

非平衡輸送現象¹

— 輸送現象における計数統計を学ぶための基礎 —

東京大学 大学院理学系研究科 齊藤 圭司²

(2009 年 6 月 15 日受理)

熱力学的力によって駆動される流れの分布関数は、最近非平衡統計力学やメゾスコピック系の電気伝導の分野などで注目を浴びている。この講義では、計数統計の概念やキュムラント生成汎関数を導出する計算手法、またその周辺的话题をかいつままで説明を行っていく。それぞれの技術における完璧な証明を与えて納得する方法ではなく、いくつかの例を挙げながら一般的な証明にたどりつけるような方法を取り説明を行っていく。中心になる話題は古典系及び量子系におけるメゾスコピック系の電気伝導である。

目次

1	古典系における計数統計	346
1.1	計数統計とは	346
1.2	Coulomb Blockade 領域における電子輸送	349
1.2.1	量子ドットにおける確率過程	349
1.2.2	確率過程での期待値の表現	351
1.2.3	平均カレント、カレント相関、計数統計	352
2	量子系における計数統計	356
2.1	Schwinger-Keldysh Formalism	356
2.1.1	“Contour ordered” の考え方	356
2.1.2	Langreth rule	360
2.1.3	松原グリーン関数との類似点	360
2.1.4	練習 1: 量子ドットを介する電流	361
2.1.5	練習 2: 量子ランジェバンダイナミクスにおける熱の散逸	364
2.2	経路積分による計数統計	369
2.2.1	準備: グラスマン代数における経路積分	370
2.2.2	Full counting statistics	372
2.2.3	Levitov-Lesovik の生成汎関数	374

¹本稿は、2008 年 7 月 15~16 日に京都大学基礎物理学研究所で行われた集中講義を元に、黒岩健、齊藤国靖、中島千博（京大基研）が起草し、齊藤が加筆・訂正した講義録である。

²E-mail: saito@spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp

1 古典系における計数統計

1.1 計数統計とは

計数統計 (counting statistics) とは、「対象となる物理量の数を有限時間 τ で数え上げてその統計をみる」ことを意味し、光学などにおいて盛んに考えられてきたものである。これから話していくことは、その概念を電気伝導や熱伝導現象など「熱力学的な力」によって駆動される物理系に応用していくことである。特にここでは、電気伝導の計数統計の理解を目指している。図 1 のように 2 つのリードの間に電位差を与えて、左のリードから右のリードに電子が流れる状況を考えよう。実験においては、時間の関数として電流が観測される。(図では電子がまれに飛んでくる場合を考え、とびとびの値として電子をカウントしている。) このような状況で、十分長い時間 τ において左のリードから右のリードへ飛んでくる電子の個数 Q の分布 $P(Q)$ を考えることが、電気伝導での計数統計の主な課題である。

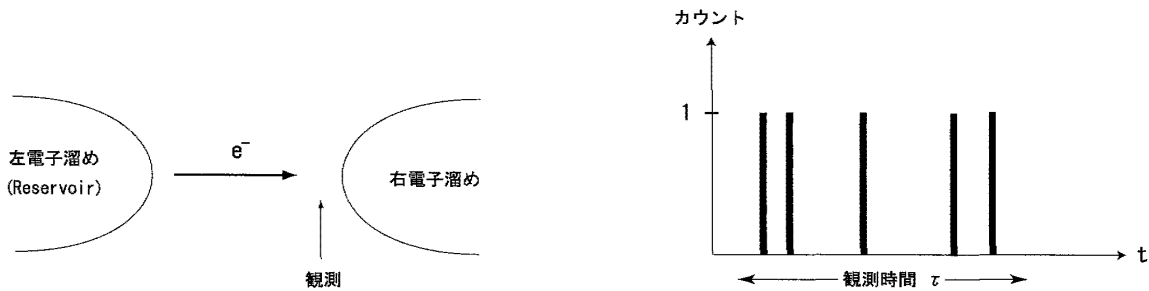


図 1: 電気伝導のモデル

図 2: 観測結果の例

分布 $P(Q)$ は、 Q の任意のキュムラントに関する情報を持つ。1 次のキュムラントである平均カレント I と 2 次のキュムラントである電流ノイズ S を調べることの意義は、古くから認識されていた [1]。 I と S は Q を用いると

$$I = \frac{\langle Q \rangle}{\tau} \quad S = \frac{\langle Q^2 \rangle_c}{\tau} \quad (1)$$

のように表わされる。ただし、 $\langle \dots \rangle$ は、 τ 秒間の観測を何回も行ったときのアンサンブル平均であり、 $\langle \dots \rangle_c$ はキュムラントを表している。左のリードから右のリードに電子が流れる現象を考える。もし極低温で、透過確率が非常に小さい時、電子が飛んでいく個数の分布は、いわゆるポアソン分布となる。ご存じのようにポアソン分布は、すべてのキュムラントが等しくなる確率分布である。その結果、ノイズと平均電流は次元分だけが異なり、その比は素電荷となる。カレント I とノイズ S は、素電荷 e を用いて次のような美しい関係で結ばれることになる。

$$\frac{S}{2I} = e \quad (2)$$

すなわち、「ノイズをカレントで割ると素電荷がわかる」わけである。ノイズはカレントを測定したい人にとっては邪魔なものでしかないと考えられがちであるが、(2) を見ればノイズは有益な情報を内包していることが分かる。³

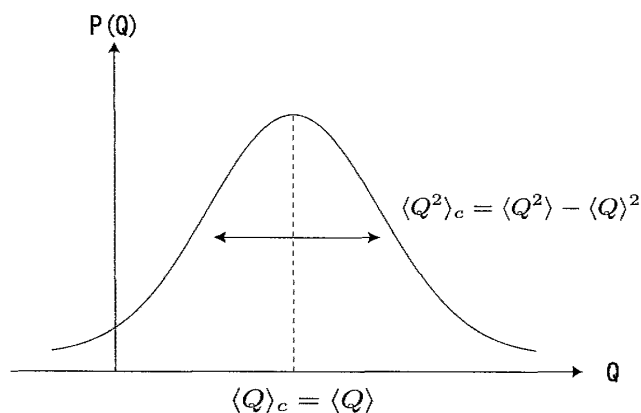


図 3: 得られる確率分布の例

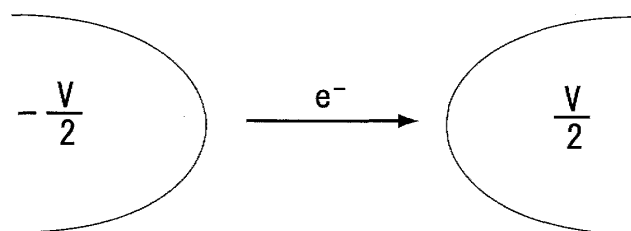


図 4: Schotky の公式における系の概念図

このような理由から平均電流やノイズを研究することは、これまで電気伝導の分野での主流の一つであった。確率分布 $P(Q)$ を知ることは、 Q のすべてのキュムラントを知ることと等価であり、この意味で確率分布を知ることは、平均電流 I やノイズ S だけでなく、統計の「完全」な情報を得るということにつながっている。特に電気伝導の分野では、計数統計におけるこのへんの事情を強調して、 $P(Q)$ や高次キュムラントを求めることを「完全計数統計 (Full counting statistics)」と呼んだりする [2]。

さて $P(Q)$ を決めるための大雑把な枠組みを説明していく。まず、 $P(Q)$ のフーリエ変換を $Z(\chi)$ と書こう。

$$P(Q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi Z(\chi) e^{-i\chi Q} \quad (3)$$

フーリエ逆変換をすれば、当然 $Z(\chi)$ が得られ、さらに $i\chi$ で微分をすれば

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^n Z(\chi)}{\partial (i\chi)^n} \right|_{\chi=0} &= \left. \frac{\partial^n}{\partial (i\chi)^n} \int_{-\infty}^{\infty} dQ P(Q) e^{i\chi Q} \right|_{\chi=0} = \int_{-\infty}^{\infty} dQ P(Q) Q^n \\ &= \langle Q^n \rangle \end{aligned} \quad (4)$$

が成立するので、 $Z(\chi)$ は Q の高次の値を生成する生成汎関数になっている。 Q の任意のキュムラントは

$$\langle Q^n \rangle_c = \left. \frac{\partial^n \ln Z(\chi)}{\partial (i\chi)^n} \right|_{\chi=0} \quad (5)$$

³これをランダウアーは "The noise is the signal" と表現した。

で定義される。ここで χ は単なるフーリエ変換の変数でしかないわけであるが、 χ 微分が Q の任意のキュムラントを生成するので、単なる変数以上の重要性を持つ。そこで χ を重要な補助場として昇格させ、特に計数場 (counting field) と言うことにする。また、 Z は特性関数 (characteristic function)、 $\frac{1}{\tau} \ln Z$ はキュムラント生成汎関数 (cumulant generating function) と呼ぶ。(3) を以下のように書こう。

$$P(Q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi e^{\ln Z(\chi) - i\chi Q} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi e^{\tau h(\chi)} \quad (6)$$

ただし $h(\chi) = \frac{1}{\tau} \ln Z(\chi) - i\chi q$ ($q = Q/\tau$) である。観測時間 τ が十分長ければ、多くの場合鞍点法を使うことができ、(6) を評価することができる。関数 $h(\chi)$ を最大にする χ を χ^* と書く。

$$\left. \frac{\partial}{\partial \chi} h(\chi) \right|_{\chi=\chi^*} = 0 \quad (7)$$

$h(\chi)$ を $\chi = \chi^*$ のまわりで二次まで展開し、

$$P(Q) \sim \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi \exp \left[\tau \left(h(\chi^*) + \frac{1}{2} (\chi - \chi^*)^2 \left. \frac{\partial^2 h(\chi)}{\partial \chi^2} \right|_{\chi=\chi^*} \right) \right] \sim e^{\tau h(\chi^*)} \quad (8)$$

のような漸近的な表現を得ることができる。計数統計では、このような十分大きな観測時間 τ での、漸近的な分布関数の振る舞いを調べることが多い。

[補足] こういう状況は、平衡統計力学でもすでに馴染み深いことである。蛇足に近いが、理解を深めるために少しだけ横道にそれて、以下のようなイジングモデルの磁化の問題を考えてみよう。イジングモデルにおいて系のハミルトニアンは

$$H = - \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (9)$$

で与えられる。ここで σ_i は ± 1 の値をとる。温度 β^{-1} のもとで全磁化 $\sum_i \sigma_i$ が M である確率を求めてみる。特性関数を

$$Z(\chi) = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} e^{i\chi \sum_j \sigma_j})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \quad (10)$$

で定義すれば、

$$\langle (\sum_i \sigma_i)^n \rangle = \left. \frac{\partial^n Z(\chi)}{\partial (i\chi)^n} \right|_{\chi=0} \quad (11)$$

により全磁化の情報が得られる。この $i\chi$ は外部磁場としての物理的な意味を持っている。全磁化が M である確率密度は、

$$\begin{aligned} P(M) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi Z(\chi) e^{-i\chi M} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi \exp \left\{ N \left(\frac{1}{N} \ln Z(\chi) - i\chi m \right) \right\} \end{aligned} \quad (12)$$

で与えられる。 $S(\chi) = \frac{1}{N} \ln Z(\chi) - i\chi \frac{M}{N} = F(\chi) - i\chi m$ とおく ($m = \frac{M}{N}$ は 1 サイトあたりの磁化)。サイト数 N が十分大きいときは鞍点法により $S(\chi)$ を最大にする $\chi = \chi^*$ で積分の値を置き換えることができ、

$$P(M) \sim e^{NS(\chi^*)} \quad (N \rightarrow \infty) \quad (13)$$

と評価できる。このとき $F(\chi^*) \equiv \frac{1}{N} \ln Z(\chi^*)$ は 1 サイトあたりの自由エネルギーを温度で割ったもの、 $S(\chi^*)$ は、全磁化を固定した時の 1 サイトあたりのエントロピーに相当することになる。

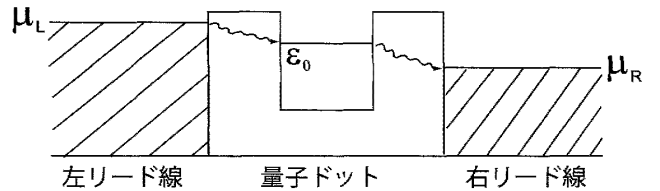
このように平衡統計力学ではシステムサイズが大きいことが、重要となり鞍点評価により、指数の肩が熱力学を支配することになるのである。これは熱力学でいうところの、示量性と深く関係する性質である。一方で計数統計の場合は観測時間 τ が大きいことが重要になる。以上から平衡系の問題と非平衡の計数統計の間には以下のような対応があることが分かる。

magnetic case	counting case
χ (conjugate な磁場)	χ (counting field)
Number of spin N	measurement time τ
magnetization M	transmitted charge Q

1.2 Coulomb Blockade 領域における電子輸送

1.2.1 量子ドットにおける確率過程

この節では、古典確率過程として量子ドットを介した電子輸送を論じる。ちなみに 2 章では、同じ系を Schwinger-Keldysh の形式を使って量子力学的に取り扱う。量子ドットというのは、エネルギー準位が離散的になっているとみなせる小さな系のことである。ドットの壁は高いポテンシャル障壁になっていて、



そこに粒子浴（リード）が接触しているとする。左のリードと右のリードの間には、外から電圧がかけられていて、電子は平均して左から右に流れる状況になっているとする。つまり、左のリードの化学ポテンシャル μ_L と右の化学ポテンシャル μ_R には $\mu_L > \mu_R$ の関係がある。化学ポテンシャルの差を素電荷で割ったもの $(\mu_L - \mu_R)/e$ が電位差になる。ときどき電子がトンネルしてドットに移動し、さらに右の粒子浴にトンネルするという系で電子輸送をモデル化する。

簡単のため、ドットの中のエネルギー準位は一つしかないと仮定する。さらに古典領域での話にするために Coulomb Blockade と呼ばれる領域のみ考えよう。Coulomb Blockade というのは、ドットのコンデンサーとしての電気容量が十分小さく、さらに電位差 V も十分小さいために、ドットの中に素電荷 $e = 1.6 \times 10^{-19} C$ ぐらいしか電氣量をためられないため、ドットの中に 2 個以上電子が入ることができないような状況を表すのに使われる言葉である。[3] このような領域では、

おおよそ各時刻で、ドットに電子がいるかいないかが確定しており、古典的な輸送現象とみなせる。⁴

さて興味があるのは、ドットの電子状態を表す確率過程である。確率過程を導出する方法は、フェルミの黄金律を使った解析や縮約密度行列の方法など複数あるが、ここでは標準的なフェルミの黄金律を使った手法を用いよう。まず、ドットが一つのリードに接触している状況を考える。系全体のハミルトニアンはスピン自由度を無視すると、以下のようになる。

$$\begin{aligned} H &= H_L + H_T + H_d \\ H_L &= \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k \\ H_T &= \sum_k \gamma_k a_k^\dagger d + \gamma_k^* d^\dagger a_k \\ H_d &= \epsilon_0 d^\dagger d \end{aligned}$$

H_L はリードのハミルトニアンで、 ϵ_k がそのエネルギーである。 $a_k^\dagger$ と a_k はそれぞれ左のリードにあるエネルギー ϵ_k を持つ電子の生成、消滅演算子である。 H_T はリードとドットの間のトンネルを記述するハミルトニアンで γ_k は系とリード間のトンネルの大きさを表す項である。 H_d はドットのハミルトニアンであり、 $d^\dagger$ と d はドットの電子の生成消滅演算子である。各フェルミオン演算子は反交換関係を満たす。リード線を2個つけた場合、2章で説明するようにこの設定はハミルトニアンが2次形式であるため、純量子力学的な時間発展を議論でき、厳密に輸送を議論することが可能であることにも注意しておく。ここでは確率過程として輸送を記述したいので、粒子の透過確率が小さい領域のみを考え、あえて確率的に輸送を扱う。

時刻 t においてドット内に電子が1個いる確率を $P_1(t)$ 、電子が0個いる確率を $P_0(t)$ と書く。このとき確率過程は以下の方程式で一般に記述される。

$$\frac{dP_0(t)}{dt} = L_{0 \leftarrow 0} P_0(t) + L_{0 \leftarrow 1} P_1(t) \quad (14)$$

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = L_{1 \leftarrow 0} P_0(t) + L_{1 \leftarrow 1} P_1(t). \quad (15)$$

確率の保存、すなわちすべての t に対し $P_0(t) + P_1(t) = 1$ が成立するためには $L_{0 \leftarrow 0} = -L_{1 \leftarrow 0}$ および $L_{1 \leftarrow 1} = -L_{0 \leftarrow 1}$ が成り立たねばならない。次に $L_{0 \leftarrow 1}$ および $L_{1 \leftarrow 0}$ の具体的な式を求めてみよう。

$L_{0 \leftarrow 1}$ および $L_{1 \leftarrow 0}$ を評価するためにフェルミの黄金律を使ってみる。リード線は、平衡状態であり逆温度 β 、化学ポテンシャル μ を持つとしよう。つまりリード線の状態 ρ_{Lead} は粒子数演算子 N_L を使えば

$$\rho_{\text{Lead}} = \exp[-\beta(H_L - \mu N_L)]/Z \quad (16)$$

と書ける。この状況で、単位時間にリード線からドットに電子が一個入る確率 $L_{1 \leftarrow 0}$ は、ドットのエネルギー ϵ_0 と同じエネルギーをもつ電子がリード線にいて、ハミルトニアンに従って時間発展

⁴このような状況でもコトンネルと呼ばれる量子効果が存在し、しばしば重要になることがある。

して遷移する確率である。それはフェルミの黄金律をもちいて、

$$L_{1 \leftarrow 0} \sim \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\epsilon_k} |\gamma_k|^2 f(\epsilon_k) \delta(\epsilon_k - \epsilon_0) \quad (17)$$

と計算できる。ここで関数 f は化学ポテンシャル μ を持つフェルミ分布関数である。また同様に

$$L_{0 \leftarrow 1} \sim \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\epsilon_k = \epsilon_0} |\gamma_k|^2 (1 - f(\epsilon_k)) \delta(\epsilon_k - \epsilon_0) \quad (18)$$

と計算されることも分かる。

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\epsilon_k} |\gamma_k|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_0) \quad (19)$$

とおけば、1 個のリード線に接したドットの確率過程は以下で記述されることになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} P_0(t) = -\Gamma[f(\epsilon_0)P_0(t) - (1 - f(\epsilon_0))P_1(t)] \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_1(t) = -\Gamma[-f(\epsilon_0)P_0(t) + (1 - f(\epsilon_0))P_1(t)] \quad (21)$$

こうして一つのリードの場合が分かった。リードが二つの場合は瞬時に導出できる。左のリードと右のリードが相互作用のない電子系で、それぞれ化学ポテンシャル μ_L 、 μ_R を持つとしよう。それらの化学ポテンシャルを持つフェルミ分布関数を f_L 、 f_R と書くとダイナミックスは以下のようにまとめられる。

$$\frac{\partial}{\partial t} |P(t)\rangle = -\mathcal{L}|P(t)\rangle \quad (22)$$

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \Gamma_{1 \leftarrow 0} & -\Gamma_{0 \leftarrow 1} \\ -\Gamma_{1 \leftarrow 0} & \Gamma_{0 \leftarrow 1} \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$|P(t)\rangle = \begin{pmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \end{pmatrix} \quad (24)$$

$$\Gamma_{1 \leftarrow 0} = \Gamma f_L(\epsilon_0) + \Gamma f_R(\epsilon_0) \quad (25)$$

$$\Gamma_{0 \leftarrow 1} = \Gamma(1 - f_L(\epsilon_0)) + \Gamma(1 - f_R(\epsilon_0)) \quad (26)$$

1.2.2 確率過程での期待値の表現

いまベクトル $\langle \varphi_0 |$ を以下のように定義する。

$$\langle \varphi_0 | = (1, 1) \quad (27)$$

この $\langle \varphi_0 |$ を使えば、確率過程の期待値をある程度コンパクトに書くことが可能になる。ある行列 A があって、確率変数をベクトル要素に持つベクトル $|P(t)\rangle$ に作用して、確率要素に応じて物理量を決めているとしよう。例えば、ドット内の電子の数を求める A は $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ となる。このとき、 A で計算される物理量の平均値は

$$\langle \varphi_0 | A | P(t) \rangle \quad (28)$$

で与えられる。

ところで、(24) で定義した $\mathcal{L}$ は非エルミートなので右固有ベクトルと左固有ベクトルは一致しない。左右それぞれの固有方程式は

$$\langle \varphi_k | \mathcal{L} = \lambda_k \langle \varphi_k | \quad (29)$$

$$\mathcal{L} | \psi_k \rangle = \lambda_k | \psi_k \rangle \quad (30)$$

と書かれる。今上に定義した $\langle \varphi_0 |$ は、実は $\mathcal{L}$ の左固有ベクトルになっており、固有値は 0 を持つ。すなわち、

$$\langle \varphi_0 | \mathcal{L} = 0 \quad (31)$$

となっているのである。証明を以下に与える。

証明

あらゆる初期条件 $|P(0)\rangle$ に対して、確率の保存から

$$\langle \varphi_0 | P(t) \rangle = \langle \varphi_0 | P(0) \rangle \quad (32)$$

が当然成り立つ。これは、

$$\langle \varphi_0 | e^{-\mathcal{L}t} | P(0) \rangle = \langle \varphi_0 | P(0) \rangle \quad (33)$$

と書け、あらゆる $|P(0)\rangle$ で成立するので、

$$\langle \varphi_0 | e^{-\mathcal{L}t} = \langle \varphi_0 | \quad (34)$$

と言える。さらに両辺を時間微分して $t = 0$ とすると

$$\langle \varphi_0 | \mathcal{L} = 0 \quad (35)$$

なので (31) は $\mathcal{L}$ のゼロ固有状態である。(証明終)

1.2.3 平均カレント、カレント 相関、計数統計

次に確率過程での平均カレントやカレント相関を計算してみよう。いまから考えるカレントは、左のリードとドットとの間で電子がどう飛び移るかを考えることから導出される。各リードとドットの間の遷移確率を明確にしておくために $\mathcal{L}$ の中身の属性を次のように明記しておこう。

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \nu_L + \nu_R & -\xi_L - \xi_R \\ -\nu_L - \nu_R & \xi_L + \xi_R \end{pmatrix} \quad (36)$$

$$\nu_L = \Gamma f_L(\epsilon_0), \quad \xi_L = \Gamma (1 - f_L(\epsilon_0)),$$

$$\nu_R = \Gamma f_R(\epsilon_0), \quad \xi_R = \Gamma (1 - f_R(\epsilon_0)). \quad (37)$$

導出の過程を納得するために、時間を離散化してみることにする。初期時刻から τ 秒後までを N 分割し、最後に N を無限大にする。従って i 番目の時間は $t_i = i\tau/N$ となる。いま S_i を時刻 t_i でのドットの中の電子数を表すとする ($S_i = 0, 1$)。このとき、分布関数

$$P(S_N, S_{N-1}, \dots, S_{i+1} | S_i) \quad (38)$$

を定義してその時間変化からカレントを考えてみよう。この確率は、時刻 t_i での状態を固定した時のその後の状態を決める条件付き確率である。確率過程を与えるダイナミクスはマルコフ的であるので、

$$P(S_N, S_{N-1}, \dots, S_j, S_{j-1}, \dots, S_1 | S_0) = P(S_N, S_{N-1}, \dots, S_j | S_{j-1}) P(S_{j-1}, \dots, S_1 | S_0) \quad (39)$$

のように分解できることに注意しておく。

さて、計数統計では τ 秒間にリードからドットに移った電子の個数 Q の統計を考える。 Q^n の平均値は時刻 t_i でのカレントを $I(t_i)$ とすれば

$$\langle Q^n \rangle = (\Delta\tau)^n \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N \cdots \sum_{i_n=1}^N \langle I(t_{i_1}) I(t_{i_2}) \cdots I(t_{i_{n-1}}) I(t_{i_n}) \rangle. \quad (40)$$

となる。 $\Delta\tau = \tau/N$ である。

従って Q の相関を調べるには、カレントの相関をまず考える必要がある。最初に時刻 t_i での平均カレントを考えてみよう。時刻 t_i でドットの状態に応じて左のリード線との電子のやりとりを考え、ドットに入る時は $+1$ 、出るときは -1 としてカレントをミクロスコピックに考える。するとカレントは以下のように書けることが分かる。

$$\langle I(t_i) \rangle = \sum_{S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_1, S_0} [\nu_L P(0, S_{i-2}, \dots, S_1 | S_0) - \xi_L P(1, S_{i-2}, \dots, S_1 | S_0)] P(S_0). \quad (41)$$

$P(S_0)$ は初期時刻に状態 S_0 をとる確率である。カレント相関も同じのりで考えることができる。時刻 t_i と時刻 t_j でのカレントの相関を求めてみよう。 $t_i > t_j$ とする。 t_i および t_j でのすべての可能なプロセスを書き下してやると、以下のように書けることが分かる。

$$\begin{aligned} \langle I(t_i) I(t_j) \rangle &= \sum_{S_{i-2} \cdots S_{j+1}} \sum_{S_{j-2} \cdots S_1, S_0} \\ &\quad \left[\nu_L P(0, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 1) \times \nu_L P(0, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \right. \\ &\quad + \nu_L P(0, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 0) \times (-\xi_L) P(1, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \\ &\quad + (-\xi_L) P(1, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 1) \times \nu_L P(0, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \\ &\quad \left. + (-\xi_L) P(1, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 0) \times (-\xi_L) P(1, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \right] P(S_0). \end{aligned} \quad (42)$$

N 体相関も同様にできるが、表式は複雑になる。これらの練習問題から、カレント相関および Q の高次平均などを系統的に計算する方法が、発見法的に見つかる。以下のように時間発展演算子

$\mathcal{L}$ を変形してみよう。

$$L(\chi) = \begin{pmatrix} \nu_L + \nu_R & -\xi_L e^{-i\chi} - \xi_R \\ -\nu_L e^{i\chi} - \nu_R & \xi_L + \xi_R \end{pmatrix} \quad (43)$$

ここで χ は、後述してくようにカレントの相関を系統的に導出するための道具で前述の計数場にあたる。計数場 χ を 0 にすればもとの時間発展演算子が得られる ($L(\chi = 0) = \mathcal{L}$)。いま

$$J_L = -\frac{\partial L(\chi)}{\partial(i\chi)} \Big|_{\chi=0} = \begin{pmatrix} 0 & -\xi_L \\ \nu_L & 0 \end{pmatrix} \quad (44)$$

を定義しておく。カレントやカレント相関は J_L を使うと次のように表現できることに注意しておこう。

$$\begin{aligned} \langle I(t_i) \rangle &= \sum_{S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_1, S_0} [\nu_L P(0, S_{i-2}, \dots, S_1 | S_0) - \xi_L P(1, S_{i-2}, \dots, S_1 | S_0)] P(S_0) \\ &= \nu_L P_0(t_{i-1}) - \xi_L P_1(t_{i-1}) = \langle \varphi_0 | \begin{pmatrix} 0 & -\xi_L \\ \nu_L & 0 \end{pmatrix} | P(t_{i-1}) \rangle \\ &= \langle \varphi_0 | J_L e^{-L(0)t_{i-1}} | P(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \langle I(t_i) I(t_j) \rangle &= \sum_{S_{i-2} \dots S_{j+1}} \sum_{S_{j-2} \dots S_1, S_0} \left[\nu_L P(0, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 1) \times \nu_L P(0, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \right. \\ &\quad + \nu_L P(0, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 0) \times (-\xi_L) P(1, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \\ &\quad + (-\xi_L) P(1, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 1) \times \nu_L P(0, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \\ &\quad \left. + (-\xi_L) P(1, S_{i-2}, S_{i-3}, \dots, S_{j+1} | 0) \times (-\xi_L) P(1, S_{j-2}, S_{i-3}, \dots, S_1 | S_0) \right] P(S_0) \\ &= \langle \varphi_0 | J_L e^{-L(0)(t_i - t_j)} J_L e^{-L(0)t_{j-1}} | P(t_0) \rangle \quad (t_i > t_j). \end{aligned} \quad (46)$$

ここで 1.2.2 で定義した $\langle \varphi_0 |$ を使った。このようにカレント相関を求めるには、測りたい時間に J_L を挿入し最後に $\langle \varphi_0 |$ を使って平均の操作をすればよいことになる。さらに進むために、特性関数を以下のように定義しておこう。

$$\begin{aligned} Z(\chi) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \varphi_0 | e^{-L(\chi)\Delta\tau} e^{-L(\chi)\Delta\tau} \dots e^{-L(\chi)\Delta\tau} | P(t_0) \rangle \\ &= \langle \varphi_0 | e^{-L(\chi)\tau} | P(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (47)$$

この特性関数を使うと、 Q に関する一次のモーメントをきれいに書くことができる。 $\langle Q \rangle$ はカレントを積分して与えられるので以下のように計算できる。

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \int_0^\tau dt \langle I(t) \rangle \\ &= \int_0^\tau dt \langle \varphi_0 | J_L e^{-L(0)t} | P(t_0) \rangle \\ &= \int_0^\tau dt \langle \varphi_0 | e^{-L(0)(\tau-t)} J_L e^{-L(0)t} | P(t_0) \rangle \\ &= \frac{\partial Z}{\partial(i\chi)} \Big|_{\chi=0} \end{aligned} \quad (48)$$

ここで、 $\langle \varphi_0 | L(0) = 0$ から $\langle \varphi_0 | e^{-L(0)t} = \langle \varphi_0 |$ を用いた。さらに 2 階微分が $\langle Q^2 \rangle$ を与えるのは、もはや容易であろう。以下のように確かめられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Z}{\partial (i\chi)^2} \Big|_{\chi=0} &= \int_0^\tau dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle \varphi_0 | e^{-L(0)(\tau-t_1-t_2)} J_L e^{-L(0)(t_1-t_2)} J_L e^{-L(0)t_2} | P(t_0) \rangle \\ &+ \int_0^\tau dt_1 \int_{t_1}^\tau dt_2 \langle \varphi_0 | e^{-L(0)(\tau-t_1-t_2)} J_L e^{-L(0)(t_2-t_1)} J_L e^{-L(0)t_1} | P(t_0) \rangle \\ &= \int_0^\tau dt_2 \int_0^\tau dt_1 \langle I(t_1) I(t_2) \rangle \\ &= \langle Q^2 \rangle \end{aligned} \quad (49)$$

n 次相関は一般に

$$\frac{\partial^n Z}{\partial (i\chi)^n} \Big|_{\chi=0} = \langle Q^n \rangle \quad (50)$$

のように導出される。このような性質から χ が 1.1 節で説明した計数場の役割を持っていることが分かるのである。最後に 1.1 節で述べた方法に従って、大きな τ での Q の分布関数の振る舞いを調べよう。右固有方程式

$$L(\chi) |\psi_j(\chi)\rangle = \lambda_j(\chi) |\psi_j(\chi)\rangle \quad (51)$$

の固有値 $\lambda_j(\chi)$ と固有ベクトルを使って、 $|P(t_0)\rangle = \sum_{j=1,2} a_j |\psi_j(\chi)\rangle$ のように初期状態が展開されたとしよう。こうすると、特性関数 Z は

$$Z(\chi) = \langle \varphi_0 | \sum_j e^{-\lambda_j(\chi)\tau} a_j |\psi_j(\chi)\rangle \sim e^{-\lambda_1(\chi)\tau} \quad (Re(\lambda_1) < Re(\lambda_2)) \quad (52)$$

と固有値 λ_j と展開係数で書けることが分かる。。よってキュムラント生成汎関数は特性関数の $\log$ をとって τ で割ったものとして定義されるので、以下のような見積もりができる。

$$F(\chi) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \ln Z(\chi) \sim -\lambda_1(\chi) \quad (53)$$

これから、残る問題は最低固有値を求めることとなるのである。固有値方程式 $|L(\chi) - \lambda I| = 0$ を解くと

$$\lambda_{\pm} = \Gamma \pm \Gamma \sqrt{1 - f_L^+ f_R^-(1 - e^{-i\chi}) - f_R^+ f_L^-(1 - e^{i\chi})} \quad (54)$$

$$f_{\alpha}^+ = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0 - \mu_{\alpha})} + 1}, \quad f_{\alpha}^- = 1 - f_{\alpha}^+ \quad (\alpha = L, R) \quad (55)$$

が得られる。 λ_- の方が実部が小さいので、最終的に得られるキュムラント生成汎関数は以下のようになる。

$$F(\chi) = -\Gamma + \Gamma \sqrt{1 - f_L^+ f_R^-(1 - e^{-i\chi}) - f_R^+ f_L^-(1 - e^{i\chi})} \quad (56)$$

これが古典系の確率過程で得られるキュムラント生成汎関数である。

2 量子系における計数統計

2.1 Schwinger-Keldysh Formalism

2.1.1 “Contour ordered” の考え方

ここからは、量子系の話をしていく。量子系での道具として Schwinger-Keldysh 法を使っている [4, 5]。まず、記号の約束をする。系のハミルトニアンは、非摂動項 H_0 と摂動項 V に分かれているとする。また、 H_0 は時間に陽に依存しない場合だけを考えていこう。すなわち、全系のハミルトニアンは

$$H = H_0 + V \quad (57)$$

で与えられる。一般の演算子 A に対し、対応するハイゼンベルグ演算子を $A(t)$ 、相互作用描像での演算子を $\tilde{A}(t)$ と書く。また時間の変数で τ などのようにギリシャ文字で書いたときは Keldysh contour 上のパラメータを意味し、 s, t, u のように英字で書いたときは実時間をあらわすものとする。Keldysh contour は、実軸上の時間積分路に順序をつけて経路を少し変えたものである。図 5 を見れば容易に理解できると思う。図 5 において、 $\tau_1, \dots, \tau_9$ は Keldysh contour 上の実パラメータ

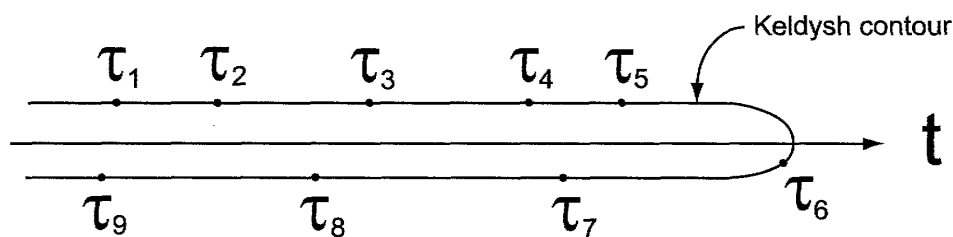


図 5: Keldysh contour

で、 $\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_9$ を満たしている。時間順序積と同様に、 τ を左から大きい順に並べる演算子を $\hat{T}_c$ と書く。

任意の演算子 A の時刻 t での期待値を求めることを考えよう。初期の密度行列は H_0 と交換するとしよう。多くの問題でこのような初期条件をとる場合があるので、ここからの話は常に初期条件に関してこの条件が満たされているものとする。このとき演算子 A の時刻 t での期待値を求める公式は以下で与えられる。

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \langle e^{\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \rangle \\ &= \langle \overrightarrow{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} \tilde{A}(t) \overleftarrow{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} \rangle \end{aligned} \quad (58)$$

いま、 $\tilde{A}(t)$ は相互作用表示を意味し $\tilde{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$ で定義される。また $\overrightarrow{T}, \overleftarrow{T}$ はそれぞれ時間順序積演算子、反時間順序積演算子である。

証明 時間に依存する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t) \quad (59)$$

で与えられ、その一般解は $\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\psi(t_0)$ である。一方で、(57) により、(59) は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = (H_0 + V)\psi(t) \quad (60)$$

であるので、 $\psi'(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\psi(t)$ と書けば、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) = \tilde{V}(t)\psi'(t) \quad (61)$$

となる。これを解くと

$$\begin{aligned} \psi(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \overleftarrow{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)\right) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} \psi(t_0) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \psi(t_0) \end{aligned} \quad (62)$$

を得る。よって一般の演算子 A に対し、

$$e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} A e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} \left(\overrightarrow{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} \right) \tilde{A}(t) \left(\overleftarrow{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} \right) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} \quad (63)$$

が成立するので $\langle A(t) \rangle = \text{Tr}(A(t)\rho_0)$ において ρ_0 として $[\rho_0, H_0] = 0$ なるものをもってれば、(58) が成立していることが分かる。(証明終わり)

さて、(58) 式に現れる T 積の項は Taylor 展開により、

$$\overleftarrow{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t du_1 \int_{t_0}^t du_2 \cdots \int_{t_0}^t du_n \overleftarrow{T} [\tilde{V}(u_1) \tilde{V}(u_2) \cdots \tilde{V}(u_n)] \quad (64)$$

$$\overrightarrow{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^t ds_2 \cdots \int_{t_0}^t ds_n \overrightarrow{T} [\tilde{V}(s_1) \tilde{V}(s_2) \cdots \tilde{V}(s_n)] \quad (65)$$

と表せるので、(58) 式は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} & \overrightarrow{T} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)\right) \tilde{A}(t) \overleftarrow{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t du \tilde{V}(u)} \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{N+M} \frac{1}{N!} \frac{1}{M!} (-1)^M \int_{t_0}^t du_1 \int_{t_0}^t du_2 \cdots \int_{t_0}^t du_N \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^t ds_2 \cdots \int_{t_0}^t ds_M \\ & \quad \overrightarrow{T} [\tilde{V}(s_1) \tilde{V}(s_2) \cdots \tilde{V}(s_M)] \tilde{A}(t) \overleftarrow{T} [\tilde{V}(u_1) \tilde{V}(u_2) \cdots \tilde{V}(u_N)] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{n C_m}{n!} (-1)^m \int_{t_0}^t du_1 \cdots \int_{t_0}^t du_{n-m} \int_{t_0}^t ds_1 \cdots \int_{t_0}^t ds_m \\ & \quad \overrightarrow{T} [\tilde{V}(s_1) \tilde{V}(s_2) \cdots \tilde{V}(s_m)] \tilde{A}(t) \overleftarrow{T} [\tilde{V}(u_1) \tilde{V}(u_2) \cdots \tilde{V}(u_{n-m})] \end{aligned} \quad (66)$$

ただし、 $M + N \equiv n, M = m$ と書き換えた。この (66) の値が、Keldysh contour C を用いて

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_C d\tau_1 \int_C d\tau_2 \cdots \int_C d\tau_n \hat{T}_C [\tilde{V}(\tau_1) \tilde{V}(\tau_2) \cdots \tilde{V}(\tau_n) \tilde{A}(t)] \quad (67)$$

で表されることを見ていく。 V の 1 次のオーダーでは、積分変数 τ_1 が、積分路の上半面にあるか下半面にあるかで場合わけして、

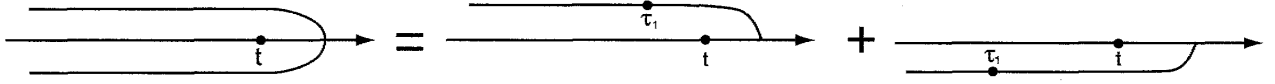


図 6: 積分路の上半面と下半面への分割

$$\begin{aligned}
 & \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_c d\tau_1 \hat{T}_c \tilde{V}(\tau_1) \tilde{A}(t) \\
 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t du \tilde{A}(t) \tilde{V}(u) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)(-1) \int_{t_0}^t ds \tilde{V}(s) \tilde{A}(t)
 \end{aligned} \quad (68)$$

ただし、第二項目の (-1) は向きが負を表す。すなわち、 $\int_t^{t_0} = -\int_{t_0}^t$ からきている。 V の 2 次のオーダーでは、 τ_1, τ_2 が Keldysh contour 上にどのように分布しているかで場合わけすれば

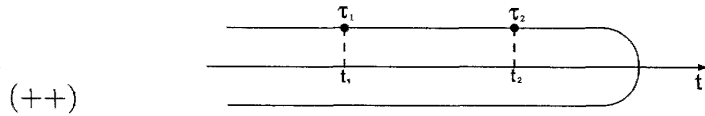
$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_c dt_1 \int_c dt_2 \hat{T}_c [\tilde{V}(t_1) \tilde{V}(t_2)] \tilde{A}(t) \\
 &= \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t du_1 \int_{t_0}^t du_2 \tilde{A}(t) \overleftarrow{T} (\tilde{V}(u_1) \tilde{V}(u_2)) \\
 &+ \frac{2}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 (-1) \int_{t_0}^t du_1 \int_{t_0}^t ds_1 \tilde{V}(u_1) \tilde{A}(t) \tilde{V}(s_1) \\
 &+ \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 (-1)^2 \int_{t_0}^t ds_1 \int_{t_0}^t ds_2 \overrightarrow{T} (\tilde{V}(s_1) \tilde{V}(s_2)) \tilde{A}(t)
 \end{aligned} \quad (69)$$

で一致する。同様に n 次でもパラメータ $\tau_1, \dots, \tau_n$ が Keldysh contour 上にどのように分布するかを考慮すれば示せる。このように、量子系における演算子の時間発展は、Keldysh contour 上の積分で記述することができる。

一般に、電気伝導の問題だけでなく、非平衡輸送現象全般において、物理量 A, B のハイゼンベルグ表示 $A(t), B(t)$ に対し、以下のような量が重要になることが多い。それは counter ordered グリーン関数とよばれ、

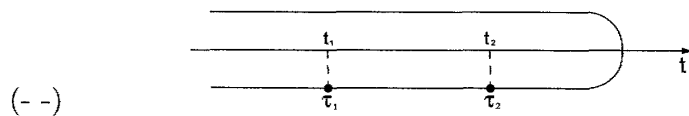
$$G_{AB}(\tau_1, \tau_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_c A(\tau_1) B(\tau_2) \rangle \quad (70)$$

のように定義される。例によって τ_1, τ_2 の分布によって場合わけを行うと、



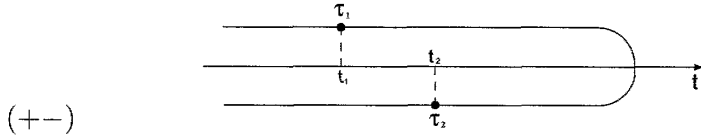
$$t_1 < t_2 \text{ のとき } G_{AB}^{++}(t_1, t_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \langle B(t_2) A(t_1) \rangle \quad (-): \text{Boson}, (+): \text{Fermion} \quad (71)$$

$$t_1 > t_2 \text{ のとき } G_{AB}^{++}(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle A(t_1) B(t_2) \rangle \quad \text{Boson, Fermion} \quad (72)$$

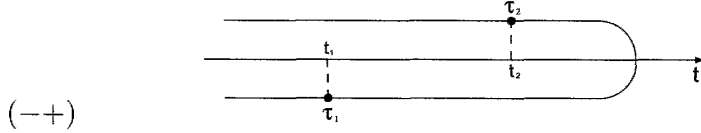


$$t_1 < t_2 \text{ のとき } G_{AB}^{--}(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle A(t_1) B(t_2) \rangle \quad \text{Boson, Fermion} \quad (73)$$

$$t_1 > t_2 \text{ のとき } G_{AB}^{--}(t_1, t_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \langle B(t_2) A(t_1) \rangle \quad (-): \text{Boson}, (+): \text{Fermion} \quad (74)$$



$$G_{AB}^{+-}(t_1, t_2) = \mp \frac{i}{\hbar} \langle B(t_2) A(t_1) \rangle \equiv G_{AB}^{<}(t_1, t_2) \quad (-): \text{Boson}, (+): \text{Fermion} \quad (75)$$



$$G_{AB}^{-+}(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle A(t_1) B(t_2) \rangle \equiv G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \quad \text{Boson, Fermion} \quad (76)$$

この $G_{AB}^{<}(t_1, t_2)$ を Keldysh の lesser グリーン関数、 $G_{AB}^{>}(t_1, t_2)$ を greater グリーン関数と呼ぶ。
この $G^{<}$ と $G^{>}$ を用いると、 G^{++} と G^{--} はそれぞれ以下のように書くことができる。

$$G_{AB}^{++}(t_1, t_2) = \theta(t_2 - t_1) G_{AB}^{<}(t_1, t_2) + \theta(t_1 - t_2) G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \quad (77)$$

$$G_{AB}^{--}(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) G_{AB}^{<}(t_1, t_2) + \theta(t_2 - t_1) G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \quad (78)$$

また、遅延グリーン関数と先進グリーン関数も $G^{<}$ と $G^{>}$ で表すことができる。

$$G_{AB}^r(t_1, t_2) \equiv -\frac{i}{\hbar} \theta(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_2)]_{\pm} \rangle \quad (79)$$

$$= G_{AB}^{++}(t_1, t_2) - G_{AB}^{<}(t_1, t_2) \quad (80)$$

$$= -G_{AB}^{--}(t_1, t_2) + G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \quad (81)$$

$$G_{AB}^a(t_1, t_2) \equiv \frac{i}{\hbar} \theta(t_2 - t_1) \langle [A(t_1), B(t_2)]_{\pm} \rangle \quad (82)$$

$$= G_{AB}^{++}(t_1, t_2) - G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \quad (83)$$

$$= -G_{AB}^{--}(t_1, t_2) + G_{AB}^{<}(t_1, t_2) \quad (84)$$

ここで $[..., ...]_{\pm}$ は、+ はボゾンに対して交換関係を取り、- はフェルミオンに対して反交換関係をとることを意味する。さらに、Keldysh グリーン関数を

$$G_{AB}^k(t_1, t_2) = G_{AB}^{++}(t_1, t_2) + G_{AB}^{--}(t_1, t_2) \quad (85)$$

$$= G_{AB}^{<}(t_1, t_2) + G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \quad (86)$$

と定義する。この表式はボゾンでもフェルミオンでも同じ表現である。さらに、 G^a 、 G^r 、 G^k と G^{++} 、 G^{--} 、 G^{+-} 、 G^{-+} の間は次の「Keldysh 回転」と呼ばれる変換によってつながることができる。

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \tilde{G} = \begin{pmatrix} 0 & G_{AB}^a \\ G_{AB}^r & G_{AB}^k \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} G_{AB}^{++} & G_{AB}^{+-} \\ G_{AB}^{-+} & G_{AB}^{--} \end{pmatrix} \quad (87)$$

$$\tilde{G} = Q G Q^t \quad (88)$$

++ や ± 表示でグリーン関数を考えるより、遅延グリーンや先進グリーン関数で議論した方が物理的なイメージがとらえられやすい場合があり、その時には便利な変換である。

2.1.2 Langreth rule

物理量 A, B, C, D に対して、次のグリーン関数を考える。

$$G_{AB}(\tau_1, \tau_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_c A(\tau_1) B(\tau_2) \rangle \quad (89)$$

$$G_{CD}(\tau_1, \tau_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_c C(\tau_1) D(\tau_2) \rangle \quad (90)$$

これらのグリーン関数に対し、次の contour orderd 積分を考えよう。

$$I(\tau_1, \tau_2) = \int_C d\tau G_{AB}(\tau_1, \tau) G_{CD}(\tau, \tau_2) \quad (91)$$

図 6(358 ページ) のように積分路を分割して書けば、lesser 成分は

$$I^<(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}^{++}(t_1, t) G_{CD}^{+-}(t, t_2) - \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}^{+-}(t_1, t) G_{CD}^{--}(t, t_2) \quad (92)$$

であるが、式 (80) と (84) をもちいれば、

$$I^<(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}^r(t_1, t) G_{CD}^<(t, t_2) + \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}^<(t_1, t) G_{CD}^a(t, t_2) \quad (93)$$

を得る。greater 成分に対しても同じような式が成り立つので、まとめて書くと

$$I^{<>}(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}^r(t_1, t) G_{CD}^{<>}(t, t_2) + \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}^{<>}(t_1, t) G_{CD}^a(t, t_2) \quad (94)$$

を得る。これは Langreth rule と呼ばれ [6]、いささか抽象的な経路表示の積分の lesser 及び greater 成分を実時間表示で表わすときに、非常に重要になる変換である。

2.1.3 松原グリーン関数との類似点

Schwinger-Keldysh グリーン関数は、ダイアグラム計算をするために便利な手法である。ダイアグラム計算は、平衡系の多体問題の摂動計算での重要なグリーン関数の一つである松原グリーン関数のそれと同じ構造をもつ。むしろ同じ構造をもつように、開発されたと言ってもよい。簡単のため自由ボソンを考えてそれを体感してみよう。ハミルトニアンを

$$H_0 = \hbar\omega b^\dagger b \quad (95)$$

としよう。松原グリーン関数は、逆温度 β の小さい順に右から並べる演算子 T_β を用いて、

$$g_{bb^\dagger}^M(u_1, u_2) = -\frac{1}{\hbar} \langle T_\beta b(u_1) b^\dagger(u_2) \rangle \quad (96)$$

で定義される。ただし $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(\dots e^{-\beta H})$ で、 $b(u_1) = e^{-uH_0/\hbar} b e^{uH_0/\hbar}$ はハイゼンベルグ演算子である。この場合、4 点関数に対してたとえば

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{\hbar}\right)^2 \langle T_\beta b(u_1) b^\dagger(u_2) b(u_3) b^\dagger(u_4) \rangle &= (-1/\hbar) \langle T_\beta b(u_1) b^\dagger(u_4) \rangle (-1/\hbar) \langle T_\beta b(u_3) b^\dagger(u_2) \rangle \\ &+ (-1/\hbar) \langle T_\beta b(u_1) b^\dagger(u_2) \rangle (-1/\hbar) \langle T_\beta b(u_3) b^\dagger(u_4) \rangle \\ &= g_{bb^\dagger}^M(u_1, u_4) g_{bb^\dagger}^M(u_3, u_2) + g_{bb^\dagger}^M(u_1, u_2) g_{bb^\dagger}^M(u_3, u_4) \end{aligned} \quad (97)$$

のように、ウィックの定理を使って2点相関で展開できる。contour ordered グリーン関数でも同様にこの分解がそのままそっくり使える。4点関数を使って実際に見てみよう。Contour ordered の2点関数は以前定義した

$$G_{bb^\dagger}(t_1, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_c b(t_1) b^\dagger(t_2) \rangle \quad (98)$$

である。4点関数はウィックの定理を使って実際に次のように展開できることを各自計算をして実感してほしい。

$$\begin{aligned} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle T_c b(t_1) b^\dagger(t_2) b(t_3) b^\dagger(t_4) \rangle &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c b(t_1) b^\dagger(t_4) \rangle \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c b(t_3) b^\dagger(t_2) \rangle \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c b(t_1) b^\dagger(t_2) \rangle \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c b(t_3) b^\dagger(t_4) \rangle \\ &= G_{bb^\dagger}(t_1, t_4) G_{bb^\dagger}(t_3, t_2) + G_{bb^\dagger}(t_1, t_2) G_{bb^\dagger}(t_3, t_4) \end{aligned} \quad (99)$$

2点関数の中身の時間順序などはすべて T_c に押し込めてあるのでこの関係が成立するのである。一般の n 点関数の場合も同様である。一般に、contour orderd の相関関数に対して松原グリーン関数でのダイアグラム展開のテクニックがそのまま使える。Schwinger-Keldysh 法の一番の強みは、このダイアグラムテクニックが使えることにある。したがって相互作用があり系が可積分でないときにも、系統的な摂動展開が可能になる。系のハミルトニアンが2次形式で可積分であるときは、Scwinger-Keldysh 法を用いる必要はなく、「どんな方法」でも、カレントの計算は可能である。Scwinger-Keldysh 法が威力を発揮するのは、ダイアグラムが活躍する相互作用のある場面であることは、ここで強調されるべきことである。

2.1.4 練習 1: 量子ドットを介する電流

以上で Schwinger-Keldysh の大事な部分の一部を紹介した。実際に例題を使ってこれらの技術がどのように使えるのかを見ていこう。まず最初に電子だめとドットが接している系を考え、平均電流の公式を導出してみる。系のハミルトニアンは

$$H = \sum_k \epsilon_{Lk} a_{Lk}^\dagger a_{Lk} + \sum_k \epsilon_{Rk} a_{Rk}^\dagger a_{Rk} + \epsilon_0 d^\dagger d + \sum_{\alpha=L,R} (\gamma_{\alpha,k} a_{\alpha k}^\dagger d + \gamma_{\alpha,k}^* d^\dagger a_{\alpha k}) \quad (100)$$

で与えられる。第一項目は左のリード線、第二項目は右のリード線、第三項目はドットのハミルトニアンで、これらは非摂動項でありこの章のはじめに出してきた H_0 にあたる。第四項目は電子溜めとドットの相互作用項であり章はじめの記号で言う V の項にあたる。左電子だめとドットの間の電流演算子は

$$\begin{aligned} j_L &\equiv -\frac{\partial}{\partial t} \sum_k a_{Lk}^\dagger a_{Lk} = \frac{i}{\hbar} \left[\sum_k a_{Lk}^\dagger a_{Lk}, H \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_k (\gamma_{L,k} a_{Lk}^\dagger d - \gamma_{L,k}^* d^\dagger a_{Lk}) \end{aligned} \quad (101)$$

であり、同様にドットと右電子だめの間の電流演算子は

$$j_R = \frac{i}{\hbar} \sum_k (\gamma_{R,k} a_{Rk}^\dagger d - \gamma_{R,k}^* d^\dagger a_{Rk}) \quad (102)$$

である。(75) 式で定義される lesser グリーン関数を持ちいれば、平均電流は、

$$\begin{aligned} \langle j_L(t) \rangle &= \sum_k \left(\frac{i}{\hbar} \gamma_{L,k} \langle a_{Lk}^\dagger(t) d(t) \rangle + c.c \right) \\ &= 2\text{Re} \sum_k \gamma_{Lk} G_{d, a_{Lk}^\dagger}^<(t, t) \end{aligned} \quad (103)$$

と表わされることがわかる。さて初期状態の密度行列は

$$\rho(t_0) = e^{-\beta(H_L - \mu_L N_L)} \otimes e^{-\beta(H_R - \mu_R N_R)} \otimes \rho_s \quad (104)$$

のように系とリード線が分割されている状態をとろう。熱浴が初期に平衡分布であり熱浴が熱浴として機能しさえすれば、注目する系の初期状態は定常状態に影響を与えず何をとってもよい、とする哲学を使っている。ただし $N_L = \sum_k a_{Lk}^\dagger a_{Lk}$ は左のリード線の粒子数演算子であり。 $\rho_s = e^{-\beta(H_s - \mu_s N_s)}$ はドットの密度行列である。求めたい (103) 式の中の lesser グリーン関数を求めるために、まず contour ordered グリーン関数を考えよう。まず以下のような表現が得られることに注意しよう。

$$\begin{aligned} G_{d, a_{Lk}^\dagger}(\tau_1, \tau_2) &= -\frac{i}{\hbar} \langle T_c [d(\tau_1) a_{Lk}^\dagger(\tau_2)] \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle T_c [S_c \tilde{d}(\tau_1) \tilde{a}_{Lk}^\dagger(\tau_2)] \rangle \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n+1} \frac{1}{(n+1)!} \int_c d\xi_1 \cdots \int_c \xi_{n+1} \tilde{V}(\xi_1) \cdots \tilde{V}(\xi_{n+1}) \tilde{d}(\tau_1) \tilde{a}_{Lk}^\dagger(\tau_2) \rangle \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int d\xi_1 \gamma_{Lk}^* \langle T_c \tilde{a}_{Lk}(\xi_1) \tilde{a}_{Lk}^\dagger(\tau_2) \rangle \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n+1} \frac{1}{(n+1)!} (n+1) \\ &\quad \times \int_c d\xi_2 \cdots \int_c \xi_{n+1} \langle \tilde{T}_c \tilde{V}(\xi_2) \cdots \tilde{V}(\xi_{n+1}) \tilde{d}(\xi_1) \tilde{d}(\tau_1) \rangle \\ &= \gamma_{Lk}^* \int d\xi \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c \tilde{a}_{Lk}(\xi_1) \tilde{a}_{Lk}^\dagger(\tau_2) \rangle \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle T_c S_c \tilde{d}^\dagger(\xi_1) \tilde{d}(\tau_1) \rangle \\ &= \gamma_{Lk}^* \int_c d\xi G_{d, d^\dagger}(\tau_1, \xi) g_{a_{Lk}, a_{Lk}^\dagger}(\xi, \tau_2) \end{aligned} \quad (105)$$

ここで S_c はすべての摂動の寄与をまとめて書いたものである。また、途中の計算で $\tilde{V}(\xi_1)$ の具体的な表式を代入し、ウィックの定理を用いた。小文字のグリーン関数は非摂動ハミルトニアンによる時間発展で得られるグリーン関数で、大文字のグリーン関数は摂動項を含んだ全系のハミルトニアンで時間発展するグリーン関数である。つまり、

$$g_{a_{Lk}, a_{Lk}^\dagger}(\xi, \tau_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_c \tilde{a}_{Lk}(\xi) \tilde{a}_{Lk}^\dagger(\tau_2) \rangle \quad (106)$$

$$G_{d, d^\dagger}(\tau_1, \xi) = -\frac{i}{\hbar} \langle T_c d(\tau_1) d^\dagger(\xi) \rangle \quad (107)$$

である。さらに既に説明した Langreth rule を用いれば、

$$G_{d,a_{Lk}^\dagger}^< = \gamma_{Lk}^* \int_{-\infty}^{\infty} ds \left[G_{d,d^\dagger}^r(t,s) g_{a_{Lk},a_{Lk}^\dagger}^<(s,t) + G_{d,d^\dagger}^<(t,s) g_{a_{Lk},a_{Lk}^\dagger}^a(s,t) \right] \quad (108)$$

となることを使うと、遅延グリーン関数や先進グリーン関数など計算しやすい式で表現することができる。これを (103) に代入すれば、

$$\begin{aligned} \langle J_L \rangle &= 2\text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} ds (G_{d,d^\dagger}^r(t,s) \sum_k |\gamma_{Lk}|^2 g_{a_{Lk},a_{Lk}^\dagger}^<(s,t) + G_{d,d^\dagger}^<(t,s) \sum_k |\gamma_{Lk}|^2 g_{a_{Lk},a_{Lk}^\dagger}^a(s,t)) \\ &= 2\text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} ds (G_{d,d^\dagger}^r(t,s) \Sigma_L^<(s,t) + G_{d,d^\dagger}^<(t,s) \Sigma_L^a(s,t)) \end{aligned} \quad (109)$$

ここで Σ は自己エネルギーであり、自己エネルギーの先進部分は

$$\begin{aligned} \Sigma_L^a(s,t) &= \sum_k |\gamma_{Lk}|^2 i\theta(t-s) e^{i\epsilon_{Lk}(s-t)} \\ &= i\theta(t-s) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon (2\pi \sum_k |\gamma_{Lk}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{Lk})) e^{i\epsilon_{Lk}(s-t)} \\ &= i\theta(t-s) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \Gamma_L(\epsilon) e^{i\epsilon_{Lk}(s-t)} \\ &= i\theta(t-s) \delta(t-s) \frac{\Gamma_L}{2\pi} \end{aligned} \quad (110)$$

のように計算される。ここで簡単のためにワイドバンド極限 $\Gamma_L(\epsilon) = \Gamma_L$ を持つ系を仮定した。もうひとつの $\Sigma^<$ は同様の計算により、

$$\Sigma_L^<(s,t) = i\Gamma_L \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_L(\omega) e^{-i\omega(s-t)} \quad (111)$$

と与えられる。ここで f_α は左 ($\alpha = L$) および右 ($\alpha = R$) のリード線の化学ポテンシャルを持つフェルミ分布関数である。(109) はたたみこみの形をしているので、フーリエ表示で書いたほうがきれいになるので、フーリエ表示に移っておこう。

$$\langle J_\alpha \rangle = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (G_{d,d^\dagger}^r(\omega) \Sigma_\alpha^<(\omega) + G_{d,d^\dagger}^<(\omega) \Sigma_\alpha^a(\omega)), \quad (112)$$

$$\Sigma_\alpha^a(\omega) = i \frac{\Gamma_\alpha}{2} \quad (113)$$

$$\Sigma_\alpha^<(\omega) = i\Gamma_\alpha f_\alpha(\omega) \quad \alpha = L, R \quad (114)$$

ここで保存側 $\langle J_L \rangle + \langle J_R \rangle = 0$ を使うと、さらに式が簡単化される。

$$\begin{aligned} \Gamma_R \langle J_L \rangle - \Gamma_L \langle J_R \rangle &= (\Gamma_R + \Gamma_L) \langle J_L \rangle \\ &= \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{d,d^\dagger}^r(\omega) (\Gamma_R \Sigma_L^<(\omega) - \Gamma_L \Sigma_R^<(\omega)) \end{aligned} \quad (115)$$

遅延グリーン関数は具体的に計算すると $G_{dd^\dagger}^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_0 + i(\frac{\Gamma_L}{2} + \frac{\Gamma_R}{2})}$ なので、次の電流公式を得る。

$$\langle J_L \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\omega - \epsilon_0)^2 + (\frac{\Gamma_L}{2} + \frac{\Gamma_R}{2})^2} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad (116)$$

これが量子ドットを介する自由電子系の電流公式である。 $T(\omega) \equiv \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\omega - \epsilon_0)^2 + (\frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{2})^2}$ と書けば、 $T(\omega)$ は透過率の意味を持ち、ランダウワertypeの電流公式になっていることが見て取れる。

さてここまでの計算で、どこまでが厳密でどこからが仮定なのかを見極めておくことは、非常に大切なことである。初期状態が、それぞれの部分系で平衡である以上、時刻 t での電流の表現 (109) は正しい式である。それからは、定常状態の性質を使っている。つまり (109) は時刻 t のものだが、非常に大きな t では、定常になって一定になっているということ。また、定常状態では任意のグリーン関数は、時間に関して並進対称性があり、元来 (t_1, t_2) の関数であるものが $t_1 - t_2$ の関数のように振る舞うであろうこと。この性質からフーリエ表示が簡単になるのである。今の導出では、定常状態が存在することや、その一意性、また定常状態への緩和などはまったく計算できていないことにも注意すべきである。今やったことは、定常状態が達成されたとしたら、その電流はこの値を持つということである。

2.1.5 練習2: 量子ランジェバンダイナミックスにおける熱の散逸

ここで考えるテーマは、最近原田と佐々が行った古典系でのランジェバン方程式における揺動散逸定理の破れとその補正に関する研究と密接に関係する [7]。原田と佐々は以下のような状況における、揺動散逸定理の破れの考察を行った。まず慣性項が無視できる程度に、散逸の強いランジェバン系を考え、その粒子に任意の時間依存性をもつ外力をかける。この古典系のダイナミックスは以下のように表わされる。

$$\gamma \dot{x}(t) = F(x(t), t) + \eta(t) + \epsilon f_p(t), \quad \langle \eta(t) \eta(u) \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t - u) \quad (117)$$

$F(x(t), t)$ はいま説明した系を非平衡にするための駆動力である。その結果系は、平衡からほど遠い定常状態におちこむ。そのような状況ではもや平衡近傍の物理は成り立たない。揺動散逸定理とは、 $F = 0$ の平衡状態において粒子に弱い摂動を加えたときの $\dot{x}$ の応答と、 $\dot{x}$ の平衡での相関関数が結びつくというものである。 $\epsilon f_p(t)$ はこの、「 x を叩いたときの $\dot{x}$ の応答」をみるための小さな摂動である。相関関数や応答関数は以下のように定義される。

$$c(t) = \langle [\dot{x}(t) - v_s][\dot{x}(0) - v_s] \rangle_{ss} \quad (118)$$

$$\langle \delta \dot{x} \rangle_{ss} = \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} du \chi(t, u) f_p(u) \quad (119)$$

ここで $\langle \dots \rangle_{ss}$ は定常状態平均を表す。すると、 $F = 0$ の平衡系では、揺動散逸定理

$$c(\omega) = 2k_B T \chi(\omega) \quad (120)$$

が成り立つ。 $C(\omega)$ や $\chi(\omega)$ は $C(t)$ および $\chi(t)$ のフーリエ変換である。原田と佐々が見つけた関係とは、非平衡で有限になる熱浴に逃げる熱流を考えると、熱流は揺動散逸定理の破れの度合いに比例する、というものである。 $F \neq 0$ の状況で、熱流を I とすると以下が成立する。

$$I = \gamma \left\{ v_s^2 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [c(\omega) - 2k_B T \chi(\omega)] \right\} \quad (121)$$

この関係は、いまのところ環境がランジェバンダイナミックスで表わされ、かつランジェバンノイズが空間的に等方である理想的な場合にのみ成り立つと考えられているが、そのような限られた領域においてであっても、非平衡と平衡を明快につなぐ法則があることは驚きである。

さてこれの量子バージョンを出すことは、Schwinger-Keldysh 法を使うと比較的容易になるので練習問題としてこれを考えてみよう [8]。そのためにまず応答関数とは何か、量子ランジェバン方程式は何かなどのいくつかの準備をする。

1. 応答関数

量子系で考える系のハミルトニアンは、全系のハミルトニアン H に摂動 $\epsilon f_p(t)$ がかったものとする。

$$H(t) = H - \epsilon B f_p(t) \quad (122)$$

系の密度行列は、摂動に対する応答 $\delta\rho(t)$ をもちいて

$$\rho = \rho_{st} + \delta\rho(t) \quad (123)$$

と書く。 ρ_{st} は定常状態での密度行列である。 ρ の時間発展はフォンノイマン方程式で与えられる。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) &= [H(t), \rho(t)] \\ &= [H, \rho(t)] - \epsilon [B, \rho(t)] f_p(t) \end{aligned} \quad (124)$$

よって応答 $\delta\rho(t)$ は ϵ の 1 次の範囲で

$$\delta\rho(t) = -\frac{\epsilon}{i\hbar} \int_{t_{ini}}^t du f_p(u) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_{ini})H} [B(u), \rho_{st}] e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_{ini})H} \quad (125)$$

となる。一般のハイゼンベルグ表示の物理量 $A(t)$ の応答は、これを使うと

$$\begin{aligned} \delta\langle A(t) \rangle &= Tr(A \delta\rho(t)) \\ &= \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{i}{\hbar} \theta(t-u) \langle [A(t), B(u)] \rangle_{st} f_p(u) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} du \{ -G_{AB}^r(t, u) \} \epsilon f_p(u) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} du \chi(t, u) \epsilon f_p(u) \end{aligned} \quad (126)$$

で与えられる。 $-G_{AB}^r(t, u) = \chi(t, u)$ が応答関数である。つまり応答関数は遅延グリーン関数そのものである。この関数形の特徴が、Schwinger-Keldysh グリーン関数との接点を暗示するのである。

2. 量子ランジェバン方程式

一個のブラウン粒子が熱浴に結合している系を考える。一個の粒子と言ってもこれは本当は抽象的なものであり、実際は超電導回路に生じるフラックスなど全く粒子ではない物理系で

量子ランジェバンダイナミックスが実現されていることが多いので一言注意しておく。ここでは、深く説明しないが量子ランジェバン方程式にマップできる系はたくさんあると信じられている。以下のように全系のハミルトニアンが表わされるとしよう [9]。

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) + \sum_l \left[\frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{m_l \omega_l^2}{2} \left(x_l - \frac{\lambda_l x}{m_l \omega_l^2} \right)^2 \right] \quad (127)$$

ここで、 $\sum_l \left[\frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{m_l \omega_l^2}{2} \left(x_l - \frac{\lambda_l x}{m_l \omega_l^2} \right)^2 \right]$ は熱浴からの寄与を表すハミルトニアンで、下つき添え字のついた量は熱浴の自由度に対応し、そうでない量は注目するブラウン粒子の自由度に属する。熱浴の運動を取り込んで考えた系の自由度に対するハイゼンベルグ表示の時間発展方程式は、厳密に以下で与えられることが知られている [9]。

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = -\frac{\partial}{\partial x} V(x, t) - \int_0^\infty du \gamma(u) \dot{x}(t-u) + \eta(t) \quad (128)$$

ここで γ は量子摩擦を表し η は量子ランジェバンノイズであり、 η の 2 点関数の初期状態平均は以下を満たす。

$$\gamma(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{\mathcal{J}(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) \quad (129)$$

$$\langle \eta(t) \eta(u) \rangle = \frac{\hbar}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{-i\omega(t-u)} \frac{\omega}{|\omega|} \mathcal{J}(|\omega|) (1 + f(\omega)) \quad (130)$$

$\mathcal{J}(\omega)$ は熱浴の性質を決める大事な関数であり、スペクトル密度と呼ばれる。以下のように定義される。

$$\mathcal{J}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_l \frac{\lambda_l^2}{m_l \omega_l} \delta(\omega - \omega_l). \quad (131)$$

また、 $f(\omega)$ はボーズ分布関数で、

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (132)$$

である。(準備終わり)

さて、以上で準備ができたので、非平衡定常状態における熱浴に流れ出ていく熱流の公式を導出しよう。注目するブラウン粒子のハミルトニアンを

$$H_s = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) \quad (133)$$

と書くと、そのハイゼンベルグ方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} H_s(t) &= \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} + V(x, t), H \right] \\ &= \sum_l \lambda_l x_l \frac{p}{m} - \sum_l \frac{\lambda_l^2}{2m_l \omega_l^2} \frac{1}{m} (xp + px) \end{aligned} \quad (134)$$

となる。これをエネルギーに関する連続の式と見立てると、右辺が熱流であるとみなすことができ、熱浴に流れ出ていく熱流の演算子は

$$\mathcal{I} = -\sum_l \lambda_l x_l \frac{p}{m} + \frac{\lambda_l^2}{2m_l \omega_l^2} \frac{1}{m} (xp + px) \quad (135)$$

と導出できる。全系の密度行列は初期状態で注目する系と熱浴が分かれているものとしよう。

$$\rho(t_{ini}) = \rho_s \otimes \rho_R \quad (136)$$

$$\rho_S \propto \exp\left[-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2} \sum_l \frac{\lambda_l^2}{m_l \omega_l^2}\right)\right] \quad (137)$$

$$\rho_R \propto \exp\left[-\beta \sum_l \left(\frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{\lambda_l^2 x_l^2}{m_l \omega_l^2}\right)\right] \quad (138)$$

長時間のカレント平均は熱流演算子の定義を使って計算すれば、

$$I \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \langle \mathcal{I}(t) \rangle = I_0 + \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \langle \mathcal{I}_1(t) \rangle \quad (139)$$

と書かれる。ここで I_0 は

$$\begin{aligned} I_0 &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \sum_l \frac{\lambda_l^2}{2m_l \omega_l^2} \frac{1}{m} \langle x(t)p(t) + p(t)x(t) \rangle \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \sum_l \frac{\lambda_l^2}{2m_l \omega_l^2} \frac{d}{dt} \langle x^2(t) \rangle \end{aligned} \quad (140)$$

と定義される。 $\langle \mathcal{I}_1(t) \rangle$ は、

$$\langle \mathcal{I}_1(t) \rangle = - \sum_l \lambda_l \langle x_l(t) \frac{p(t)}{m} \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \sum_l \lambda_l \frac{\partial}{\partial t_1} G_{x,x_l}^k(t_1, t_2)|_{t_1=t_2=t} \quad (141)$$

となり、こうして Keldysh グリーン関数が登場するのである。グリーン関数は以下のように定義される。

$$\begin{aligned} G_{x,x_l}^k(t_1, t_2) &= -\frac{i}{\hbar} \langle x(t_1)x_l(t_2) + x_l(t_2)x(t_1) \rangle \\ &= \lambda_l \int_{-\tau/2}^{\tau/2} ds \{ G_{x,x}^r(t_1, s) g_{x_l, x_l}^k(s, t_2) + G_{x,x}^k(t_1, s) g_{x_l, x_l}^a(s, t_2) \} \end{aligned} \quad (142)$$

但し、小文字のグリーン関数は系と熱浴との間の相互作用部分を抜いたときの時間発展で記述される、非摂動グリーン関数である。非摂動グリーン関数は以下のように定義され、また具体的な計算も容易である。

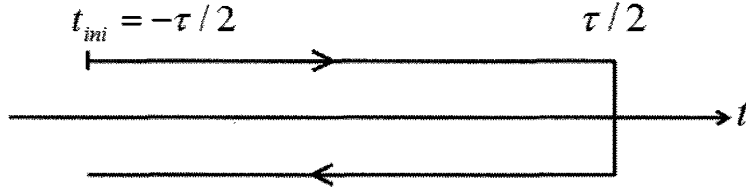
$$g_{x_l, x_l}^k(s, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \langle \tilde{x}_l(s) \tilde{x}_l(t_2) + \tilde{x}_l(t_2) \tilde{x}_l(s) \rangle, \quad (143)$$

$$\tilde{x}_l(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_R t} x_l e^{-\frac{i}{\hbar} H_R t} \quad (H_R = H(\lambda = 0)) \quad (144)$$

さらに以下のように自己エネルギーを定義すると、見た目がすっきりする。

$$\Sigma^k(t', t) \equiv \sum_l \lambda_l^2 g_{x_l, x_l}^k(t', t) \quad (145)$$

$$\Sigma^a(t', t) \equiv \sum_l \lambda_l^2 g_{x_l, x_l}^a(t', t) \quad (146)$$



具体的な計算をしていくと以下のような一般表式を書くことができる。

$$I = I_0 + \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt dt' \{ G_{\hat{x},x}^r(t, t') \Sigma^k(t', t) + G_{\hat{x},x}^R(t, t') \Sigma^a(t', t) \}, \quad (147)$$

$$\Sigma^k(t', t) = -\frac{2i}{\pi} \int_0^\infty d\omega \gamma'(\omega) \frac{\omega}{\tanh(\beta\hbar\omega/2)} \cos(\omega(t' - t)), \quad (148)$$

$$\Sigma^a(t', t) = -\frac{2}{\pi} \theta(t - t') \frac{\partial}{\partial t'} \int_0^\infty d\omega \gamma'(\omega) \cos(\omega(t' - t)). \quad (149)$$

ただし $\gamma'(\omega)$ は、 $\gamma(t)$ のフーリエ変換の実部である；

$$\gamma(\omega) = \int dt \gamma(t) e^{i\omega t} = \gamma'(\omega) + i\gamma''(\omega) \quad (150)$$

あるいは、(129) 式より、

$$\gamma'(\omega) = \frac{\mathcal{J}(\omega)}{|\omega|} \quad (151)$$

とも書ける。次に熱流の一般式のフーリエ表示を考えるためにグリーン関数のフーリエ表示を次のように定義しておこう。

$$G_{A,B}^\alpha(\omega) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt dt' G_{A,B}^\alpha(t, t') e^{i\omega t} e^{-i\omega t'} \quad (\alpha = k, a, r) \quad (152)$$

この定義は、きわめて自然な定義である。もしハミルトニアンに時間があらわに入っていないときは定常状態に時間並進の対称性がある。その時は $G_{A,B}^\alpha(t, t') = G_{A,B}^\alpha(t - t')$ であるので、普通のフーリエ変換となる。(148) から (152) により、(147) は、以下ようになる。

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty d\omega \gamma'(\omega) \frac{\omega}{\tanh(\beta\hbar\omega/2)} \left(\frac{-2i}{\pi} \right) \left\{ \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{i\hbar}{2\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt dt' G_{\hat{x},x}^r(t, t') \cos(\omega(t' - t)) \right\} \\ &\quad - \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{i\hbar}{2\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt dt' \frac{2}{\pi} \delta(t - t') G_{\hat{x},x}^k(t, t') \int_0^\infty d\omega \gamma'(\omega) \cos(\omega(t' - t)) \\ &\quad + \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{i\hbar}{2\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt dt' \frac{2}{\pi} \theta(t - t') G_{\hat{x},x}^k(t, t') \int_0^\infty d\omega \gamma'(\omega) \cos(\omega t) \\ &\quad + I_0 \end{aligned} \quad (153)$$

よって、

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{i\hbar}{2\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt dt' \frac{2}{\pi} \delta(t - t') G_{\hat{x},x}^k(t, t') \int_0^\infty d\omega \gamma'(\omega) \cos(\omega(t' - t)) = I_0 \quad (154)$$

に注意すると、

$$I = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \gamma'(\omega) \left\{ \frac{i\hbar}{2} G_{\dot{x},\dot{x}}^k(\omega) + \frac{\hbar\omega G_{\dot{x},x}^r(\omega)}{\tanh(\beta\hbar\omega/2)} \right\} \quad (155)$$

が得られる。ここで、

$$G_{\dot{x},\dot{x}}(t_1, t_2) = \frac{1}{i\hbar} \langle \dot{x}(t_1) \dot{x}(t_2) + \dot{x}_2(t_1) \dot{x}(t_2) \rangle \quad (156)$$

$$\frac{i\hbar}{2} G_{\dot{x},\dot{x}}^k(\omega) = c(\omega) + 2\pi v_s^2 \delta(\omega) \quad (157)$$

である。なお、 $c(\omega) = \langle \delta\dot{x}(t_1) \delta\dot{x}(t_2) + \delta\dot{x}(t_2) \delta\dot{x}(t_1) \rangle$ 、 $\delta\dot{x} = \dot{x} - v_s$ であることを使うと

$$I = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \dot{\gamma}(\omega) \left\{ 2\pi v_s^2 \delta(\omega) + c(\omega) - \frac{\chi(\omega) \hbar\omega}{\tanh(\beta\hbar\omega/2)} \right\} \quad (158)$$

が得られる。これが量子ランジェバンダイナミックスにおける、熱流の一般式である。ここで、 $\hbar \rightarrow 0$, $\gamma'(\omega) = \gamma$ とすることで、原田と佐々が得た式が再現される。

さて、この節の最初に上のようなきれいな式は、ノイズが空間的に等方なときのみには得られると注意した。それでは空間的に非等方なときはどうなるのであろうか？これを考えるための、一番簡単な例として熱浴とブラウン粒子の結合の仕方が非線形な場合に一般化してみよう。非線形項を含む結合の関数を一般に $z(x)$ とまとめて書いてしまうと、ハミルトニアンは

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) + \sum_l \left[\frac{p_l^2}{2m_l} + \frac{m_l \omega_l^2}{2} \left(x_l - \frac{\lambda_l z(x)}{m_l \omega_l^2} \right)^2 \right] \quad (159)$$

であらわされる。このときのランジェバン方程式は

$$m \frac{d^2}{dt^2} x = -\frac{\partial}{\partial x} V(x, t) - \int_0^\infty du \gamma(u) \dot{x}(t-u) z'(x(t-u)) z'(x(t)) + z'(x(t)) \eta(t) \quad (160)$$

となり確かにノイズは場所に依存する。ここで z' は関数 z の x による微分である。熱流演算子は

$$\mathcal{I} = -\sum_l \lambda_l x_l \frac{\partial z(x)}{\partial x} \frac{p}{m} + \sum_l \frac{m^2}{2m_l \omega_l^2} 2z(x) \frac{dz(x)}{dx} \frac{p}{m} \quad (161)$$

と書ける。同様の計算をすると、結果は $x \rightarrow z(x)$ と置き換えればよいことがわかる。したがって熱流を与える一般式は

$$I = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \dot{\gamma}(\omega) \left\{ \frac{i\hbar}{2} G_{\dot{z},\dot{z}}^k(\omega) + \frac{\hbar\omega [G_{\dot{z},z}^r(\omega)]}{\tanh(\beta\hbar\omega/2)} \right\} \quad (162)$$

と与えられる。ここで右辺に出てくる2点関数は、「 x を叩いたときの $\dot{x}$ の応答」とはならず「 $z(x)$ を叩いたときの $\dot{z}(x)$ の応答」という形になってしまう。つまり、「 x を叩いたときの $\dot{x}$ の応答」の揺動散逸定理の破れは熱の散逸にはならないのである。

2.2 経路積分による計数統計

さて、ここまで Sewinger-Keldysh 法の説明に時間を割いたので、これから計数統計の話に戻る。計数統計の計算には経路積分を用いるのが有用なので大雑把にその復習をしておこう。特に電気伝導を念頭に入れているのでフェルミオンにおける経路積分を考える。

2.2.1 準備:グラスマン代数における経路積分

$c, \bar{c}$ はグラスマン数とする。これらは以下の関係を満たす。

$$\begin{cases} c^2 = 0 \\ \bar{c}^2 = 0 \\ \bar{c}c = -c\bar{c} \end{cases} \quad (163)$$

一般的な性質だけを列挙しておく。

1. $d^\dagger, d$ をそれぞれフェルミオンの生成、消滅演算子とすれば、

$$\begin{aligned} |c\rangle &= e^{-cd^\dagger}|0\rangle = (1 - cd^\dagger)|0\rangle \\ &= |0\rangle - c|1\rangle \end{aligned} \quad (164)$$

が成立する。よって、

$$\begin{aligned} d|c\rangle &= d|0\rangle - dcd^\dagger|0\rangle = cdd^\dagger|0\rangle \\ &= (c - c^2d^\dagger)|0\rangle = c(1 - cd^\dagger)|0\rangle \\ &= c|c\rangle \end{aligned} \quad (165)$$

が得られる。

2. エルミート共役は、以下のように定義される。

$$\langle \bar{c} | = \langle 0 | - \langle 1 | \bar{c} \quad (166)$$

3. (166) 式により、

$$\begin{aligned} \langle \bar{c} | c \rangle &= (\langle 0 | - \langle 1 | \bar{c})(|0\rangle - c|1\rangle) = 1 + \bar{c}c \\ &= e^{\bar{c}c} \end{aligned} \quad (167)$$

が得られる。

4. 完全性条件

$$1 = \int |c\rangle \langle \bar{c}| e^{-\bar{c}c} d\bar{c}dc \quad (168)$$

5. トレースの定義

$$\text{Tr} \hat{O} = \int \langle -\bar{c} | \hat{O} | c \rangle e^{-\bar{c}c} d\bar{c}dc \quad (169)$$

6. ガウス積分

$$\int d\bar{c}_1 dc_1 \cdots d\bar{c}_N dc_N e^{\sum_{k,\ell} \bar{c}_k A_{k,\ell} c_\ell} = \det A. \quad (170)$$

練習として自由フェルミオン $H = \epsilon_0 d^\dagger d$ 、 $\rho_{ini} = e^{-\beta H} / \text{Tr} e^{-\beta H}$ に対して $Z = \text{Tr}[e^{\frac{i}{\hbar} H \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} H \tau} \rho_{ini}]$ を考えてみよう。この値は自明に 1 であるが、これを経路積分で書くとどう見えるかを考えてみる。 Z は (168) および (169) により、

$$\begin{aligned}
 Z &= \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}[e^{\frac{i}{\hbar} H \tau} e^{-\frac{i}{\hbar} H \tau} \rho_{ini}] \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}[(e^{\frac{i}{\hbar} H \frac{\tau}{N-1}})^{N-1} (e^{-\frac{i}{\hbar} H \frac{\tau}{N-1}})^{N-1} \rho_{ini}] \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}[c, \bar{c}] \langle \bar{c}_{2N} | (e^{\frac{i}{\hbar} H \frac{\tau}{N-1}})^{N-1} (e^{-\frac{i}{\hbar} H \frac{\tau}{N-1}})^{N-1} \rho_{ini} | -c_{2N} \rangle e^{-\bar{c}_{2N} c_{2N}} \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \mathcal{D}[c, \bar{c}] \langle \bar{c}_{2N} | e^{\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c_{2N-1} \rangle e^{-\bar{c}_{2N-1} c_{2N-1}} \times \langle \bar{c}_{2N-1} | e^{\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c_{2N-2} \rangle e^{-\bar{c}_{2N-2} c_{2N-2}} \\
 &\quad \times \cdots \times \langle \bar{c}_{N+2} | e^{\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c_{N+1} \rangle e^{-\bar{c}_{N+1} c_{N+1}} \times \langle \bar{c}_{N+1} | 1 | c_N \rangle e^{-\bar{c}_N c_N} \\
 &\quad \times \langle \bar{c}_N | e^{-\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c_{N-1} \rangle e^{-\bar{c}_{N-1} c_{N-1}} \times \langle \bar{c}_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c_{N-2} \rangle e^{-\bar{c}_{N-2} c_{N-2}} \\
 &\quad \times \cdots \times \langle \bar{c}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c_1 \rangle e^{-\bar{c}_1 c_1} \times \langle \bar{c}_1 | \rho_{ini} | -c_{2N} \rangle e^{-\bar{c}_{2N} c_{2N}}
 \end{aligned} \tag{171}$$

但し、 $\frac{\tau}{N-1} = \delta t$ としている。ここで、(171) の各要素は、(167) により、

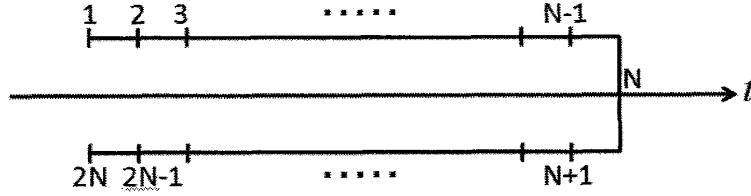


図 7: 式 (171) の経路

$$\langle \bar{c} | e^{\frac{i}{\hbar} H \delta t} | c \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}, c)} \langle \bar{c} | c \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}, c) + \bar{c} c} \tag{172}$$

なので、(171) は、

$$\begin{aligned}
 Z &= \int \mathcal{D}[c, \bar{c}] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}_{2N}, c_{2N-1}) + \bar{c}_{2N} c_{2N-1} - \bar{c}_{2N-1} c_{2N-1} \right. \\
 &\quad + \frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}_{2N-1}, c_{2N-2}) + \bar{c}_{2N-1} c_{2N-2} - \bar{c}_{2N-2} c_{2N-2} \\
 &\quad + \cdots + \frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}_{N+2}, c_{N+1}) + \bar{c}_{N+2} c_{N+1} - \bar{c}_{N+1} c_{N+1} + \bar{c}_{N+1} c_N - \bar{c}_N c_N \\
 &\quad - \frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}_N, c_{N-1}) + \bar{c}_N c_{N-1} - \bar{c}_N c_N - \frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}_{N-1}, c_{N-2}) + \bar{c}_{N-1} c_{N-2} - \bar{c}_{N-1} c_{N-1} \\
 &\quad \left. - \cdots - \frac{i}{\hbar} \delta t H(\bar{c}_2, c_1) + \bar{c}_2 c_1 - \bar{c}_1 c_1 - e^{-\beta \epsilon_0} \bar{c}_1 c_{2N} - \bar{c}_{2N} c_{2N} \right\}
 \end{aligned} \tag{173}$$

になる。行列で書けばもっとコンパクトに書ける。

$$Z = (\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots, \bar{c}_{2N}) \left(\begin{array}{cccc|cccc} -1 & & & & & & & -e^{-\beta\epsilon_0} \\ 1-\eta & -1 & & & & & & \\ & 1-\eta & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & 1-\eta & -1 & & & \\ \hline & & & & 1 & -1 & & \\ & & & & & 1+\eta & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & -1 \\ & & & & & & 1+\eta & -1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_N \\ c_{N+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{2N-1} \\ c_{2N} \end{pmatrix} \quad (174)$$

ここで、 $\eta \equiv \frac{\delta t \epsilon_0}{\hbar}$ と置いた。あるいは、

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{c}, c] e^{\frac{i}{\hbar} S_c} \quad (175)$$

のように、作用 S_c を定義して書くこともできる。 S_c は

$$S_c = \sum_{j=2}^{2N} \delta t_j \left\{ i\hbar \bar{c}_j \frac{c_j - c_{j-1}}{\delta t_j} - H(\bar{c}_j, c_{j-1}) \right\} + i\hbar \bar{c}_1 (c_1 + e^{-\beta\epsilon_0} c_{2N}) \quad (176)$$

で定義される。但し、

$$\delta t_j = \begin{cases} \delta t & j < N \\ -\delta t & N+1 < j < 2N \end{cases} \quad (177)$$

である。連続極限をとれば、次のように Σ は Keldysh contour 上の積分に変わることに注意しよう。

$$S_c = \int_C d\tau_1 d\tau_2 \bar{c}(\tau_1) g^{-1}(\tau_1, \tau_2) c(\tau_2) \quad (178)$$

ただし g^{-1} は (174) 式に表れる行列である。 S_c を実時間表示すると、

$$S_c = \int_{t_{ini}}^{\tau} dt \left\{ i\hbar \bar{c}^{(+)}(t) \frac{\partial}{\partial t} c^{(+)}(t) - H(\bar{c}^{(+)}(t), c^{(+)}(t)) \right\} \\ - \int_{t_{ini}}^{\tau} dt \left\{ i\hbar \bar{c}^{(-)}(t) \frac{\partial}{\partial t} c^{(-)}(t) - H(\bar{c}^{(-)}(t), c^{(-)}(t)) \right\} \quad (179)$$

となる。

2.2.2 Full counting statistics

再び量子ドットを介する電子輸送の問題を考える。概念図を図 8 に与えた。初期状態は、

$$\rho_{ini} \propto e^{-\beta(H_L - \mu_L N_L)} \otimes \rho_s \otimes e^{-\beta(H_R - \mu_R N_R)} \quad (180)$$

と系とリード線で分かれているとする。以下の手順によりカレントを測定するプロトコルを考えよう。

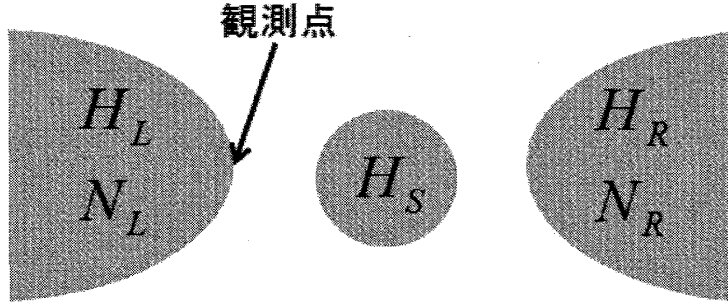


図 8:

1. 左と右のリード線を観測。その結果リード内の電子の個数 $n_{L,i}, n_{R,i}$ が分かり、全系の波動関数は以下のものに収縮する。

$$|\varphi_i\rangle = |\varphi_{L,i}\rangle \otimes |\varphi_{S,i}\rangle \otimes |\varphi_{R,i}\rangle \quad (181)$$

2. τ 秒間の間自由な時間発展をさせる (系の緩和時間より十分長い)
3. 再び左と右のリード線を観測。そして同じくリード線の粒子数を見る。 $n_{L,j}, n_{R,j}$ が観測され、系の波動関数は収縮する。

$$|\varphi_j\rangle = |\varphi_{L,j}\rangle \otimes |\varphi_{S,j}\rangle \otimes |\varphi_{R,j}\rangle \quad (182)$$

このプロトコルを何回も繰り返し行い、左のリード線での電子の個数の増減を数え統計を取る。

さて一回のプロセスをまず考えてみよう。この一回のプロセスだけから、 τ 秒間に $(n_{L,i} - n_{L,j})$ 個の電子が左のリードから出て行ったことがわかる。さて、過程 1 の段階で収束した波動関数が $|\varphi_i\rangle$ で 2 回目収束した波動関数が $|\varphi_j\rangle$ であり、かつ τ 秒間に左のリード線から出て行った電子の数が Q である、条件付き確率を考えよう。 τ 秒間の量子力学的時間発展演算子を U_τ とすると、この条件付き確率 $P_{j \leftarrow i}(Q)$ は

$$P_{j \leftarrow i}(Q) = \delta(Q - (n_{L,i} - n_{L,j})) |\langle \varphi_j | U_\tau | \varphi_i \rangle|^2 \quad (183)$$

のように表わされることが分かる。確率分布 $P(Q)$ は、遷移確率のあらゆる初期条件と終条件に対する重みつき和で与えられ、

$$\begin{aligned} P(Q) &= \sum_{j,i} P_{j \leftarrow i}(Q) \langle \varphi_i | \rho_{ini} | \varphi_i \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi e^{-iQ\chi} \sum_{i,j} e^{in_{L,i}\chi} e^{-in_{L,j}\chi} \langle \varphi_i | e^{\frac{i}{\hbar} H \tau} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | e^{-\frac{i}{\hbar} H \tau} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \rho_{ini} | \varphi_i \rangle \end{aligned} \quad (184)$$

となる。特性関数 $Z(\chi)$ は、 $P(Q)$ のフーリエ変換

$$P(Q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\chi e^{-iQ\chi} Z(\chi) \quad (185)$$

であるので、

$$Z(\chi) = \sum_{i,j} \langle \varphi_i | e^{\frac{i}{2}NL\chi} e^{\frac{i}{\hbar}H\tau} e^{-\frac{i}{2}NL\chi} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | e^{-\frac{i}{2}NL\chi} e^{-\frac{i}{\hbar}H\tau} e^{\frac{i}{2}NL\chi} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \rho_{ini} | \varphi_i \rangle \quad (186)$$

となる。これはさらに簡単化すると以下のように書くことが可能である。

$$Z(\chi) = \text{Tr} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}H_-(\chi)\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}H_+(\chi)\tau} \rho_{ini} \right\} \quad (187)$$

$$H_{\pm}(\chi) = e^{\mp \frac{i}{2}\chi N_L} H e^{\pm \frac{i}{2}\chi N_L}. \quad (188)$$

2.2.3 Levitov-Lesovik の生成汎関数

これまでで計算の仕方とフォーミュレーションができたので最後に相互作用のない系での結果を紹介して終わりにしよう。全系のハミルトニアンが以下で与えられる場合を考えよう。

$$H = \sum_k \epsilon_{Lk} a_{Lk}^\dagger a_{Lk} + \sum_k \epsilon_{Rk} a_{Rk}^\dagger a_{Rk} + \sum_{\alpha=L,R} \sum_k (\gamma_{\alpha k} a_{\alpha k}^\dagger d + h.c.) + \epsilon_0 d^\dagger d \quad (189)$$

いまこの中で非摂動ハミルトニアンは

$$H_0 = \sum_k \epsilon_{Lk} a_{Lk}^\dagger a_{Lk} + \sum_k \epsilon_{Rk} a_{Rk}^\dagger a_{Rk} + \epsilon_0 d^\dagger d \quad (190)$$

とみなす。(187) 式における $H_{\pm}$ は、

$$H_{\pm}(\chi) = H_0 + \sum_k \left[\gamma_{Lk} e^{\mp i\chi/2} a_{Lk}^\dagger d + \gamma_{Rk} a_{Rk}^\dagger d + h.c. \right] \quad (191)$$

と計数場の部分は、摂動項の位相の部分として取り入れられるのである。特性関数を

$$Z(\chi) = \int \mathcal{D}[a, \bar{a}, d, \bar{d}] e^{\frac{i}{\hbar} S_c} \quad (192)$$

と書けば、 S_c は

$$\begin{aligned} S_c = & \int_C d\tau \bar{d}(\tau) (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_0) d(\tau) \\ & + \int_C d\tau \sum_{\alpha,k} \bar{a}_{\alpha,k}(\tau) (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{\alpha k}) a_{\alpha k}(\tau) + (\text{ドットの初期状態による項}) \\ & - \int_C d\tau \sum_k \left[\gamma_{Lk} e^{-i\varphi(\tau)} \bar{a}_{Lk}(\tau) d(\tau) + e^{i\varphi(\tau)} \bar{d}(\tau) a_{Lk}(\tau) \right] \\ & - \int_C d\tau \sum_k \left[\gamma_{Rk} \bar{a}_{Rk}(\tau) d(\tau) + \bar{d}(\tau) a_{Rk}(\tau) \right] \end{aligned} \quad (193)$$

のように書ける。ここで φ は Keldysh 経路上での計数場で (+) ブランチでは $\chi/2$ で (-) ブランチでは $-\chi/2$ をとる。分配関数のうち、リード線の部分の積分をすることは容易であり、残りの部分を S_{eff} と書くことにする。

$$Z(\chi) = \int \mathcal{D}[d, \bar{d}] e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{eff}}} \quad (194)$$

すると、

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}} = & \int_C d\tau \bar{d}(\tau) (i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \epsilon_0) d(\tau) \\ & - \int_C d\tau_1 \tau_2 \bar{d}(\tau_1) e^{i(\varphi(\tau_1) - \varphi(\tau_2))} \Sigma_L(\tau_1, \tau_2) \\ & - \int_C d\tau_1 \tau_2 \bar{d}(\tau_1) \Sigma_R(\tau_1, \tau_2) d(\tau_2) \end{aligned} \quad (195)$$

を得る。 Σ は Keldysh contour 上で定義される自己エネルギーであり、実時間表現すれば、通常の自己エネルギーになる。実際の計算は容易なので省略する。 τ が大きい極限でフーリエ表示に直した表現にすると見た目がよくなり以下のような生成汎関数が得られる。

$$\frac{1}{\tau} \ln Z(\chi) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \ln \{ 1 + T(\omega) [f_L^+(\omega) f_R^-(\omega) (e^{i\chi} - 1) + f_R^+(\omega) f_L^-(\omega) (e^{-i\chi} - 1)] \} \quad (196)$$

である。ただしここで、 $f^\pm$ はフェルミ関数

$$f_\alpha^+ = \frac{1}{e^{\beta(\omega - \mu_\alpha)} + 1} \quad (197)$$

$$f_\alpha^- = 1 - f_\alpha^+, \quad \alpha = L, R \quad (198)$$

であり、透過係数 $T(\omega)$

$$T(\omega) = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\omega - \epsilon_0)^2 + (\frac{\Gamma_L}{2} + \frac{\Gamma_R}{2})^2} \quad (199)$$

を用いた。これは Levitov と Lesovik が異なる方法で最初に得た生成汎関数である [11]。

ここで、

$$F(\chi) \equiv \frac{1}{\tau} \ln Z(\chi) \quad (200)$$

とすると、熱力学的力 $A = \beta(\mu_L - \mu_R)$ に対して

$$F(\chi) = F(-\chi + iA) \quad (201)$$

となるがこれは揺らぎの定理を反映した対称性でありこれから、オンサーガー関係式やそれを越えた関係式が次々と出てくる。このへんの話は例えば論文 [10] を参考にしたい。

謝辞

京都大学の早川尚男教授には、本講義の依頼とともに講義に関連する内容に関して議論をしていただいた。この場を持って心から感謝したい。また講義を tex 化するという大変な作業を黒岩健氏、齊藤国靖氏、中島千博氏にいただいた。また同時に多くの質問をいただき、こちらも大変参考になったのでここで心から感謝したいと思う。またここに紹介した一部は、物性研の内海裕洋氏との共同研究を通じて学んだことであることを付記するとともに、この場を借りて感謝したいと思う。

参考文献

- [1] W. Schottky, Ann. Phys. (Leipzig) **57** (1918), 541.
- [2] *Quantum Noise in Mesoscopic Physics*, Vol. 97 of *NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry* edited by Yu. V. Nazarov (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 2003).
- [3] D.V. Averin and K.K Likharev, *Mesoscopic Phenomena in Solids*, edited by B.L. Altshuler, P.A. Lee, and R.A. Webb, Elsevier, Amsterdam (1991)
- [4] J. Schwinger, J. Math. Phys. **2**, 407 (1961)
- [5] L.V.Keldysh, Sov.Phys.JETP **20**, 1018 (1965).
- [6] D.C. Langreth, in *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids* Vol. 17 *Nato Advanced Study Institute, Series B: Physics*, Edited by J. T. Devreese and V.E. Van Doren (Plenum, New York, 1976)
- [7] T. Harada and S. Sasa, Phys. Rev. Lett. **95** 130602 (2005).
- [8] K. Saito, Europhys Lett., **83** 50006 (2008).
- [9] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, Vol. 10 *Ser. Mod. Condensed Matter Physics* (World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 1999)
- [10] K. Saito and A. Dhar, Phys. Rev. Lett., **99** 180601 (2007), K. Saito and Y. Utsumi, Phys. Rev. B., **78** 115429 (2008).
- [11] L. S. Levitov and G. B. Lesovik, JETP Lett. **58**, 230 (1993); L. S. Levitov, H.-W. Lee, and G. B. Lesovik, J. Math. Phys., **37**, 4845 (1996).