

論文の内容の要旨

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)

氏名 久保 賢太郎

本論文では巨視系における平衡電流ゆらぎの解析を行い、量子系では揺動散逸定理 (FDT: Fluctuation-Dissipation Theorem) が大きく破綻することや、平衡電流ゆらぎが電気伝導度の性質と対照的な新奇な性質を持つことを示す。

平衡電流ゆらぎは FDT を軸にして盛んに研究されてきた。1 章および 2 章 1 節では、そのような研究背景の説明を行う。FDT によると巨視系における平衡電流ゆらぎ $S_{\mu\nu}$ はその系の温度 $T = 1/\beta$ ($k_B = 1$ とした) と電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu}$ の積で与えられる。

$$S_{\mu\nu} = T\sigma_{\mu\nu}.$$

ここで μ, ν は電流の向きのラベルであり、 $S_{\mu\nu}$ は μ 方向を流れる電流と ν 方向を流れる電流の相関 (のスペクトル強度) である。 S_{xx} を対角電流ゆらぎ、 S_{xy} を非対角電流ゆらぎと呼ぶ。また $\sigma_{\mu\nu}$ は ν 方向にかけた電場に対する μ 方向の電流密度の応答を表す。FDT は異なる物理量の測定値同士をつなぐという点から、線形非平衡統計力学の基礎を成すだけでなく、ノイズを推定したり、温度計として利用したりと、応用の観点からも重要な役割を演じてきた。

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、量子系でも FDT が成立するのかが疑問視されてきた。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かったためである。ゆらぎを得るためには繰り返し測定が必要なため、その測定結果は測定の反作用に強く依存してしまう。そのため、測定の反作用を考慮せずに FDT の成否について議論することはできない。2 章 3, 4 節では、このような問題に着目し

- 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) を行ったとしても量子系では FDT が破綻する。

と示した研究 [1, 2] のレビューを行う。準古典測定は 2 章 2 節にまとめる量子測定理論を用いて数学的に厳密に定義されている。文献 [1, 2] の著者らは、量子測定理論と量子中心極限定理を用いた解析により、準古典測定により得られる巨視系の (電流) ゆらぎは、系や測定器の詳細に依らず普遍的に物理量 (電流) の対称化積相関で与えられることを示した。一方、Kubo 公式により、線形応答関数 (電気伝導度) は物理量 (電流) のカノニカ

ル相関で与えられることが知られているため、原理的に避けることが可能な反作用をすべて取り除いたとしても量子系では FDT が破れると明らかになったのである。この研究以前にも高周波数成分では零点振動の影響によりゆらぎが補正を受けることを指摘した研究は存在するが、低周波数領域、特に任意の温度に対して低周波数領域にある静的成分についても FDT が破れうる可能性を指摘した点においても、この研究結果は新奇的なものであった。

しかし、静的成分の 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されていなかった。この点に着目した筆者は、FDT の破れの大きさを具体的に評価する研究を行った。その成果は論文 [3] にまとめ発表しており、本論文では 2 章 5 節で説明を行う。考察対象とした系は静的成分の FDT の破れの必要条件である時間反転対称性の破れを満たす一般的な巨視的平衡系とした。まず相関関数の性質や熱力学の第二法則など、相関関数の種類や系の詳細に依存しない手法のみを用いた解析を行い、一般的な系、一般的な流れのゆらぎに対して、FDT が巨視的に破れる条件を明らかにした。次に、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具体的なモデルを設定した解析も行った。その結果、 S_{xx} は任意のパラメタに対して $T\sigma_{xx}$ に一致するのに対して、 S_{xy} は量子ホール効果が生じるような低温強磁場領域では $T\sigma_{xy}$ の数十倍も大きくなりうるという結果 (図 1(c)) が得られた。つまり、対角成分の FDT は成立するものの、非対角成分の FDT は大きく破綻することがわかったのである。この数値的な結果が前述の解析計算による結果と整合することも示した。このようにして、巨視系における静的成分の FDT の破れが増大する条件を明らかにしたとともに、 S_{xy} と $T\sigma_{xy}$ が一致しないという重要な事実を発見したのである。

この結果は FDT の破れを示した論文 [3] として発表を行ったが、FDT により一致すると考えられてきた $\sigma_{\mu\nu}$ と $S_{\mu\nu}$ が実は異なる物理に従っていることを示した、という意味も有している。その差異をもたらす物理が何であるかを明らかにし、さらに $S_{\mu\nu}$ の振る舞いを定量的に明らかにすることが本論文の目的である。というのも、研究 [3] では、具体的に二次元電子系の $\sigma_{\mu\nu}$ と $S_{\mu\nu}$ を計算する際に、自己無撞着ボルン近似 (SCBA: Self-Consistent Born Approximation) という手法を用いた解析を行った。この手法は電子状態の局在化の影響を評価できないものの、FDT の破れの大きさを計算するという目的においては、正しいオーダー評価ができる。しかし、量子 Hall 効果の研究でよく知られているように、 $\sigma_{\mu\nu}$ は電子状態の局在化によりその Landau 準位占有率依存性が大きく変化する。そのため、 $\sigma_{\mu\nu}$ と $S_{\mu\nu}$ が従う物理の差異を理解するという目的においては、電子状態の局在化の影響を評価できる、SCBA とは異なる手法を用いる必要がある。そこで厳密な解析計算により、 $S_{\mu\nu}$ や $\sigma_{\mu\nu}$ への局在状態、非局在状態の寄与がどのように異なるのかについて調べるとともに、現実的な乱れた二次元電子系を想定した数値計算によりその差異の定量的評価を行った。その結果として、 $S_{\mu\nu}$ が $\sigma_{\mu\nu}$ の性質とは対照的な新奇な性質を持つことを発見した。この内容については 6 章で説明を行う。

3 章, 4 章, 5 章は $S_{\mu\nu}$ の解析に必要な知識を説明する。3 章では Nakano-Kubo 公式を用いて不純物が存在する二次元電子系における $\sigma_{\mu\nu}$ が次の性質を持つことを示す。

1. σ_{xx} には化学ポテンシャル近傍のエネルギーを持つ非局在状態のみが寄与する。
2. σ_{xy} には化学ポテンシャル以下のエネルギーを持つ全ての非局在状態が寄与する。

これらは $S_{\mu\nu}$ の性質を考察する際に重要な比較対象となる。4 章では、磁場中の 2 次元系における電子の運動についてまとめる。まず古典論から説明を行い、量子系を理解する下準備とする。次に量子系では Landau 準位が形成されることを見る。そして、Landau 準位の固有状態を参照状態として、不純物を考慮した系における摂動計算および数値計算を行うための準備を行う。特に前述の SCBA については、低温強磁場極限における系の特徴的振る舞いを理解するために、やや詳しく説明する。5 章では整数量子 Hall 効果の説明を行う。この現象には様々な理解の仕方があるが、ここでは、局在状態が寄与しないという σ_{xy} の性質と、不純物がある低温強

磁場下の二次元電子系ではほぼすべての状態が局在することに起因して生じる、という理解の仕方を説明する。局在・非局在状態のエネルギー分布を理解することも、 $S_{\mu\nu}$ の性質理解に非常に重要である。

6 章では、2-5 章で説明した知識を用いて不純物が存在する二次元電子系の $S_{\mu\nu}$ の解析を行う。測定器の性質ではなく系の内在的な性質としてのゆらぎに興味があるので、2 章と同様に準古典測定により得られるゆらぎを考察対象とする。まず、 $\sigma_{\mu\nu}$ と $S_{\mu\nu}$ の解析的関係と、Nakano-Kubo 公式を用いて、不純物ポテンシャルの形を限定しない一般的な巨視的二次元電子系における $S_{\mu\nu}$ を計算する。そしてその結果として $S_{\mu\nu}$ が次の性質を持つことを示す。

1. S_{xx} には化学ポテンシャル近傍のエネルギーを持つ非局在状態のみが寄与する。
2. S_{xy} には化学ポテンシャル以下のエネルギーを持つ (局在状態を含む) 全ての状態が寄与する。

この性質を前述の $\sigma_{\mu\nu}$ の性質と比較すると、対角成分については両者が一致しているものの、非対角成分に関しては両者が対照的になっていることがわかる。 σ_{xy} には局在状態は寄与しないのに対して、 S_{xy} には局在状態を含む全ての状態が寄与するのである。この性質は、量子 Hall 効果が生じる状況であっても S_{xy} にはプラトーが生じないことも意味している。また $\sigma_{\mu\nu}$ と $S_{\mu\nu}$ の全ての成分の中で、局在状態が寄与し得るのは S_{xy} のみであることから、 S_{xy} の性質が特異的であることもわかる。

次に局在状態が S_{xy} にどのように寄与するのかを定量的に明らかにするため、周期境界条件を課した具体的な有限系の解析を行う。まず不純物が存在しない系の S_{xy} が Landau 準位占有率と厳密な比例関係にあることを示す。傾きの違いはあるがこの比例関係自体は不純物が無い系の σ_{xy} と Landau 準位占有率のよく知られた比例関係に一致している。次に短距離型の不純物ポテンシャルがある系で、電子状態の局在の影響が顕著になる低温強磁場領域における、 S_{xy} の Landau 準位占有率依存性を数値的に計算する。その結果として、 σ_{xy} は量子 Hall 効果として知られているように不純物が存在しない系のふるまいから大きく逸脱するものの、 S_{xy} は不純物が無い系の比例関係からほとんど変化しないことを示す (図 2 および表 1)。この結果は S_{xy} は σ_{xy} とは対照的に、不純物散乱による電子の局在化に対して非常に鈍感なことを意味している。 S_{xy} と σ_{xy} の振る舞いにこのような違いが出る理由を、相関関数の性質と二次元電子系の電子状態の特徴から理解するための議論も行う。

更に S_{xy} の不純物散乱に対するこの頑健性を、電子数密度の推定に応用する提案も行う。これまでに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手法は、 σ_{xy} と電子数密度が比例するという古典的な関係を用いたものであった。そのため量子効果によりその比例関係が大きく崩れる低温強磁場領域では正しい推定ができないことが知られていた。本論文で新たに提唱する手法は S_{xy} と電子数密度の高精度な比例関係を用いるものであり、低温強磁場で非常に高い精度の電子数密度推定が可能であることから、従来の手法が苦手とする領域をカバーすることができる。数値計算によると量子 Hall 効果が生じるような典型的な設定において、数 % 程度の小さな誤差で電子数密度を推定できることがわかっている。この密度推定を可能にすることが期待できる実験手法についても言及する。

最後に得られた結果について第 7 章でまとめ直し、残された課題や今後の展望について述べる。

- [1] K. Fujikura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **117**, 010402 (2016).
- [2] A. Shimizu and K. Fujikura, J. Stat. Mech. (2017) 024004.
- [3] K. Kubo, K. Asano, and A. Shimizu, Phys. Rev. B **98**, 115429 (2018).
- [4] K. Kubo, K. Asano, and A. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 024004 (2022). (selected as a Paper of Editors' Choice)

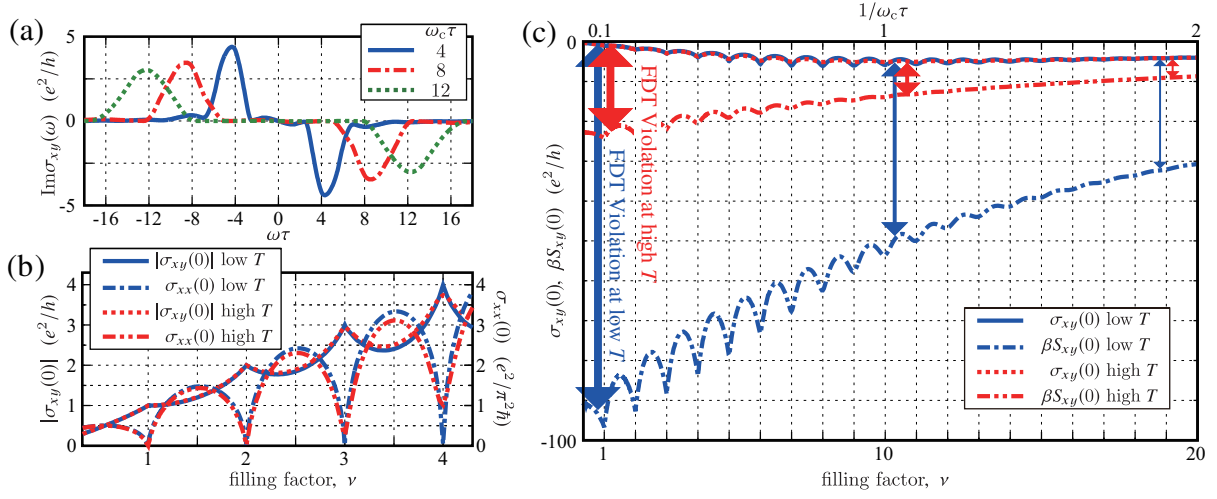


図1 論文 [3] の FIG.1. (a) $\text{Im}\sigma_{xy}(\omega)$ を周波数 ω の関数として書いたもの. パラメタは $\omega_c\tau = 4$ (青), 8 (赤), 12 (緑), 温度 $T = \hbar/20\tau$, 電子数密度 $n = 10m/h\tau$. ここで ω_c はサイクロトロン周波数, τ は磁場なしの系における不純物散乱の緩和時間, m は電子の有効質量. (b) $|\sigma_{xy}(0)|$ と $\sigma_{xx}(0)$ を Landau 単位占有率 ν の関数として書いたもの. 電子数密度は $n = 10m/h\tau$ 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 単位占有率 ν の関数として書いたもの. パラメタ設定は (b) と同様.

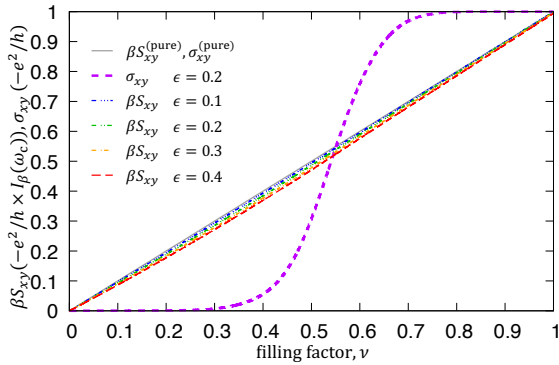


図2 論文 [4] の FIG.1. 数値計算により得られた βS_{xy} を ν の関数としてプロットしたグラフ. パラメタは $k_B T = \hbar\omega_c/250$ かつ $\epsilon = \Gamma/\hbar\omega_c = 0.1$ (青), 0.2 (緑), 0.3 (橙), 0.4 (赤). ここで Γ は Landau 準位の半幅, $\hbar\omega_c$ は Landau 準位の間隔. 比較対象として同じ温度かつ $\epsilon = 0.2$ の σ_{xy} (紫) の数値計算結果, 同じ温度かつ ϵ に依存しない $\beta S_{xy}^{(\text{pure})}$ $\sigma_{xy}^{(\text{pure})}$ の解析解 (灰) をプロットした. なお ϵ は磁場の強さを表すパラメタであり, Landau 準位間隔 $\hbar\omega_c$ と Landau 準位半幅 Γ の比 $\hbar\omega_c/\Gamma$ で与えられる.

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1 ϵ は磁場の強さを表すパラメタ, R^2 は図2の βS_{xy} の結果に対する回帰直線 $f(\nu) = a \times \nu$ によるフィッティングの決定係数, δa はフィッティング関数の傾き a と不純物が無い系における βS_{xy} の傾きの間の相対誤差.