確かめられている. 本小節では局在・非局在状態の分布に関する先行研究について簡単にまとめる.

乱れたポテンシャルが存在するとき, 状態が局在することは Anderson により示された [95]. こういった局在は, 電子が引力ポテンシャルによって束縛されることにより生じる古典的な局在とは質的に異なるものであり, Anderson 局在と呼ばれている. その後, 参考文献 [96] ではスケーリング理論を用いた解析が行われた. これはコンダクタンスが系の大きさによってどのように変化するかを解析し, それを通して電子状態の局在・非局在を明らかにした研究である. その研究の成果として, 二次元電子系では不純物ポテンシャルの強さに依らずほとんどすべての状態が局在する, という結果が導かれた. ここで重要なのは完全にすべての状態が局在するというわけではなく, ほとんどすべての状態が局在するという点である. 逆に言えば数個の非局在状態の存在は許されているのである. では整数量子 Hall 効果が生じるような, 強磁場中の二次元電子系では非局在状態はどのように分布しているのだろうか? この間の答えは Thouless 数の計算 [97] をはじめとした様々な数値的手法により与えられた. 無限系では各 Landau 準位にひとつだけ非局在状態が存在し, その状態が存在するエネルギーは Landau 準位中央であることが示されたのである. また有限系では有限サイズ効果により複数の非局在状態が現れるが, それらの状態のエネルギーは依然として Landau 準位中央近傍の値を取る. このような局在・非局在状態の分布は, 化学ポテンシャルが Landau 準位中央近傍を横切ったときだけ, Hall 伝導度に変化することを意味している. 逆に考えればそれ以外の領域がプラトー領域になるのである. このふるまいは整数量子 Hall 効果にほかならない.

なお局在状態の分布を調べる際に数値的な手法に頼らざるを得ないのは、摂動計算で参照状態とする非局在状態が不純物により局在した状態とかけ離れたいるためである。摂動計算で高次の寄与まで取り込んだとしても、非局在状態から出発して局在状態を得ることはできず、それを反映した非物理的な発散が伝導度の計算結果に現れることが知られている。

不純物ポテンシャルの変化が緩やかな場合 (磁気長 l が不純物密度の逆数よりも十分に小さい場合) には、局在・非局在状態の分布は次のような直感的理解も可能である。まず不純物ポテンシャルを等高線としてイメージする。その等高線と垂直な方向には実行的な電場が存在している。古典力学で考えると、電場の影響を受けた電子は、 $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ドリフトをするため、不純物ポテンシャルの等高線に沿った運動を行うことになる。十分に強磁場であれば磁気長 $l \propto B^{-1/2}$ は不純物ポテンシャルの空間変化の特徴的な長さよりも小さくなるので、異なる等高線に遷移する確率は小さいと考えられる。したがって、強磁場における一電子状態は、不純物ポテンシャルの等高線を中心とし l 程度幅を持った領域に大きな確率振幅を持つ。不純物ポテンシャルは、各座標における不純物の数などによって、二次元面に山 (極大) や谷 (極小) を作る。不純物ポテンシャルの等高線はそれらの周りに局在した閉曲線となるため、対応するエネルギーにおける電子状態も局在状態となる。これが不純物により広がった Landau 準位の裾の方の状態が局在する直感的理由である。一方、山と谷の中間のエネルギー領域であれば、標高 0 の地点で試料全体をめぐるような状態ができると予測できる。これが Landau 準位中央付近にのみ非局在状態ができる直感的な理由である。

第III部

結果

第 6 章

巨視系における平衡電流ゆらぎの性質

2 章では理想的な古典測定を不確定性原理の範囲内で可能な限り模倣した測定 (準古典測定) により得られる平衡ゆらぎ $\beta S_{\mu\nu} = \beta S_{\mu\nu}(0)$ と電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu}(0)$ の関係について説明した. その結果, 対角成分について両者は一致するものの, 非対角成分については両者の差が低温強磁場領域で巨視的に増大することを見た [66]. この結果は, 古典的な FDT からの素朴な予想に反し, 非対角電流ゆらぎと Hall 伝導度が異なる物理で支配されていることを意味している. つまり, 非対角電流ゆらぎは 3 章で説明した Hall 伝導度の性質とは全く異なる物理的性質を持つはずである.

しかし, 2 章の計算結果を見ても両者が従う物理の差異は不明瞭である. その理由は 2 章で用いた摂動計算手法 (SCBA) にある. この手法は無限系における伝導度や電流ゆらぎを解析できる手法であり, 量子効果により生じる FDT の破れが巨視系に拡大されるのかを明らかにするという目的においては有用な手法であった. その一方で, 局在の影響を扱えない手法になっているという欠点が存在する (5 章参照). 3 章で説明したように, 状態が局在しているか否かは Hall 伝導度の占有率依存性に大きく影響し, その結果として 5 章で説明した量子 Hall 効果のような非自明な現象が生じる. そのため局在の影響を記述できない近似手法では, 伝導度とゆらぎの性質の差異を理解することはできないのである.

そこで本章では局在・非局在状態を区別可能な手法を用いることにより, 準古典測定により得られる電流ゆらぎ $\beta S_{\mu\nu}$ の性質及びその性質が $\sigma_{\mu\nu}$ の性質とどのように異なるのかを明らかにすることを目指す. 本章の内容の大部分は文献 [98] として出版済みである.

6.1 各状態の電流ゆらぎへの寄与

まず 3 章で説明した $\sigma_{\mu\nu}$ の性質を表す式 (3.2.13), (3.2.21) に対応する電流ゆらぎの表式を導く. 系は z 軸方向に静磁場 B が印加された電子間相互作用の無い二次元電子系とし, 3.1.1 節で説明した仮定の下で議論を行う.

6.1.1 対角電流ゆらぎ

準古典測定により得られる電流ゆらぎは, 次のように電流の対称化積相関で与えられるのであった (2 章参照).

$$\beta S_{\mu\nu} = \beta \int_0^\infty \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} \left\langle \left\{ \hat{j}_\nu(0), \hat{j}_\mu(t) \right\} \right\rangle_{\text{eq}} e^{-\eta t} dt \quad (6.1.1)$$

ここで $\langle \hat{J}_\mu \rangle_{\text{eq}} = 0$ であり, $\Delta \hat{J}_\mu = \hat{J}_\mu$ が成立することを用いて, Δ を省略した. 3章の議論を参考にし, この表式を変形すれば, 式 (3.2.13), (3.2.21) に対応する式を導くことができる. しかし, この方法はやや面倒な計算となるので, 本論文では2章で説明した相関関数の性質と3章で導いた電気伝導度の表式から, 式 (3.2.13), (3.2.21) に対応する表式を導くという方針をとる.

まず対角成分について考える. βS_{xx} と σ_{xx} の間には FDT

$$\beta S_{xx} = \sigma_{xx} \quad (6.1.2)$$

が成立するのであった. この式の右辺に対角伝導度の表式 (3.2.13) を代入することにより

$$\beta S_{xx} = \frac{\pi \hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \int dE \left(-\frac{\partial f_{\beta, \mu}(E)}{\partial E} \right) |\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle|^2 \delta(E - E_\alpha) \delta(E - E_{\alpha'}) \quad (6.1.3)$$

が得られる. この結果から S_{xx} には化学ポテンシャル上の非局在状態のみが寄与することがわかる. これは σ_{xx} の性質と同様の性質である.

6.1.2 非対角電流ゆらぎ

次に非対角電流ゆらぎを考える. 簡単のため, 3.2.3 節と同様に, z 軸周り $\pi/2$ 回転対称性を仮定する. 2章で説明したように非対角成分については FDT が成立しない. そして, 次の式を通じて, S_{xy} と $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ が解析的に結びついているのであった.

$$\beta S_{xy} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega} \text{Im}\sigma_{xy}(\omega) \quad (6.1.4)$$

非積分関数の $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ は, 式 (3.2.9), (3.2.19) から

$$\begin{aligned} \text{Im}\sigma_{xy}(\omega) &= -\frac{\pi \hbar}{\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \\ &\quad \times \delta(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega) \text{Im} [\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle] \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{\pi \hbar}{i\Omega} \left(\frac{e}{m} \right)^2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{f_{\beta, \mu}(E_\alpha) - f_{\beta, \mu}(E_{\alpha'})}{E_\alpha - E_{\alpha'}} \\ &\quad \times \delta(E_\alpha - E_{\alpha'} + \hbar\omega) [\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle] \end{aligned} \quad (6.1.6)$$

と書ける. ここで一行目から二行目への変形には $\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle$ が純虚数であり

$$\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle = i \text{Im} [\langle \alpha | \hat{\pi}_x | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{\pi}_y | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle] \quad (6.1.7)$$

と書けることを用いた. 式 (6.1.6) を式 (6.1.4) に代入することで次の式が得られる.

$$\beta S_{xy} = \sum_{\alpha} f_{\beta, \mu}(E_\alpha) D_\alpha \quad (6.1.8)$$

$$D_\alpha = \frac{\hbar e^2}{i\Omega m^2} \sum_{\alpha' (\neq \alpha)} M_{\alpha\alpha'} I_\beta \left(\frac{E_{\alpha'} - E_\alpha}{\hbar} \right) \quad (6.1.9)$$

この表式は Hall 伝導度の表式 (3.2.22), (3.2.24) と酷似しているが式 (3.2.22), (3.2.24) 中にはなかった I_β という因子が現れている分, 伝導度と異なっていることに注意が必要である. 古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ では $I_\beta \rightarrow 1$ となり FDT が成立することを確かめられる.

表式 (3.2.25) を使うことにより, 局在状態 $|\alpha\rangle$ に対して

$$D_\alpha = \frac{\hbar e^2}{i\Omega m^2} \sum_{\alpha'} I_\beta \left(\frac{E_{\alpha'} - E_\alpha}{\hbar} \right) (\langle \alpha | \hat{x} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{y} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{y} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \hat{x} | \alpha \rangle) \quad (6.1.10)$$

が得られる. 因子 I_β が無い伝導度の表式 (3.2.24) であれば, 完全性条件を使って, α' 依存性を消すことができた. そして, その結果として, $C_\alpha = 0$, つまり Hall 伝導度に局在状態が寄与しないことが示せたのであった. しかし, βS_{xy} の表式中では, 因子 I_β も α' に依存しているため, このような変形ができない. つまり, 局在状態 α に対しても $D_\alpha \neq 0$ となる. この結果は, 非対角ゆらぎには非局在状態だけでなく局在状態も寄与し得ることを意味している. この性質は Hall 伝導度の性質と対照的であり「両者が一致する」という古典的な FDT に著しく反している.

6.2 局在状態の寄与の定量的評価

前節では βS_{xy} に局在状態が寄与し得ることを導いた. しかし, それぞれの状態の寄与がどれほど異なるのか, についてはまだわかっていない. そのため, 前節の結果だけでは, 「 βS_{xy} に対して局在状態も非ゼロの寄与を与えるが, その寄与は非局在状態の寄与に比べて無視できるほど小さい」といったシナリオも否定できていない. そこで本節では, 有限サイズの二次元電子系における非対角電流ゆらぎを数値的に計算し, その占有率依存性を調べることで, それぞれの状態の寄与を具体的に評価する. そして, βS_{xy} には局在状態も非局在状態も同程度に寄与することを示す.

本節では具体的な計算を行うため, ベクトルポテンシャルを Landau ゲージ $A(\mathbf{r}) = (0, Bx)$ に固定する. また磁場中の周期境界条件 (4.3.26) を採用して計算を進める.

6.2.1 不純物が無い系の表式

不純物により乱れた系の数値計算を行う前に, 不純物が無い $V = 0$ の綺麗な系について考察する. この系の非対角ゆらぎ $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ は, 式 (6.1.8), (6.1.9) と式 (4.2.18) を用いることで

$$\beta S_{xy}^{(\text{pure})} = -\frac{e^2}{h} I_\beta(\omega_c) \nu \quad (6.2.1)$$

と求まる. この表式は式 (3.2.21), (3.2.24) と式 (4.2.18) を用いることで得られる綺麗な系の Hall 伝導度

$$\sigma_{xy}^{(\text{pure})} = -\frac{e^2}{h} I_\beta(\omega_c) \nu \quad (6.2.2)$$

に酷似している. しかし, $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ は $\sigma_{xy}^{(\text{pure})}$ よりも $I_\beta(\omega_c)$ 倍大きくなっており, 不純物が無い系であっても FDT は大きく破れていることがわかる.

このようにゆらぎも Hall 伝導度も Landau 準位占有率に比例する結果が得られたのは, 不純物が無い綺麗な系ではすべての状態が非局在状態になっており, その各々がゆらぎ・伝導度に等しく寄与するためである. しかし, 不純物散乱が存在する二次元系では, ほとんどすべての状態が局在する. そのため, 大多数を占める局在状態の寄与と, 無限系においては一状態しか存在しない非局在の寄与がどのように異なるのかについて, 注意深く調べる必要がある.

6.2.2 不純物により乱れた系の数値計算手法

本小節では不純物により乱れた系の数値計算手法についてまとめる．具体的計算を進めるため不純物ポテンシャルは以下の形で与えられると仮定する．

$$V(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_i u_i \delta(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_i) \quad (6.2.3)$$

ここで $\mathbf{R}_i = (x_i, y_i)$, u_i は i 番目の不純物の位置, 不純物散乱強度を表し, $x_i, y_i \in [0, L], u_i \in [-u/2, u/2]$ の範囲で一様分布するランダム変数である．

磁場中の周期境界条件 (4.3.26) を満たすように式 (4.3.38) で定義される $|N, X_i\rangle$ を基底ケットにとり, 全ハミルトニアン固有ケット $|\alpha\rangle$ を

$$|\alpha\rangle = \sum_{N,i} c_{NX_i}^\alpha |NX_i\rangle \quad (6.2.4)$$

と展開する．この状態に対して $\sum_{N',j} \langle N'X_j | \hat{H} |NX_i\rangle$ を作用させると

$$\sum_{N',j} \sum_{N,i} \langle N'X_j | \hat{H} |NX_i\rangle c_{NX_i}^\alpha = E_\alpha \sum_{N,i} c_{NX_i}^\alpha \quad (6.2.5)$$

と行列とベクトルの積の形で書くことができる．したがって, $\langle N'X_j | \hat{H} |NX_i\rangle$ を求め, \hat{H} を N, X 表示の行列で表し, それを対角化することにより, $E_\alpha, |\alpha\rangle$ を求めることができる．そして, 得られた $E_\alpha, |\alpha\rangle$ を式 (3.2.21), (6.1.8) に代入することにより, $\sigma_{xy}, \beta S_{xy}$ が得られる．数値計算の実装に必要な各演算子の行列要素は以下の通りである．

$$\langle N'X_j | \hat{H} |NX_i\rangle = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right) \delta_{N,N'} \delta_{X_i, X_j} \quad (6.2.6)$$

$$\langle N'X_j | V(\hat{\mathbf{r}}) |NX_i\rangle = \sum_k u_i (\psi_{N'X_j}^{\text{PB}}(\mathbf{R}_k))^* \psi_{NX_i}^{\text{PB}}(\mathbf{R}_k) \quad (6.2.7)$$

$$\langle \alpha' | \hat{\pi}_x | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l} \sum_{N',j} \sum_{N,i} c_{N'X_j}^{\alpha'*} c_{NX_i}^\alpha (\sqrt{N'+1} \delta_{N'+1, N} + \sqrt{N+1} \delta_{N', N+1}) \quad (6.2.8)$$

$$\langle \alpha' | \hat{\pi}_y | \alpha \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l} \sum_{N',j} \sum_{N,i} c_{N'X_j}^{\alpha'*} c_{NX_i}^\alpha (\sqrt{N'+1} \delta_{N'+1, N} - \sqrt{N+1} \delta_{N', N+1}) \quad (6.2.9)$$

次に数値計算を行うパラメタ設定について説明する．我々の目的は βS_{xy} と σ_{xy} の占有率依存性を計算し, 状態の局在が βS_{xy} にどのように影響するのか, またその影響は σ_{xy} に対する影響と比較してどのように異なるのかを解明することにある．このような目的を達成するためには, パラメタを高温弱磁場領域

$$\beta\hbar\omega_c \ll 1, \epsilon \gg 1 \quad (6.2.10)$$

$$\epsilon \equiv \frac{\Gamma}{\hbar\omega_c} \quad (6.2.11)$$

にとるのは適切ではない．なぜなら, 局在状態間を熱ゆらぎにより遷移できてしまうため, 局在による影響を見るのに適していないためである．またこの領域では FDT が成立し βS_{xy} と σ_{xy} の差が見えなくなってしまう．そこで局在の影響が顕著に現れるとともに, FDT が大きく破れるような低温強磁場領域

$$\beta\hbar\omega_c \gg 1, \epsilon < 1 \quad (6.2.12)$$

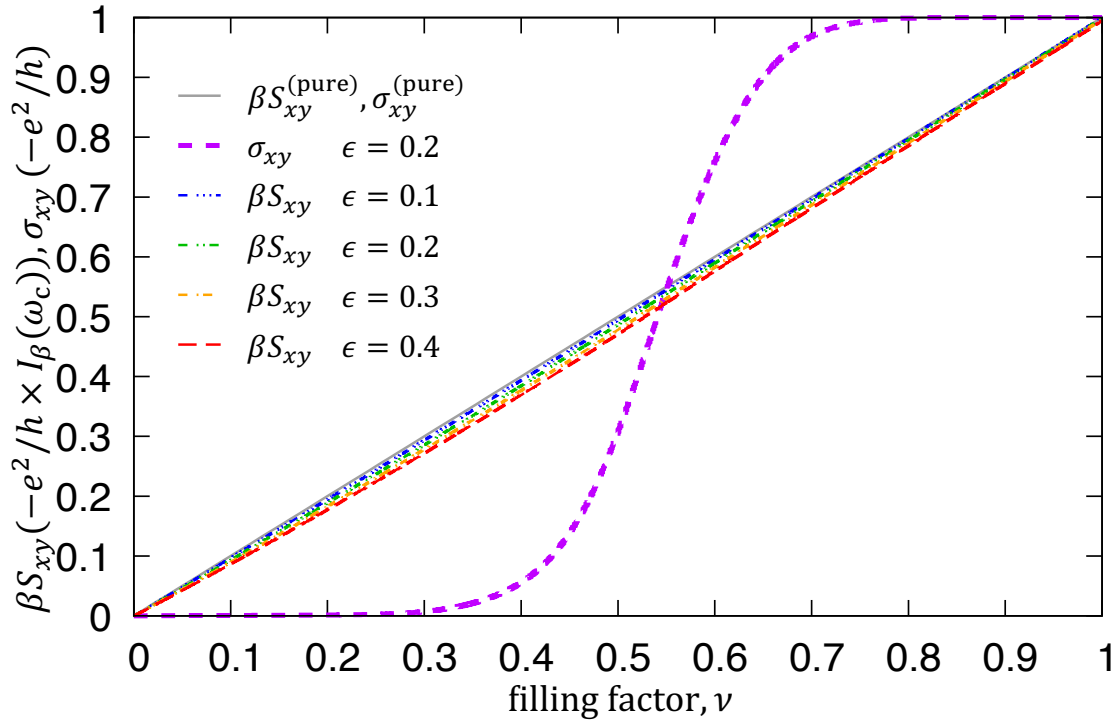


図 6.1 論文 [98] の FIG.1. 数値計算により得られた βS_{xy} を ν の関数としてプロットしたグラフ. パラメータは $k_B T = \hbar \omega_c / 250$ かつ $\epsilon = 0.1$ (青), 0.2 (緑), 0.3 (橙), 0.4 (赤). 比較対象として同じ温度かつ $\epsilon = 0.2$ の σ_{xy} (紫) の数値計算結果, 同じ温度かつ ϵ に依存しない $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ $\sigma_{xy}^{(\text{pure})}$ の解析解 (灰) をプロットした.

にパラメータを設定する. 具体的には $\beta \hbar \omega_c = 250$, $\epsilon = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ にとった. また我々は簡単のために δ 関数型の不純物ポテンシャル (6.2.3) を採用しているが, このような場合には不純物密度が低すぎると, 解が現実の系の振る舞いと合わない特異的な振る舞いをするようになる [97, 99]. 実験的にも無限系の理論においても占有率が 0.5 のときは σ_{xx} は極大値を取るはずだが, δ 関数型の不純物ポテンシャルで不純物密度を低く取りすぎた場合にはそうならなくなってしまうのである. このような特異的振る舞いを避けるためには, サイクロトロン運動の半径 l と不純物濃度 n_{imp} が $2\pi l^2 n_{\text{imp}} > 1$ の関係を満たすように取らなければならない [97, 99]. 我々の計算では $2\pi l^2 n_{\text{imp}} = 7$ にとった. これらのパラメータは温度 $T \sim 1\text{K}$, 磁場 $B \sim 10\text{T}$ 中にある, 有効質量 $m \sim 10^{-1} m_e$ (m_e は自由電子の質量), 移動度 $\mu \sim 10^4 \text{cm}^2/\text{Vs}$ の典型的な GaAs-AlAs ヘテロ接合中の二次元電子系におけるパラメータにほぼ対応している. また有限サイズの数値計算を行うため, Landau 準位の状態数 N_ϕ を 10000 , N に関する和の範囲を $N \in [0, 2]$ に制限して計算を行った.

6.2.3 結果

図 6.1 に βS_{xy} と σ_{xy} の数値計算結果を Landau 準位占有率 ν の関数としてプロットした. 両者が同じスケールでプロットできるように, 縦軸の単位はそれぞれ $-e^2/h \times I_\beta(\omega_c)$, $-e^2/h$ にとった.

結果を見ると, σ_{xy} の ν 依存性は, 不純物がない系における線形な振る舞いとはかけ離れていることがわかる. $\nu = 0$ 付近では $\sigma_{xy} = 0$, $\nu = 1$ 付近では $\sigma_{xy} = -e^2/h$ のプラトーが現れている. これは 5 章で説明した整数量子ホール効果にほかならない. このプラトーは Hall 伝導度に局在状態が寄与しないこと, 強磁場中の

乱れた二次元電子系では Landau 準位中心付近以外のすべての状態が局在していること、が原因で生じるのであった。無限系では、非局在状態は Landau 準位中心の一状態しか存在しないため、絶対零度において σ_{xy} は $\nu = 0.5$ を境にステップ関数的に変化する。しかし図 6.1 は有限温度・有限サイズ系の結果であるため、プラトー構造がなめらかに変化している。

一方、 βS_{xy} は ν に対してほぼ線形に増加していることがわかる。これは SCBA による計算結果 (図 2.2) と、 $\nu = 0, 1$ では値がほとんど一致しており、全領域で大きさのオーダーが一致している。しかし、それらの ν 依存性は定性的には大きく異なっている。この違いの原因は、前述の通り、2 章で用いた SCBA が局在の影響を記述できないことにある。数値計算結果 $(\nu_i, \beta S_{xy}(\nu_i))$ における βS_{xy} と ν の比例関係を定量的に評価するため、最小二乗法を用いて回帰直線

$$f(\nu) = a \times \nu \quad (6.2.13)$$

によりフィッティングを行った。その結果、次の表 6.1 のような非常に高い精度で線形フィッティングできることがわかった。

ϵ	R^2	$a(-e^2/h \times I_\beta(\omega_c))$	δa
0.1	0.9997	0.9945 ± 0.0001	0.006
0.2	0.9987	0.9877 ± 0.0001	0.013
0.3	0.9969	0.9797 ± 0.0002	0.020
0.4	0.9945	0.9720 ± 0.0002	0.028

表 6.1 ϵ は系のパラメータ、 R^2 は線形フィッティングの精度の指標である決定係数、 δa はフィッティング関数の傾き a と $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ の傾き a_0 の相対誤差。

表中のすべての ϵ に対して、フィッティング関数の比例係数 a が $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ の傾き $a_0 \equiv -e^2/h \times I_\beta(\omega_c)$ にほぼ等しく、それらの相対誤差が $\delta a = |a - a_0|/a_0$ が 10^{-2} 程度になっている。またフィッティング関数と数値計算結果の間の決定係数

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_i (\beta S_{xy}(\nu_i) - f(\nu_i))^2}{\sum_i (\beta S_{xy}(\nu_i) - \overline{\beta S_{xy}(\nu_i)})^2} \quad (6.2.14)$$

もほぼ 1 に等しくなっている。ここで $\overline{\beta S_{xy}(\nu_i)}$ は $\beta S_{xy}(\nu_i)$ の平均値である。この結果は βS_{xy} は σ_{xy} とは対照的に、不純物散乱による状態の局在化の影響をほとんど受けないことを示している。また βS_{xy} が ν に対して線形に増加していることから、局在状態も非局在状態も同程度に寄与すること、つまり、すべての状態の D_α が同程度だとわかった。

6.3 考察

本節では、なぜ βS_{xy} は σ_{xy} と比べて不純物散乱の影響を受けないのか、という問題について、二次元電子系の物性と相関関数の性質から解析的な理解を得ることを目的とする。そのため前節までと同様に式 (6.2.12) を満たす低温強磁場領域を考察する。また化学ポテンシャル μ が不純物散乱により太った N 番目の Landau 準位上にあることを仮定する。

6.3.1 $\text{Im}\sigma_{xy}$ を用いた σ_{xy} の変形

βS_{xy} について議論するための準備として、まずは σ_{xy} について再考する。 σ_{xy} は $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ を用いて

$$\sigma_{xy} = \mathcal{K}\mathcal{K} [\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)] \quad (6.3.1)$$

と書き直すことができる。ここで

$$\mathcal{K}\mathcal{K}[A(\omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\mathcal{P}}{\omega - \omega'} A(\omega') \quad (6.3.2)$$

は $A(\omega)$ の Kramers-Kronig 変換の略記である。被積分関数の $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ は $\text{Re}\sigma_{L(R)}(\omega)$ の線形結合で書けることから、散逸と直結しているため、このように書き直しておくことで物理を把握しやすくなる。

不純物が存在しない系では、 $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ は $\omega = \pm\omega_c$ に鋭いピークを持つ (サイクロトロン共鳴)。具体的表式は式 (3.2.21), (4.2.18) から

$$\text{Im}\sigma_{xy}^{(\text{pure})}(\omega) = -\frac{e^2\omega_c^2}{4\omega} \nu (\delta(\hbar\omega + \hbar\omega_c) + \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_c)) \quad (6.3.3)$$

と求まる。系に不純物による乱れが加わると、上記の構造は中心 $\omega = 0, \pm\omega_c, \pm 2\omega_c, \dots$, かつ幅 $\mathcal{O}(\Gamma/\hbar)$ の多数の構造に分割される。そこで $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ を次のように分ける。

$$\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega) = \text{Im}\sigma_{xy}(\omega)\theta(\omega_c/2 - |\omega|) \quad (6.3.4)$$

$$\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega) = \text{Im}\sigma_{xy}(\omega)\theta(|\omega| - \omega_c/2) \quad (6.3.5)$$

$\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega)$ は同一の Landau 準位内の遷移 (intra Landau level transition) による寄与、 $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega)$ は異なる Landau 準位間の遷移 (inter Landau level transition) による寄与を表している。さらに σ_{xy} の $\sigma_{xy}^{(\text{pure})}$ からのずれ

$$\Delta\sigma_{xy} \equiv \sigma_{xy} - \sigma_{xy}^{(\text{pure})} \quad (6.3.6)$$

も

$$\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}} \equiv \mathcal{K}\mathcal{K} [\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega)] \quad (6.3.7)$$

$$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}} \equiv \mathcal{K}\mathcal{K} [\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega) - \text{Im}\sigma_{xy}^{(\text{pure})}(\omega)] \quad (6.3.8)$$

と分割する。ここで不純物が無い系ではバンド内遷移が生じず、 $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega)$ が消えることを用いた。

図 6.2 に $\Delta\sigma_{xy}, \Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ と $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ の数値計算結果を ν の関数としてプロットした。結果を見ると次の関係が成立していることがわかる。

$$|\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}| \ll |\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}| \quad (6.3.9)$$

$$\Delta\sigma_{xy} \simeq \Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}} \quad (6.3.10)$$

この関係が成立する理由は次の通りである。

不純物散乱を考慮すると $\text{Im}\sigma_{xy}^{(\text{pure})}(\omega)$ の δ 関数型のピーク構造が有限の幅を持つようになる。またバンド内遷移が許されるようになることから、バンド間遷移の振動子強度が減衰する。これらの効果を考慮すると、 $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ を次のように見積もることができる (計算の詳細は付録 B.1 参照)。

$$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}} = \mathcal{O}\left(\epsilon \times \frac{e^2}{h}\right) \quad (6.3.11)$$

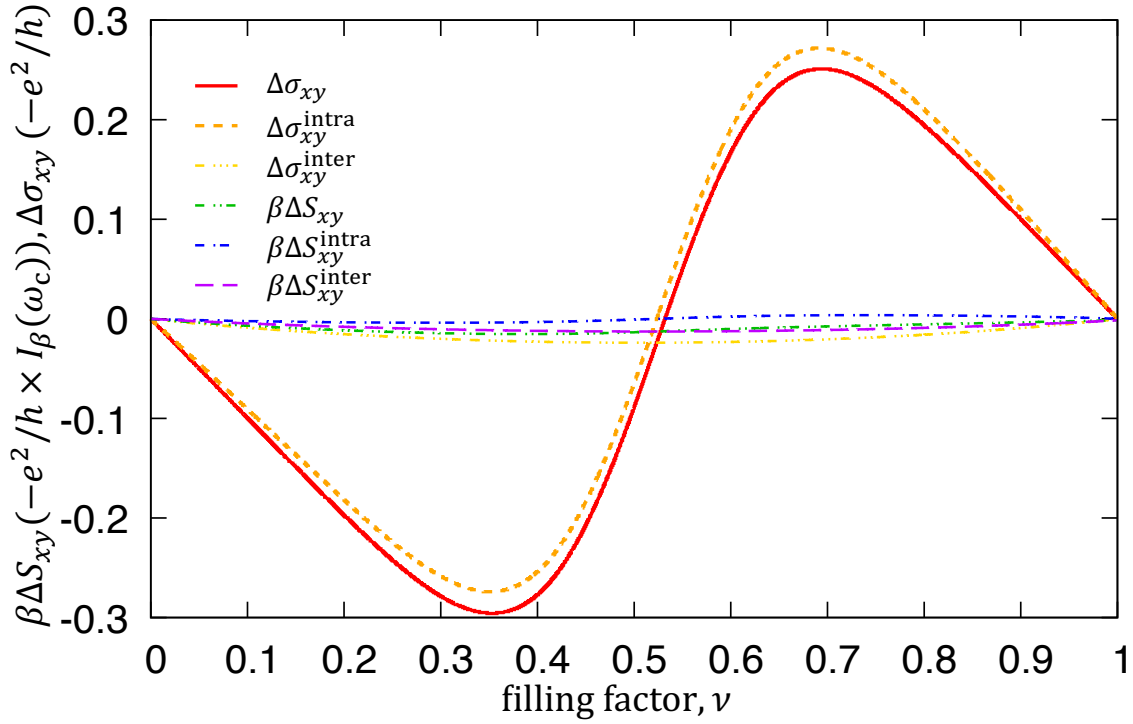


図 6.2 論文 [98] の FIG.2. 数値計算により得られた $\Delta\sigma_{xy}$ (赤), $\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ (橙) と $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ (黄) を ν の関数としてプロットしたグラフ. パラメタは $\epsilon = 0.2$, $k_B T = \hbar\omega_c/250$ にとった. 同じパラメタにおける $\beta\Delta S_{xy}$ (緑), $\beta\Delta S_{xy}^{\text{intra}}$ (青) と $\beta\Delta S_{xy}^{\text{inter}}$ (紫) の数値計算結果もプロットした.

この評価は図 6.3(a) に示した数値計算結果と整合している. 一方, 量子ホール効果が起きているとき, $\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ には ϵ に依存しない寄与が存在することが知られている (5 章参照). つまり

$$\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}} = \mathcal{O}\left(\epsilon^0 \times \frac{e^2}{h}\right) \quad (6.3.12)$$

である (計算の詳細は付録 B.2 参照). この評価も図 6.3(b) に示した数値計算結果と整合している. よって我々が考察対象としている低温強磁場領域では関係式 (6.3.9), (6.3.10) が成立する.

6.3.2 $\text{Im}\sigma_{xy}$ を用いた βS_{xy} の変形

次に非対角電流ゆらぎを考察する. βS_{xy} は $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ を用いて

$$\beta S_{xy} = \mathcal{K}\mathcal{K}[I_\beta(\omega)\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)] \quad (6.3.13)$$

と書くことができる. 前小節の議論に習って, βS_{xy} の $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ からのずれ

$$\beta\Delta S_{xy} \equiv \beta S_{xy} - \beta S_{xy}^{(\text{pure})} \quad (6.3.14)$$

$$= \mathcal{K}\mathcal{K}[I_\beta(\omega)\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)] \quad (6.3.15)$$

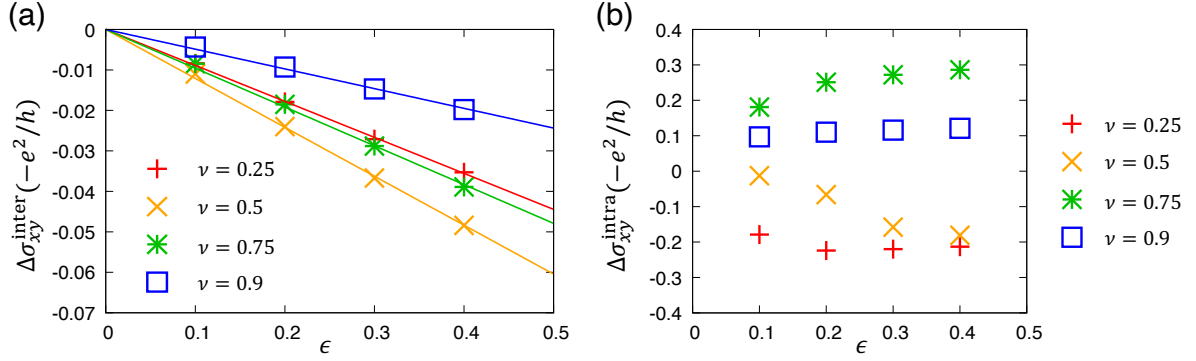


図 6.3 論文 [98] の FIG.3. (a) $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$, (b) $\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ の数値計算結果を ϵ の関数としてプロットしたグラフ. (a) 中の実線は結果を線形フィットしたものである. パラメタは $k_B T = \hbar\omega_c/250$, $\nu = 0.25$ (赤), 0.5 (橙), 0.75 (緑), 0.9 (青). $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ はほぼ ϵ に比例しているが, $\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ には ϵ の 0 次の寄与が現れている.

を次のように分ける.

$$\beta\Delta S_{xy}^{\text{intra}} \equiv \mathcal{K}\mathcal{K} [I_\beta(\omega)\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega)] \quad (6.3.16)$$

$$\beta\Delta S_{xy}^{\text{inter}} \equiv \mathcal{K}\mathcal{K} [I_\beta(\omega) \{ \text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega) - \text{Im}\sigma_{xy}^{(\text{pure})}(\omega) \}] \quad (6.3.17)$$

$|\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega)|$ はサイクロトロン共鳴により, $\omega \simeq \pm\omega_c$ において最大値を取るため, $\beta\Delta S_{xy}^{\text{inter}}$ は

$$\beta\Delta S_{xy}^{\text{inter}} \simeq I_\beta(\omega_c) \mathcal{K}\mathcal{K} [\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega) - \text{Im}\sigma_{xy}^{(\text{pure})}(\omega)] \quad (6.3.18)$$

$$= I_\beta(\omega_c) \Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}} = \mathcal{O}\left(\epsilon \times \frac{e^2}{\hbar} I_\beta(\omega_c)\right) \quad (6.3.19)$$

と見積もることができる. ここで式 (6.3.11) を用いた. この評価は数値計算結果 (図 6.4(a)) と整合している. また $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega)$ は $\omega = 0$ を中心とした幅 Γ の構造だから, $\omega = \mathcal{O}(\Gamma/\hbar)$ において, その絶対値が最大となる. この事実から $\beta S_{xy}^{\text{intra}}$ を

$$\beta\Delta S_{xy}^{\text{intra}} \simeq I_\beta(\mathcal{O}(\Gamma/\hbar))\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}} \quad (6.3.20)$$

$$\simeq \mathcal{O}(\beta\Gamma)\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}} = \mathcal{O}\left(\epsilon \times \frac{e^2}{\hbar} I_\beta(\omega_c)\right) \quad (6.3.21)$$

と見積もることができる. ここで式 (2.4.16), (6.3.12) を用いた. この評価も数値計算結果 (図 6.4(b)) と整合している.

これまでに得られた式 (6.3.19), (6.3.21) から,

$$\frac{\beta\Delta S_{xy}}{\beta S_{xy}^{(\text{pure})}} = \mathcal{O}(\epsilon) \quad (6.3.22)$$

が得られる. つまり, 我々が考察しているような強磁場領域においては βS_{xy} が $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ からほとんど変化を受けないのである. そしてこれは, 式 (6.3.11), (6.3.12) から得られる

$$\frac{\Delta\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^{(\text{pure})}} = \mathcal{O}(\epsilon^0) \quad (6.3.23)$$

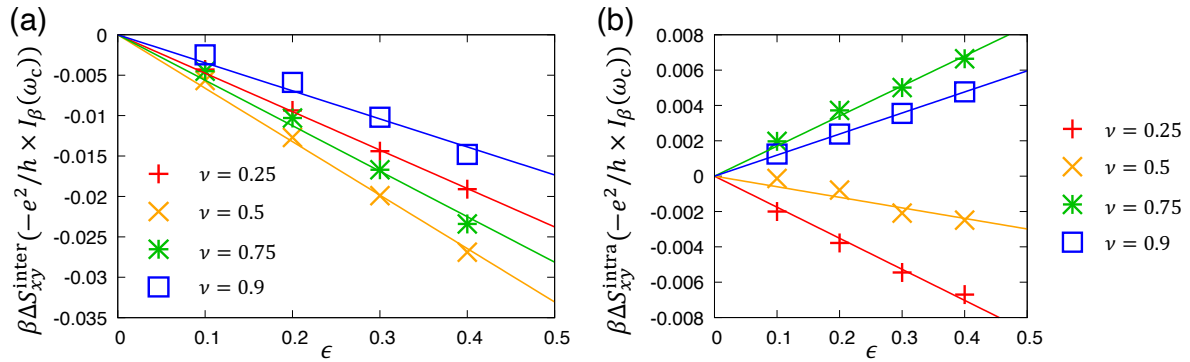


図 6.4 論文 [98] の FIG.4. (a) $\beta\Delta S_{xy}^{\text{inter}}$, (b) $\beta\Delta S_{xy}^{\text{intra}}$ の数値計算結果を ϵ の関数としてプロットしたグラフ. 実線は結果を線形フィットしたものである. パラメタは $k_{\text{B}}T = \hbar\omega_c/250$, $\nu = 0.25$ (赤), 0.5 (橙), 0.75 (緑), 0.9 (青). 両者ともにほぼ ϵ に比例している.

とは対照的である. ϵ に依らず, σ_{xy} は $\sigma_{xy}^{\text{(pure)}}$ から変化を受けるのである. これらの結果は βS_{xy} が σ_{xy} に比べて不純物散乱の影響を受けないことの解析的な理解を与えている.

なお本節で用いた手法は任意の系で成立する相関関数の解析的性質と電子間相互作用の有無に依らずに成立する二次元電子系の物性のみを用いたものである. よって, 本節の議論により, 非対角電流ゆらぎの電子局在への頑健性は, 我々が数値計算をおこなったモデルに限定されるものではなく, 電子間相互作用のある一般の系に対して成立するということが明らかになった.

6.4 応用の可能性

本節では、前節で得られた結果の応用法及び関連する注意事項について説明する。

6.4.1 電子数密度推定

4.1.5 節で説明したように、古典系では Hall 伝導度が電子数密度 n に比例する。そしてその性質は Hall 抵抗の測定結果から電子数密度 n を推定するために広く用いられているのであった [82]。しかし、我々が着目したような低温強磁場領域では量子効果が強く現れ、ホール伝導度のふるまいが古典的なふるまいから大きく変化してしまう (図 6.1 参照)。このときの σ_{xy} の値は、プラトー領域では n に無関係になり、それ以外の領域では n に非線形に依存する。そのため、4.1.5 節で説明した古典的な方法では、低温強磁場領域にある試料の電子数密度 n を正しく推定することができない。よってこの領域でも n を正しく推定可能な新たな手法が必要である。

図 6.1 および表 6.1 に示した我々の結果は、このような低温強磁場領域において βS_{xy} が ν に非常に高い精度で比例することを明らかにした。また βS_{xy} は不純物散乱による状態の局在に対して非常に鈍感であり、不純物が無い系におけるふるまい $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ と比べてほとんど変化しないことも示している。この性質を使うことにより、 βS_{xy} の測定結果から Landau 準位占有率 ν を推定することができる。具体的には、ゆらぎは不純物が無い系からほとんど変化しないため、 βS_{xy} と ν は近似的に式 (6.2.2) の関係にあるとみなすことができる。そこで βS_{xy} の測定結果を式 (6.2.2) の $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ に代入することにより

$$\nu \simeq \frac{\beta S_{xy}}{-e^2/h \times I_\beta(\omega_c)} \quad (6.4.1)$$

と占有率 ν が推定できるのである。この推定の誤差 $\delta\nu$ は $\beta\Delta S_{xy} = \beta S_{xy} - \beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ を用いて次のように書ける。

$$\delta\nu = \frac{1}{e^2/h \times I_\beta(\omega_c)} \sqrt{(\beta\Delta S_{xy})^2} = \mathcal{O}(\epsilon) \quad (6.4.2)$$

なお最後の式変形には、前節で導いた式 (6.3.19), (6.3.21) を用いた。これは ϵ が小さいほど、 ν を正しく推定できることを示している。また我々の数値計算結果 (図 6.4) から計算した $\delta\nu$ は

$$\delta\nu \simeq 10^{-2} \quad (6.4.3)$$

となっており、これは $\epsilon \simeq 10^{-1}$ よりもさらに一桁小さくなっている。我々の数値計算は低温 $T \sim 1\text{K}$ 、強磁場 $B \sim 10\text{T}$ 中にある、有効質量 $m \sim 10^{-1}m_e$ (m_e は自由電子の質量)、移動度 $\mu \sim 10^4\text{cm}^2/\text{Vs}$ の典型的な GaAs-AlAs ヘテロ接合中の二次元電子系を想定している。そのため、量子ホール効果関連の実験で用いられる現実的な試料でも、式 (6.4.3) のような非常に高い精度で、 βS_{xy} の測定結果から ν を推定することができる。

さらに ν と n は $n = 2\pi l^2\nu$ の関係で結びついていることから、 ν の推定値から n を推定することもできる。この新しい電子数密度推定の方法は、さまざまな応用に役立つと期待している。

6.4.2 βS_{xy} の測定に関する注意

我々が計算した βS_{xy} は式 (3.1.17) で定義される巨視的な系のバルク領域における電流のゆらぎである。一方、Büttiker を代表とした数多くの研究者により、メゾスコピックな試料に接続された熱粒子浴における電流

ゆらぎが広く研究されている [19–22]. 後者の理論では, 試料は熱粒子浴から入射した電子を別の熱粒子浴へと散乱する散乱体として扱われる. これらの 2 つの理論は, 対照的な物理的仮定の下で異なる位置における電流ゆらぎを計算しているため両者の結果は一般には異なっている. FDT に関する結果に着目すると, バルクのゆらぎはバルクの伝導度 (と温度の積) よりもはるかに大きくなり得るのに対して [66], 端子間のゆらぎはどの端子間に着目しても, 着目した端子間のコンダクタンス (と温度の積) 程度の大きさになることが示されている [19]. どちらの理論も実験的に検証することが重要だが, Büttiker の理論 [19] に対応する実験 [20–22] は存在する一方で, 我々の理論 [66, 98] に対応するバルク領域の βS_{xy} の測定実験は行われていない.

二次元電子系はその境界にバルク状態とは大きく性質の異なるエッジ状態が存在することが知られている. そのためバルク領域のゆらぎを測定するためには, この特異的な試料端との接触を避け, 試料に端子を接続せずに試料内部の電流を測定可能な測定器を用いるのが一つの方法だと考えられる. このようなタイプの測定器としては, 試料の発する磁場から非接触で電流を測定する電流変成器や Rogowski コイルなどが挙げられる [100]. これらの測定器の発展がバルク領域の βS_{xy} の測定を可能にすると期待している. そしてその測定結果は, FDT の巨視的破れ [66] の実験的実証や新たな電子数密度推定手法 [98] の実用化など, さまざまな発展をもたらすことが期待できる.

また我々が考察したのは準古典測定により得られるゆらぎであった. 準古典測定は参考文献 [64, 65] で定義された条件を満たす一般的な測定であり, 様々な方法により実現が可能であると考えられる. 例えば Koch 等により行われた, ジョセフソン接合を用いた対角電流ゆらぎのヘテロダイン測定の結果は, 準古典測定により得られる理論的な対角電流ゆらぎと一致し, 周波数の増大に伴い線形に増大することが確認されている [63]. その他にも, 着目系と測定器の間のエネルギー流を担うボソンの吸収測定 [54, 55] では検出できない零点振動を, ジョセフソン接合をミキサーとして用いることにより検出したという報告がなされている [56, 57, 59]. そのためヘテロダイン技術により準古典測定が実現可能だと期待している.

第Ⅳ部

まとめ

第7章

結論

7.1 まとめ

不純物が存在する巨視的な二次元電子系のバルク領域における平衡電流ゆらぎの性質について研究した。物理量のゆらぎは一般には測定の方法に強く依存するが、本研究では測定の方法の詳細に依らない普遍的な結果に着目し、理想的な古典測定を不確定性原理の範囲内で可能な限り模倣した測定(準古典測定)により得られる平衡電流ゆらぎを考察対象とした。このようなゆらぎは系や測定の詳細に依存せず、電流演算子の対称化積相関(式(6.1.1))で与えられることが知られている。

まず不純物ポテンシャルの形を限定しない一般的な二次元電子系において、電流ゆらぎが次の性質を持つことを厳密な解析計算により示した。

- 対角電流ゆらぎ $S_{xx}(0)$ には化学ポテンシャル近傍の非局在状態のみが寄与する(式(6.1.3))。
- 非対角電流ゆらぎ $S_{xy}(0)$ には化学ポテンシャル以下の、局在状態を含む全状態が寄与する(式(6.1.8))。

前者は対角伝導度 σ_{xx} のよく知られた結果と同様である。それに対して後者は、化学ポテンシャル以下の非局在状態のみが寄与するという $\sigma_{xy}(0)$ のよく知られた結果と対照的である。またこの性質は $\beta S_{xy}(0)$ が $\sigma_{xy}(0)$ に一致するという古典的な FDT とは、定性的にも大きく異なっている。

さらに $S_{xy}(0)$ への局在状態の寄与を定量的に評価するため、不純物散乱が短距離型のポテンシャルで記述される系において、電流ゆらぎの占有率依存性を数値的に計算した。その結果、 $\Gamma/\hbar\omega_c \ll 1$, $\beta\hbar\omega_c \gg 1$ を満たす低温強磁場領域において、 $S_{xy}(0)$ が Landau 準位占有率 ν に対してほぼ線形に増加することを発見した(図 6.1)。この振る舞いは、不純物が無い系における厳密な比例関係(式(6.2.2))と比較して、表 6.1 に示したようなごく僅かな違いしかない。つまり、 S_{xy} は低温強磁場下では不純物散乱の影響をほとんど受けない物理量になっていることがわかった。これは σ_{xy} が不純物の有無により大きく変化することと対照的である。このような違いが現れる理由が、相関関数の性質と二次元電子系のスペクトル構造から理解できることも示した。具体的な数値計算で設定したパラメータは、有効質量 $m \sim 10^{-1}m_0$ (m_0 は電子の静止質量)、移動度 $\mu_e \sim 10^4 \text{cm}^2/\text{Vs}$ の典型的な GaAs-AlAs ヘテロ接合中の二次元電子系を温度 $T \sim 1\text{K}$ 程度まで冷やし、外部磁場 $B \sim 10\text{T}$ をかけた状況に対応する。つまり、我々の計算結果は、量子ホール効果を観測するための典型的な設定において実現していると考えられる。

さらに、この S_{xy} の ν に対する線形的振る舞いを、Landau 準位占有率 ν および電子数密度 n の推定へと応用する提案を行った。これまでの標準的な手法は、 σ_{xy} が n に比例するという古典的な関係を用いて電子数密度を推定するものであった。そのため量子効果により σ_{xy} と n の比例関係が大きく破綻する低温強磁場領域

では正しい結果を与えないことが欠点となっていた。しかし、我々が新たに提案した手法は低温強磁場であるほど高精度の推定が可能であり、従来の手法の欠点を補うことができる。整数量子ホール効果の観測が行われるような典型的な設定において、数 % 程度の誤差で電子数密度を推定することができるため、非常に実用的であり、様々な応用へとつながることが期待される。

7.2 今後の展望

最後に、今後の展望・課題について述べ、本論文の結びとする。

7.2.1 電流ゆらぎの位置依存性測定位置依存性の解明

まず、端のある巨視的な二次元電子系における電流ゆらぎの測定位置依存性を明らかにしたい。本論文で議論した電流ゆらぎは周期境界条件を課した巨視的な試料全体で空間平均をとった電流のゆらぎである。通常、試料が巨視的である限り、測定位置依存性が現れないこのような物理量を計算対象とすることが多い。しかし、端が存在し、量子ホール状態にある孤立した試料では、試料内部（バルク領域）では正味の電流は流れていないものの、試料端（エッジ領域）に沿って環状のエッジ電流が流れていることが知られている [74–78]。つまり、バルク領域とエッジ領域の電流期待値は大きく異なっているのである [78]。そのため電流ゆらぎも測定位置に大きく依存するはずであり、その依存性について具体的に明らかにする必要があると考えている。

特に次のような予測を立てており、量子ホール状態にある端のある巨視的な試料における数値計算により、その検証に取り組んでいる。

- エッジ領域を含めた試料全体で空間平均をとった電流のゆらぎと、バルク領域だけで空間平均をとった電流のゆらぎは一致する。
- エッジ領域の電流ゆらぎはバルク領域の電流ゆらぎとは大きく異なる。そしてエッジ領域における電流ゆらぎ・電気伝導度はメゾ系に接続された端子におけるそれぞれの値に一致する。

前者は試料が巨視的な限り、全系に対してエッジ領域が占める割合は無視できるほど小さいため、端の影響は無視できるという巨視系の理論の通常の見解である。これまでに行った数値計算により、試料面積の半分程度（以上）の領域で空間平均をとった電流のゆらぎが、全系で空間平均をとった電流のゆらぎ程度になる、という結果（図 7.1）が得られており、この予測が正しいことは確かめられてきた。そのため 6.4 節で説明した、試料の端に端子をつないで電流を測定するのではなく、非接触で試料の内部の電流を測定することができれば、我々が示したような巨視系における FDT の破れ [66] が観測できるという予測の後ろ盾が出来つつある。しかし、位置依存性の導入により、大きな系の計算を行うことがこれまでよりも難しくなったため、現状では試料サイズが小さい場合の計算しかできていない。よってより大きな系で数値計算を行う必要がある。この計算を成功させ、得られた結果を広く発表し、我々が示した巨視系における FDT の破れ [66] の観測実験への大きな動機づけとなることを目指している。

予測の后者は、メゾ系における電流ゆらぎの研究から着想を得たものである [19–21]。このような研究では、系が量子状態のコヒーレンス長よりも小さい場合を想定し、系そのものではなく系に接続された端子における電流の相関を計算する。特に量子ホール状態にある二次元電子系に接続された端子における電流ゆらぎの研究では、試料の端にできたエッジ状態により端子間のコヒーレンスが保たれており、エッジ状態により電子が伝搬されることを想定している。そのため巨視的な試料のエッジ領域における電流ゆらぎは、この手法により得

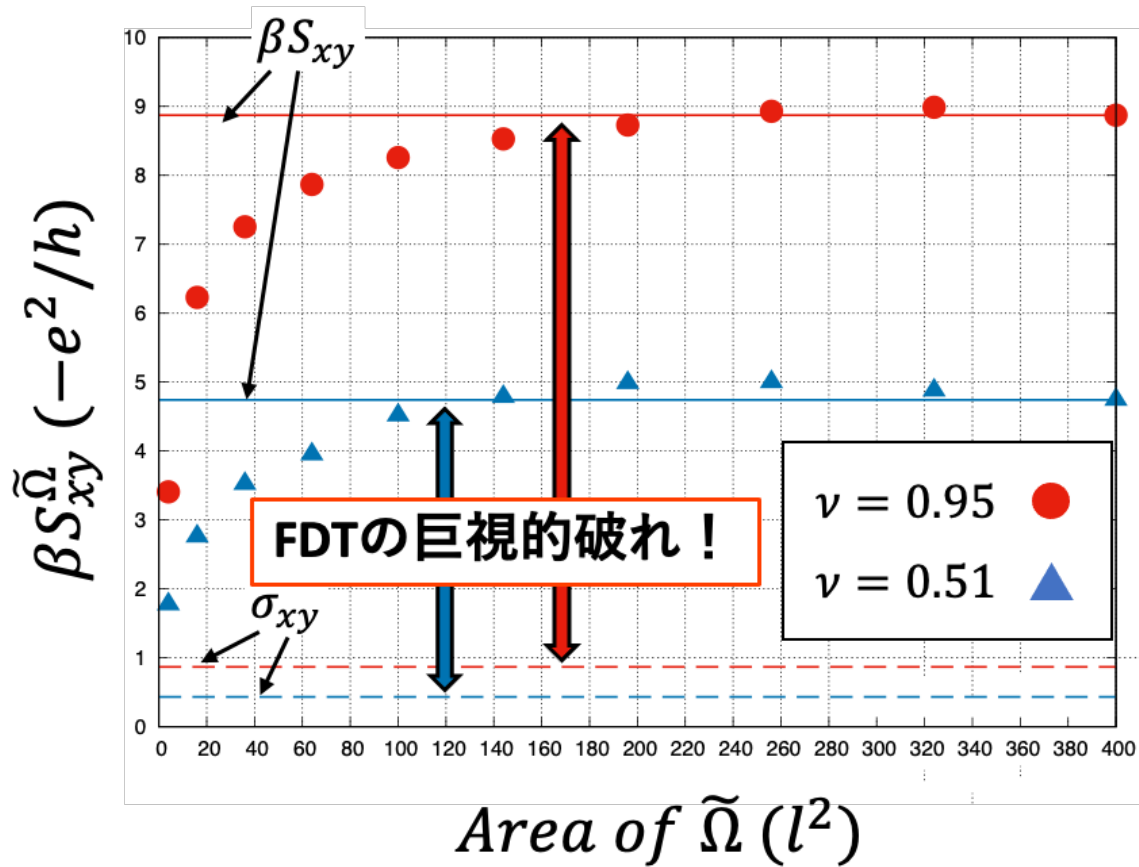


図 7.1 x 方向には閉じ込め, y 方向には周期境界条件を課した 1 辺 $20l$ の円筒形二次元電子系における電流ゆらぎの数値計算結果. 横軸は試料中心に中心を持つ正方形領域 $\tilde{\Omega}$ の面積, 縦軸はその領域において平均をとった電流の非対角ゆらぎ $\beta S_{xy}^{\tilde{\Omega}}$. パラメタは典型的な量子ホール効果の実験に対応している. 試料面積の半分程度 (以上) の領域で平均をとった電流のゆらぎは, 試料全体で平均をとった電流のゆらぎ S_{xy} 程度になっている.

られる電流ゆらぎに一致するのではないかとこの予測に至った. 数値計算の結果, 予測の前半部分であるエッジ領域の電流ゆらぎがバルク領域の電流ゆらぎと随分違うということまでは明らかになってきた. しかし, 予測の後半部分の検証には成功していない. その理由は, メゾ系の理論では主役となるエッジ状態が, 巨視的な理論では非常に扱いづらい対象になっているという点にある. より具体的に述べると, エッジ状態は試料端に沿って無散逸に運動し続ける安定した状態であり, 通常の巨視的な理論が前提としている混合性が成り立っていない, そしてそれ故に電流ゆらぎや電気伝導度の計算結果が δ 関数的に発散してしまう, ということが両者の大きさを比較することを困難にしているのである. 現在 Drude の重みの計算など様々な手法により, 一定の意味ある答えを出せるように試行錯誤している. この問題を解決し, エッジ領域で測った電流ゆらぎや電気伝導度がメゾ系の理論に一致すると示すことをこの研究の大きな目標として見据えている. これができれば, 試料境界に端子をつなぎ, 端子上で測定した電流ゆらぎの測定結果 [22] を, 巨視的な理論の立場からも理解可能になるのではないかと考えている.

7.2.2 様々な電流測定手法に対する理論的理解の獲得

また実際の実験で用いられている様々な電流測定手法が、測定理論的にどのような測定になっているのかに関して明らかにしたい。

電流相関は微視的には着目系のエネルギー放出として記述できる寄与とエネルギー吸収として記述できる寄与から成ることが知られている [54–62]。このエネルギーの吸収、放出をもれなく測り切ることができれば、準古典測定により得られるゆらぎである対称化積相関が得られる。しかし、実際の電流ゆらぎの測定は必ずしもそのような測定にはなっていない。例えば着目系に測定器として LC 共振回路を接続し、両者の間のエネルギーのやり取りによる LC 共振回路の電荷変化から着目系の電流ゆらぎを検出するという測定手法では、着目系のエネルギー吸収による寄与を測定しきることができず、対称化積相関とは異なる相関関数が得られることが理論的に示されている [54, 55]。一方、ジョセフソン接合を用いたヘテロダイン測定を行えば対称化積相関が得られるということを回路理論を用いて示した研究や、それを実験的に確かめた研究も存在する [63]。

電流ゆらぎ測定は上記のようないくつかの個別の手法については理解が得られているが、まだ十分な理解は得られていないと考えている。特に筆者が問題視しているのは、筆者の知る限り電流測定の研究のほとんどが、対角電流ゆらぎに関するものであり、本論文で解析した非対角電流ゆらぎの測定についてはほとんど明らかになっていないという点である。そこでまずは非対角電流ゆらぎの測定結果として対称化積電流相関が得られる測定手法やその具体的なモデルを考案したいと考えている。また低周波数領域における対角電流ゆらぎは、量子ゆらぎよりも熱ゆらぎが支配的であることから、その測定結果は測定手法にほとんど依存しないことが知られているが、同様のことが非対角成分にも言えるのかについても検証するつもりである。試料と非接触に試料内部の電流を測定する方法として知られている Rigowski コイルや計器用変流器など [100] がどういった測定になっているのかについても明らかにしたい。そして、巨視系において普遍的な測定結果を与える測定のクラスとして知られている準古典測定の条件 [64, 65] を満たす電流測定手法についても示したいと考えている。

謝辞

本研究は日本学術振興会科学研究費補助金（19J21816）の助成を受け、筆者が東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程在籍期間に行ったものである。

指導教官の清水明教授には、修士・博士課程を通じて膨大な時間をかけて指導をしていただいた。勉強不足な筆者を辛抱強く見守ったくださり、丁寧な指導をしてくださったこと、心より感謝申し上げたい。

共同研究者であり論文 [66, 98] の共著者である大阪大学全学教育推進機構の浅野建一教授には、研究内容に関して本質的な指摘を何度もいただくとともに数値計算に関する助言を数多く頂いた。また、産業技術総合研究所計量標準総合センターの浦野千春研究グループ長、金子晋久首席研究員に、バルク領域の電流ゆらぎの観測可能性について議論していただいたことは、本研究に着手する大きなきっかけとなった。そして本研究室の全てのメンバーには研究活動のあらゆる場面でお世話になった。特に大阪大学量子情報・量子生命研究センターに着任された箱嶋秀昭特任助教には卒業後も頻繁に議論していただいた。またナビタイムジャパンに就職された藤倉恭太氏が、本研究の先行課題に取り組み興味深い結果 [64, 65] を発見されたことは、私が本研究テーマを選ぶ大きな要因となった。この場をお借りして皆様に深く感謝申し上げたい。

最後に、博士課程修了まで暖かく見守ってくれた父の久保宣夫、いつも筆者を支えてくれた妻の久保陽花里に感謝したい。

付録

付録 A

準古典測定

参考文献 [64, 65] にて導入された準古典測定の定義についてまとめる.

A.1 系と平衡状態に関する仮定

考察対象とする系は次の条件を満たすものとする.

1. 粒子数 N , 次元 $d = 1, 2, 3, \dots$ の巨視系
2. 測定前の状態は温度 T の平衡状態
3. 局所物理量の相関はその物理量の位置 \mathbf{r}, \mathbf{r}' に対して $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d+\epsilon}$ よりも早く減衰する. ここで ϵ は正の定数である. この条件は臨界点を覗いて一般的に成立するものと信じられている. そしてこの条件を満たす限り任意の相加物理量 \hat{A} に対して,

$$\delta A_{\text{eq}} \equiv \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}})^2 \rangle_{\text{eq}}} = \mathcal{O}(\sqrt{N}) \quad (\text{A.1.1})$$

が成立する.

参考文献 [64, 65] ではこれらの他にもいくつかの自然な仮定がなされているため, より厳密に知りたい読者は参考文献 [64] の補足資料を参照して欲しい. これらの条件は, 量子中心極限定理 [83, 84] が成立するための必要十分条件になっている.

A.2 準古典測定の厳密な定義

\hat{A} の測定が準古典測定であるための条件は次の 5 つを満たすことである.

1. 不偏性条件

準古典測定による測定結果の期待値 $\overline{A_\bullet}$ が平衡期待値に一致していること, つまり

$$\overline{A_\bullet} = \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} \quad (\text{A.2.1})$$

を満たすこと. ここで $\overline{A_\bullet}$ は測定結果 A_\bullet を得る確率 $P(A_\bullet)$ を用いて

$$\overline{A_\bullet} = \sum_{A_\bullet} P(A_\bullet) A_\bullet \quad (\text{A.2.2})$$

と書くことができる. $P(A_\bullet)$ は POVM \hat{E}_{A_\bullet} の平衡期待値になっている.

2. 測定誤差

測定誤差が平衡ゆらぎより小さいこと.

$$\delta A_{\text{err}} = \epsilon \delta A_{\text{eq}} \quad (\text{A.2.3})$$

$$\epsilon < 1 \quad (\text{A.2.4})$$

3. 最小擾乱測定

測定演算子 $\hat{f}(A_\bullet)$ が, 同じ POVM \hat{E}_{A_\bullet} を与えるものの中で最も小さい擾乱しかあたえないこと. その必要十分条件は

$$\hat{f}(A_\bullet) = \sqrt{\hat{E}_{A_\bullet}} \quad (\text{A.2.5})$$

を満たすことである.

4. 均一な測定

\hat{E}_{A_\bullet} は \hat{A} および A_\bullet に $\hat{A} - A_\bullet$ のみを通して依存すること. この仮定は δA_{err} が A_\bullet に依存しないことなど, 測定が自然な性質を満たすことを保証する.

1-4 を満たすとき測定演算子は

$$\hat{f}_{A_\bullet} = M(\hat{A} - A_\bullet) \quad (\text{A.2.6})$$

と書ける. ここで $M(x)$ は非負の関数である. 測定誤差 δA_{err} はこの関数を用いて

$$\delta A_{\text{err}}^2 = \int x^2 |M(x)|^2 dx \quad (\text{A.2.7})$$

と計算できる.

5. $M(x)$ の解析性

$M(x)$ が $|x| \rightarrow \infty$ で速やかに減衰するなど, 解析的に良い性質を持つこと. より詳しい条件は [64] の補足資料を参照.

上記の条件を満たす典型的な例としてはガウス関数型の測定演算子

$$M(x) = \frac{1}{(2\pi w^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4W^2}\right), \quad W = O(\sqrt{N}) > 0 \quad (\text{A.2.8})$$

$$\hat{f}_{A_\bullet} = M(\hat{A} - A_\bullet) = \frac{1}{(2\pi W^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(\hat{A} - A_\bullet)^2}{4W^2}\right] \quad (\text{A.2.9})$$

が挙げられる.

付録 B

$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter,intra}}$ の大きさのオーダーの見積もり

B.1 $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ の大きさのオーダー

$\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ の大きさのオーダーについて議論するため, $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega)$ が不純物が無い系における $\text{Im}\sigma_{xy}^{(\text{pure})}(\omega)$ からどのように変化するかを考える. ずれ方には次の 2 種類が存在する.

B.1.1 スペクトルの広がり

1 つ目は不純物散乱によりスペクトルが広がったことによるずれである. この効果について評価するため, まずは $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega)$ が次のように $\omega = \pm\omega_c$ に対称に広がった場合を考える.

$$\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter,sym}}(\omega) = -\frac{e^2\omega_c^2}{4\omega}\nu(\Delta^{\text{sym}}(\hbar\omega + \hbar\omega_c) + \Delta^{\text{sym}}(\hbar\omega - \hbar\omega_c)). \quad (\text{B.1.1})$$

ここで $\Delta^{\text{sym}}(x)$ は次の条件を満たす正の関数である.

$$\Delta^{\text{sym}}(x) = \Delta^{\text{sym}}(-x) \text{ for } \forall x, \quad (\text{B.1.2})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Delta^{\text{sym}}(x) = 1, \quad (\text{B.1.3})$$

$$\int_{|x|\geq y} dx \Delta^{\text{sym}}(x) \ll 1 \text{ for } \forall y \gg \Gamma. \quad (\text{B.1.4})$$

式 (B.1.1) を式 (6.3.8) に代入すると, スペクトルが対称に広がったことの $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ への寄与が $\mathcal{O}(\epsilon^2 \times e^2/h)$ であることがわかる.

次に $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega)$ が以下のように $\omega = \pm\omega_c$ に非対称に広がった場合を考える.

$$\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter,asym}}(\omega) = -\frac{e^2\omega_c^2}{4\omega}\nu(\Delta^{\text{asym}}(\hbar\omega + \hbar\omega_c) + \Delta^{\text{asym}}(\hbar\omega - \hbar\omega_c)). \quad (\text{B.1.5})$$

ここで $\Delta^{\text{asym}}(x)$ は次の条件を満たす正の関数である.

$$\Delta^{\text{asym}}(x) \neq \Delta^{\text{asym}}(-x) \text{ for } \exists x, \quad (\text{B.1.6})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Delta^{\text{asym}}(x) = 1, \quad (\text{B.1.7})$$

$$\int_{|x|\geq y} dx \Delta^{\text{asym}}(x) \ll 1 \text{ for } \forall y \gg \Gamma. \quad (\text{B.1.8})$$

式 (B.1.5) を式 (6.3.8) に代入すると、スペクトルが非対称に広がったことの $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ への寄与は $\mathcal{O}(\epsilon \times e^2/h)$ であることがわかる。

これらの結果から、 $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ へのスペクトルの広がりへの寄与は高々 $\mathcal{O}(\epsilon \times e^2/h)$ であることがわかる。

B.1.2 スペクトルの損失

もう1つはバンド内遷移が許されたことによりバンド間遷移のスペクトルに損失が生じることによるずれである。この影響について考えるためには、次のモーメント総和即が便利である。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}(\omega) = \frac{ne^2}{m} = \frac{e^2}{h}\omega_c\nu. \quad (\text{B.1.9})$$

ここで

$$\text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}(\omega) := \text{Re}\sigma_{xx}(\omega) \pm \text{Im}\sigma_{xy}(\omega) \quad (\text{B.1.10})$$

という量は左 (L) そして右 (R) 周りに回転した電場の吸収スペクトルに比例する物理量になっている。この表式も、式 (6.3.4) や式 (6.3.5) で行ったように、ステップ関数 $\theta(x)$ を用いて intra 成分と inter 成分へと分解を行う。

$$\text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}^{\text{intra}}(\omega) = \text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}(\omega)\theta(\omega_c/2 - |\omega|), \quad (\text{B.1.11})$$

$$\text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}^{\text{inter}}(\omega) = \text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}(\omega)\theta(|\omega| - \omega_c/2). \quad (\text{B.1.12})$$

相関関数の性質より $\text{Re}\sigma_{xx}^{\text{intra}}(\omega)$ は偶関数、 $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{intra}}(\omega)$ は奇関数である。また $\text{Re}\sigma_{xx}^{\text{intra}}(\omega)$ は $\omega = 0$ を中心に幅 $\mathcal{O}(\Gamma/h)$ 程度の構造を持つことが知られている [81, 97]。そしてバンド内遷移は化学ポテンシャルがかかっている Landau 準位内の状態により生じるものであるため、 $\text{Re}\sigma_{xx}^{\text{intra}}(\omega)$ の典型値は $\hbar\omega_c$ 、そして ϵ とは無関係である。これらの事実から次の関係式が得られる。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}^{\text{intra}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Re}\sigma_{xx}^{\text{intra}}(\omega) \\ &\simeq \mathcal{O}\left(\epsilon^0 \times \frac{e^2}{h}\right) \times \mathcal{O}\left(\frac{\Gamma}{h}\right) > 0. \end{aligned} \quad (\text{B.1.13})$$

更にこの表式と式 (B.1.9)、(B.1.11) 及び (B.1.12) を組み合わせることにより

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Re}\sigma_{\text{L(R)}}^{\text{inter}}(\omega) = \frac{e^2}{h}\omega_c\nu(1 - \mathcal{O}(\epsilon)), \quad (\text{B.1.14})$$

が得られる。この結果を不純物がない場合の式 (B.1.9) と比較すると、バンド内遷移の出現により、バンド間遷移の振動子強度が $\mathcal{O}(\epsilon)$ だけ減少していることがわかる。この効果は $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{inter}}(\omega)$ の大きさを $\text{Im}\sigma_{xy}^{\text{(pure)}}(\omega)$ から $\mathcal{O}(\epsilon \times e^2/h)$ だけ変化させる。この事実と式 (6.3.8) から、スペクトルの損失による $\Delta\sigma_{xy}$ への寄与が $\mathcal{O}(\epsilon \times e^2/h)$ だとわかる。

B.1.3 $\Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ の推定

ここまでスペクトルの広がり損失により σ_{xy} が $\sigma_{xy}^{\text{(pure)}}$ からずれることを説明した。前者によるずれは高々 $\mathcal{O}(\epsilon \times e^2/h)$ 、後者によるずれは $\mathcal{O}(\epsilon \times e^2/h)$ である。両方の効果を考慮することにより、式 (6.3.11) を得る。

B.2 $\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}}$ の大きさのオーダー

量子ホール効果のプラトー領域において, σ_{xy} の値は物理定数のみによって決定される. つまり, その値は ϵ とは無関係であり, 次のように書ける.

$$\Delta\sigma_{xy} = \mathcal{O}\left(\epsilon^0 \times \frac{e^2}{h}\right). \quad (\text{B.2.1})$$

この式と式 (6.3.11) を $\Delta\sigma_{xy}^{\text{intra}} = \Delta\sigma_{xy} - \Delta\sigma_{xy}^{\text{inter}}$ に代入することにより, 式 (6.3.12) を得る.

参考文献

- [1] A. Einstein. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Annalen der Physik*, Vol. 322, No. 8, pp. 549–560, 1905.
- [2] J. B. Johnson. Thermal agitation of electricity in conductors. *Phys. Rev.*, Vol. 32, pp. 97–109, Jul 1928.
- [3] H. Nyquist. Thermal agitation of electric charge in conductors. *Phys. Rev.*, Vol. 32, pp. 110–113, Jul 1928.
- [4] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Phys. Rev.*, Vol. 37, pp. 405–426, Feb 1931.
- [5] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. ii. *Phys. Rev.*, Vol. 38, pp. 2265–2279, Dec 1931.
- [6] H. Takahasi. Generalized theory of thermal fluctuations. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 7, No. 5, pp. 439–446, 1952.
- [7] H. B. Callen and T. A. Welton. Irreversibility and generalized noise. *Phys. Rev.*, Vol. 83, pp. 34–40, Jul 1951.
- [8] M. S. Green. Markoff random processes and the statistical mechanics of time - dependent phenomena. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 20, No. 8, pp. 1281–1295, 1952.
- [9] M. S. Green. Markoff random processes and the statistical mechanics of time - dependent phenomena. ii. irreversible processes in fluids. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 22, No. 3, pp. 398–413, 1954.
- [10] R. Kubo and K. Tomita. A general theory of magnetic resonance absorption. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 9, No. 6, pp. 888–919, 1954.
- [11] S. Nakajima. Perturbation theory in statistical mechanics. *Advances in Physics*, Vol. 4, No. 16, pp. 363–380, 1955.
- [12] H. Nakano. A Method of Calculation of Electrical Conductivity. *Progress of Theoretical Physics*, Vol. 15, No. 1, pp. 77–79, 01 1956.
- [13] R. 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.
- [14] R. Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Reports on Progress in Physics*, Vol. 29, No. 1, pp. 255–284, jan 1966.

- [15] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume. *Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics*, Vol. 31. Springer Science & Business Media, 2012.
- [16] J. B. Johnson. The schottky effect in low frequency circuits. *Phys. Rev.*, Vol. 26, pp. 71–85, Jul 1925.
- [17] G. Lesovik. Excess quantum noise in 2d ballistic point contacts. *JETP Letters*, Vol. 49, pp. 513–515, 1989.
- [18] B. Yurke and G. P. Kochanski. Momentum noise in vacuum tunneling transducers. *Phys. Rev. B*, Vol. 41, pp. 8184–8194, Apr 1990.
- [19] M. Büttiker. Scattering theory of thermal and excess noise in open conductors. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 65, pp. 2901–2904, Dec 1990.
- [20] Y. Blanter and M. Büttiker. Shot noise in mesoscopic conductors. *Physics Reports*, Vol. 336, No. 1, pp. 1–166, 2000.
- [21] K. Kobayashi and M. Hashisaka. Shot noise in mesoscopic systems: From single particles to quantum liquids. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 90, No. 10, p. 102001, 2021.
- [22] M. Henny, S. Oberholzer, C. Strunk, T. Heinzel, K. Ensslin, M. Holland, and C. Schönberger. The fermionic hanbury brown and twiss experiment. *Science*, Vol. 284, No. 5412, pp. 296–298, 1999.
- [23] A. Shimizu and M. Ueda. Effects of dephasing and dissipation on quantum noise in conductors. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, pp. 1403–1406, Aug 1992.
- [24] A. Shimizu, M. Ueda, and H. Sakaki. Effects of dephasing and dissipation on quantum noise. In *Proceedings of Fourth International Symposium Foundations of Quantum Mechanics*, pp. 189–192, Tokyo, 1993. JJAP.
- [25] A. Crisanti and F. Ritort. Violation of the fluctuation–dissipation theorem in glassy systems: basic notions and the numerical evidence. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 36, No. 21, pp. R181–R290, may 2003.
- [26] E. Wang and U. Heinz. Generalized fluctuation-dissipation theorem for nonlinear response functions. *Phys. Rev. D*, Vol. 66, p. 025008, Jul 2002.
- [27] H. Endo, C. Hotta, and A. Shimizu. From linear to nonlinear responses of thermal pure quantum states. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 121, p. 220601, Nov 2018.
- [28] D. V. Averin and J. P. Pekola. Violation of the fluctuation-dissipation theorem in time-dependent mesoscopic heat transport. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 104, p. 220601, Jun 2010.
- [29] T. Speck and U. Seifert. Restoring a fluctuation-dissipation theorem in a nonequilibrium steady state. *Europhysics Letters (EPL)*, Vol. 74, No. 3, pp. 391–396, may 2006.
- [30] J. Prost, J.-F. Joanny, and J. M. R. Parrondo. Generalized fluctuation-dissipation theorem for steady-state systems. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 103, p. 090601, Aug 2009.
- [31] T. Yuge and A. Shimizu. Indications of universal excess fluctuations in nonequilibrium systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 78, No. 8, p. 083001, 2009.
- [32] D. J. Evans, D. J. Searles, and S. R. Williams. On the fluctuation theorem for the dissipation function and its connection with response theory. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 128, No. 1, p. 014504, 2008.

- [33] K. Saito and Y. Utsumi. Symmetry in full counting statistics, fluctuation theorem, and relations among nonlinear transport coefficients in the presence of a magnetic field. *Phys. Rev. B*, Vol. 78, p. 115429, Sep 2008.
- [34] S. Nakamura, Y. Yamauchi, M. Hashisaka, K. Chida, K. Kobayashi, T. Ono, R. Leturcq, K. Ensslin, K. Saito, Y. Utsumi, and A. C. Gossard. Nonequilibrium fluctuation relations in a quantum coherent conductor. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 104, p. 080602, Feb 2010.
- [35] N. Tsuji, T. Shitara, and M. Ueda. Out-of-time-order fluctuation-dissipation theorem. *Phys. Rev. E*, Vol. 97, p. 012101, Jan 2018.
- [36] N. Tsuji, T. Shitara, and M. Ueda. Bound on the exponential growth rate of out-of-time-ordered correlators. *Phys. Rev. E*, Vol. 98, p. 012216, Jul 2018.
- [37] M. J. Buckingham. *Noise in electronic devices and systems*. JOHN WILEY & SONS, INC., 605 THIRD AVE., NEW YORK, NY 10158, USA, 1983, 368, 1983.
- [38] A. V. d. Ziel. *Noise in solid state devices and circuits*. Wiley-Interscience, 1986.
- [39] Y. Yamamoto and S. Machida. High-impedance suppression of pump fluctuation and amplitude squeezing in semiconductor lasers. *Phys. Rev. A*, Vol. 35, pp. 5114–5130, Jun 1987.
- [40] P. R. Tapster, J. G. Rarity, and J. S. Satchell. Generation of sub-poissonian light by high-efficiency light-emitting diodes. *Europhysics Letters (EPL)*, Vol. 4, No. 3, pp. 293–299, aug 1987.
- [41] 清水明. サブポアソン状態. 応用物理, Vol. 62, No. 9, pp. 881–888, 1993.
- [42] P. R. Saulson. Thermal noise in mechanical experiments. *Phys. Rev. D*, Vol. 42, pp. 2437–2445, Oct 1990.
- [43] E. T. Patronis, H. Marshak, C. A. Reynolds, V. L. Sailor, and F. J. Shore. Low - temperature thermal noise thermometer. *Review of Scientific Instruments*, Vol. 30, No. 7, pp. 578–580, 1959.
- [44] L. Mandel and E. Wolf. *Optical coherence and quantum optics*. Cambridge university press, 1995.
- [45] H. M. Wiseman and G. J. Milburn. *Quantum measurement and control*. Cambridge university press, 2009.
- [46] E. Arthurs and M. S. Goodman. Quantum correlations: A generalized heisenberg uncertainty relation. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 60, pp. 2447–2449, Jun 1988.
- [47] 沙川貴大, 上田正仁. 量子測定と量子制御. SGC123, サイエンス社, 2016.
- [48] K. Koshino and A. Shimizu. Quantum zeno effect by general measurements. *Physics Reports*, Vol. 412, No. 4, pp. 191–275, 2005.
- [49] R. J. Glauber. The quantum theory of optical coherence. *Phys. Rev.*, Vol. 130, pp. 2529–2539, Jun 1963.
- [50] L. Mandel. Antinormally ordered correlations and quantum counters. *Phys. Rev.*, Vol. 152, pp. 438–451, Dec 1966.
- [51] C. Gardiner. *Quantum noise*. Springer, Berlin, 1991.
- [52] A. Shimizu. Quantum nondemolition measurement of a photon number using electron interferometers of semiconductor microstructures. *Phys. Rev. A*, Vol. 43, pp. 3819–3822, Apr 1991.
- [53] M. Brune, S. Haroche, V. Lefevre, J. M. Raimond, and N. Zagury. Quantum nondemolition measurement of small photon numbers by rydberg-atom phase-sensitive detection. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 65, pp. 976–979, Aug 1990.

- [54] G. Lesovik and R. Loosen. On the detection of finite-frequency current fluctuations. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, Vol. 65, No. 3, pp. 295–299, 1997.
- [55] U. Gavish, Y. Levinson, and Y. Imry. Detection of quantum noise. *Phys. Rev. B*, Vol. 62, pp. R10637–R10640, Oct 2000.
- [56] R. Deblock, E. Onac, L. Gurevich, and L. P. Kouwenhoven. Detection of quantum noise from an electrically driven two-level system. *Science*, Vol. 301, No. 5630, pp. 203–206, 2003.
- [57] P.-M. Billangeon, F. Pierre, H. Bouchiat, and R. Deblock. Emission and absorption asymmetry in the quantum noise of a josephson junction. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 96, p. 136804, Apr 2006.
- [58] E. Zakka-Bajjani, J. Ségala, F. Portier, P. Roche, D. C. Glattli, A. Cavanna, and Y. Jin. Experimental test of the high-frequency quantum shot noise theory in a quantum point contact. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 99, p. 236803, Dec 2007.
- [59] J. Basset, H. Bouchiat, and R. Deblock. Emission and absorption quantum noise measurement with an on-chip resonant circuit. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 105, p. 166801, Oct 2010.
- [60] F. Parmentier, E. Bocquillon, J.-M. Berroir, D. Glattli, B. Plaçais, G. Fève, M. Albert, C. Flindt, and M. Büttiker. Current noise spectrum of a single-particle emitter: Theory and experiment. *Physical Review B*, Vol. 85, No. 16, p. 165438, 2012.
- [61] C. Altimiras, O. Parlavacchio, P. Joyez, D. Vion, P. Roche, D. Esteve, and F. Portier. Dynamical coulomb blockade of shot noise. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 112, p. 236803, Jun 2014.
- [62] O. Parlavacchio, C. Altimiras, J.-R. Souquet, P. Simon, I. Safi, P. Joyez, D. Vion, P. Roche, D. Esteve, and F. Portier. Fluctuation-dissipation relations of a tunnel junction driven by a quantum circuit. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 114, p. 126801, Mar 2015.
- [63] R. H. Koch, D. J. Van Harlingen, and J. Clarke. Measurements of quantum noise in resistively shunted josephson junctions. *Phys. Rev. B*, Vol. 26, pp. 74–87, Jul 1982.
- [64] K. Fujikura and A. Shimizu. Universal property of quantum measurements of equilibrium fluctuations and violation of the fluctuation-dissipation theorem. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 117, p. 010402, Jun 2016.
- [65] A. Shimizu and K. Fujikura. Quantum violation of fluctuation-dissipation theorem. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Vol. 2017, No. 2, p. 024004, feb 2017.
- [66] K. Kubo, K. Asano, and A. Shimizu. Macroscopic quantum violation of the fluctuation-dissipation theorem in equilibrium. *Phys. Rev. B*, Vol. 98, p. 115429, Sep 2018.
- [67] T. Ando, Y. Matsumoto, and Y. Uemura. Theory of hall effect in a two-dimensional electron system. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 39, No. 2, pp. 279–288, 1975.
- [68] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 45, pp. 494–497, Aug 1980.
- [69] J. Wakabayashi and S. Kawaji. Hall conductivity in n-type silicon inversion layers under strong magnetic fields. *Surface Science*, Vol. 98, No. 1, pp. 299–307, 1980.
- [70] R. B. Laughlin. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Phys. Rev. B*, Vol. 23, pp. 5632–5633, May 1981.
- [71] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. d. Nijs. Quantized hall conductance in a

- two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 49, pp. 405–408, Aug 1982.
- [72] M. Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, Vol. 160, No. 2, pp. 343–354, 1985.
- [73] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y.-S. Wu. Quantized hall conductance as a topological invariant. *Phys. Rev. B*, Vol. 31, pp. 3372–3377, Mar 1985.
- [74] B. I. Halperin. Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Phys. Rev. B*, Vol. 25, pp. 2185–2190, Feb 1982.
- [75] J. Hajdu, M. Janßen, and O. Viehweger. Kubo Hall conductivity on a finite cylinder and the integer quantum hall effect. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Vol. 66, No. 4, pp. 433–439, 1987.
- [76] Y. Ono and B. Kramer. The hall conductivity of a two-dimensional confined system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Vol. 67, No. 3, pp. 341–347, 1987.
- [77] Y. Ono and T. Ohtsuki. The hall current distribution in a two dimensional system with finite width. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Vol. 68, No. 4, pp. 445–450, 1987.
- [78] T. Ohtsuki and Y. Ono. Numerical study of electronic states in confined two dimensional disordered systems under high magnetic fields. *Solid State Communications*, Vol. 65, No. 5, pp. 403–407, 1988.
- [79] T. Ohtsuki and Y. Ono. Comments on the quantum hall conductivity in cylinder geometry with finite width. *Solid State Communications*, Vol. 68, No. 8, pp. 787–790, 1988.
- [80] H. Aoki and T. Ando. Effect of localization on the hall conductivity in the two-dimensional system in strong magnetic fields. *Solid State Communications*, Vol. 38, No. 11, pp. 1079–1082, 1981.
- [81] T. Ando and Y. Uemura. Theory of quantum transport in a two-dimensional electron system under magnetic fields. i. characteristics of level broadening and transport under strong fields. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 36, No. 4, pp. 959–967, 1974.
- [82] S. Sze and K. K. Ng. Physics of semiconductor devices, john wiley & sons. *New York*, Vol. 68, , 1981.
- [83] D. Goderis and P. Vets. Central limit theorem for mixing quantum systems and the CCR-algebra of fluctuations. *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 122, No. 2, pp. 249–265, 1989.
- [84] T. MATSUI. Bosonic central limit theorem for the one-dimensional xy model. *Reviews in Mathematical Physics*, Vol. 14, No. 07n08, pp. 675–700, 2002.
- [85] L. Landau and E. Lifshitz. *Statistical physics: part I and II, 3rd edn Oxford*. 1980.
- [86] 長岡洋介, 安藤恒也, 高山一. 岩波講座 現代の物理学 第18巻 局在・量子ホール効果・密度波. 岩波書店, 1993.
- [87] 吉岡大二郎. 新物理学選書 量子ホール効果. 岩波書店, 1998.
- [88] 勝本信吾. 新物理学シリーズ 43 半導体量子輸送物性. 培風館, 2014.
- [89] 浅野建一. 固体電子の量子論. 東京大学出版会, 2019.
- [90] H. Fukuyama, H. Ebisawa, and Y. Wada. Theory of hall effect. i: Nearly free electron. *Progress of Theoretical Physics*, Vol. 42, No. 3, pp. 494–511, 1969.
- [91] H. Fukuyama. Theory of hall effect. ii: Bloch electrons. *Progress of Theoretical Physics*, Vol. 42, No. 6, pp. 1284–1303, 1969.
- [92] R. Kubo, S. J. Miyake, and N. Hashitsume. Quantum theory of galvanomagnetic effect at extremely

- strong magnetic fields. Vol. 17 of *Solid State Physics*, pp. 269–364. Academic Press, 1965.
- [93] A. Widom. Thermodynamic derivation of the hall effect current. *Physics Letters A*, Vol. 90, No. 9, p. 474, 1982.
- [94] S. G. Semenchinskiy. The Quantum Hall Effect and Von Klitzing Constant. *Measurement Techniques*, Vol. 64, No. 1, pp. 8–12, 2021.
- [95] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, Vol. 109, pp. 1492–1505, Mar 1958.
- [96] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 42, pp. 673–676, Mar 1979.
- [97] T. Ando. Electron localization in a two-dimensional system in strong magnetic fields. i. case of short-range scatterers. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 52, No. 5, pp. 1740–1749, 1983.
- [98] K. Kubo, K. Asano, and A. Shimizu. Robustness of equilibrium off-diagonal current fluctuation against localization of electron states in macroscopic two-dimensional systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 91, No. 2, p. 024004, 2022.
- [99] T. Ando. Theory of quantum transport in a two-dimensional electron system under magnetic fields ii. single-site approximation under strong fields. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 36, No. 6, pp. 1521–1529, 1974.
- [100] S. Ziegler, R. C. Woodward, H. H.-C. Iu, and L. J. Borle. Current sensing techniques: A review. *IEEE Sensors Journal*, Vol. 9, No. 4, pp. 354–376, 2009.