線形応答理論とランダウアー公式

島田典明, 加藤岳生

平成 29 年 12 月 29 日

1 概要

本レジメではまず線形応答の一般論について説明し、相互作用のない 1 次元電子系に 1 個の不純物ポテンシャルをおいた場合について、線形応答理論からランダウアー公式を導出する [1]。有限サイズ系の議論との対比のため、可能な限り系のサイズが無限大のまま計算を行う。本論文では、計算の途中は $e = 1, \hbar = 1$ とし、最後の公式で次元解析によって $e, \hbar$ を復活させる。

2 線形応答の一般理論

無摂動のハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ に摂動として $\mathcal{H}_{\mathrm{ext}} = -F(t)\hat{A}$ を加えた場合、物理量 $\hat{B}$ を線形応答理論で求めると以下のようになる:[2]

$$\langle \hat{B}(t) \rangle_{\mathrm{ext}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t-t') C_{BA}^{R}(t') \tag{1}$$

$$C_{BA}^{R}(t) \equiv -i\Theta(t) \langle [\hat{B}(t), \hat{A}] \rangle \tag{2}$$

ここで $\langle \cdots \rangle$ は熱平衡状態における期待値、$\langle \cdots \rangle_{\mathrm{ext}}$ は外場があるときの期待値である。また $\langle \hat{B} \rangle = 0$ とし、

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & (t > 0) \\ 0 & (t < 0) \end{cases} \tag{3}$$

は階段関数である。$F(t) \propto F_0 e^{-i\omega t}$ の形を仮定すると、

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(t) \rangle_{\mathrm{ext}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, F_0 e^{-i\omega(t-t')} C_{BA}^{R}(t') \\ &= F_0 e^{-i\omega t} C_{BA}^{R}(\omega), \end{aligned} \tag{4}$$

$$C_{BA}^{R}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} C_{BA}^{R}(t), \tag{5}$$

となる。よって C_{BA}^{R} は線形応答係数そのものになる:

$$C_{BA}^{R}(\omega) = \frac{\langle \hat{B}(t) \rangle_{\mathrm{ext}}}{F_0 e^{-i\omega t}}, \tag{6}$$

と決めることができる。$C^R_{BA}(\omega)$(もしくは $C^R_{BA}(t)$) は遅延相関関数であるが、これは虚時間形式の相関関数 $C_{BA}(\tau)$ から以下の解析接続の手続きによって得られる:

$$C_{BA}(\tau) = -\langle T_\tau B(\tau) A(0)\rangle, \tag{7}$$

$$C_{BA}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, C_{BA}(\tau) e^{i\omega_n \tau}, \tag{8}$$

$$C^R_{BA}(\omega) = C_{BA}(i\omega_n \to \omega + i\delta), \tag{9}$$

以下では簡単のため 1 次元電子系の電気伝導を考える。電子系に時間に依存するベクトルポテンシャル $A(x,t) = A(x)e^{-i\omega t}$ が存在するとき、摂動ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_{\rm ext} = \int dx'\, A(x') e^{-i\omega t} J(x'), \tag{10}$$

となる。ここで $J(x)$ は電流演算子である。この外場のもとで、電流を応答理論で求めると、

$$\langle J(x,t)\rangle_{\rm ext} = -\int dx'\, A(x') e^{-i\omega t} C^R_{JJ}(x,x',\omega), \tag{11}$$

$$C^R_{JJ}(x,x',\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} C^R_{BA}(x,x',t), \tag{12}$$

$$C^R_{JJ}(x,x',t) \equiv -i\Theta(t) \left\langle [J(x,t), J(x',0)] \right\rangle, \tag{13}$$

となる (熱平衡状態で電流が 0 であることを用いた)。電場が $E(x,t) = -\dot{A}(x,t) = i\omega A(x) e^{-i\omega t}$ で与えられることを用いると、

$$\langle J(x,t)\rangle_{ext} = \frac{1}{-i\omega} \int dx'\, E(x,t) C^R_{JJ}(x,x',\omega), \tag{14}$$

$$C^R_{JJ}(x,x',\omega) = \int dt\, e^{i\omega t} C^R_{JJ}(x,x',t), \tag{15}$$

$$C^R_{JJ}(x,x',t) = -i\Theta(t)\langle [J(x,t), J(x',0)]\rangle \tag{16}$$

となる。非局所伝導度の定義

$$\langle J(x,t)\rangle_{ext} = \int dx'\, \sigma(x,x',\omega) E(x,t) \tag{17}$$

と比較することで、電気伝導度は電流電流相関関数によって計算されることがわかる:

$$\sigma(x,x',\omega) = \frac{1}{-i(\omega + i\delta)} C^R_{JJ}(x,x',\omega) \tag{18}$$

ここで $t = -\infty$ で無摂動状態にあるという境界条件を表すために、分母の ω を $\omega + i\delta$ に置き換えた。これを久保公式 [3] という。虚時間形式からは、下記のように求められる。

$$C_{JJ}(x,x',\tau) = -\langle T_\tau J(x,\tau), J(x',0)\rangle, \tag{19}$$

$$\Longrightarrow \quad C_{JJ}(x,x',i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, C_{JJ}(\tau) e^{i\omega_n \tau}, \tag{20}$$

$$\Longrightarrow \quad \sigma(x,x',\omega) = \frac{1}{-i(\omega + i\delta)} C_{JJ}(x,x',i\omega_n \to \omega + i\delta), \tag{21}$$

3 Landauer 公式の導出

無限系において線形応答理論から Landauer 公式を導く手続きをまとめる。散乱体の位置を $|x| \leq w$ とすると、散乱体から離れた場所で場の演算子を Right-going および Left-goint の成分で分けてかくと、散乱行列 S の成分を用いて、

$$\Psi_R(x) = \begin{cases} \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} c_{kR} e^{ikx} & (x < -w) \\ \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} (t(k)c_{kR} + r'(k)c_{kL}) e^{ikx} & (w < x) \end{cases} \tag{22}$$

$$\Psi_L(x) = \begin{cases} \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} (t'(k)c_{kL} + r(k)c_{kR}) e^{-ikx} & (x < -w) \\ \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} c_{kL} e^{-ikx} & (w < x) \end{cases} \tag{23}$$

となる。また電子間の相互作用がないときは時間発展を解くことができ、

$$\Psi_R(x,\tau) = \begin{cases} \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} c_{kR} e^{ikx-\varepsilon_k\tau} & (x < -w) \\ \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} (t(k)c_{kR} + r'(k)c_{kL}) e^{ikx-\varepsilon_k\tau} & (w < x) \end{cases} \tag{24}$$

$$\Psi_L(x,\tau) = \begin{cases} \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} (t'(k)c_{kL} + r(k)c_{kR}) e^{-ikx-\varepsilon_k\tau} & (x < -w) \\ \displaystyle\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} c_{kL} e^{-ikx-\varepsilon_k\tau} & (w < x) \end{cases} \tag{25}$$

となる。ここで今無限系を考えているので、波数 k の右向き進行波と波数 $-k$ の左向き進行波のエネルギーが同じ値 ε_k をもつことを使った。

この場の演算子を用いると電流演算子 $J(x)$ は

$$J(x) = v_F(\rho_R(x) - \rho_L(x)) = v_F(\Psi_R^\dagger(x)\Psi_R(x) - \Psi_L^\dagger(x)\Psi_L(x)) \tag{26}$$

である。これより電流電流相関関数は

$$\begin{aligned} C_{JJ}(x,x',\tau) &= -\langle J(x,\tau)J(x',0)\rangle \qquad (27)\\ &= v_F^2\Big[-\langle \rho_R(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle - \langle \rho_L(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle \\ &\qquad + \langle \rho_R(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle + \langle \rho_L(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle\Big] \qquad (28) \end{aligned}$$

となる。

最初に $x' < -w,\ w < x$ に範囲を制限して考える。まず

$$\begin{aligned} &\langle \rho_R(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle \\ &\quad = \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1dk_2dk_3dk_4\, e^{-ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau}e^{ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau}e^{-ik_3x'}e^{ik_4x'} \\ &\qquad \times \langle (t^*(k_1)c_{k_1R}^\dagger + r'^*(k_1)c_{k_1L}^\dagger)(t(k_2)c_{k_2R} + r'(k_2)c_{k_2L})c_{k_3R}^\dagger c_{k_4R}\rangle \\ &\quad = \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1dk_2\, t^*(k_1)t(k_2)e^{-i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau}f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\ &\qquad + \langle \rho_R(x,\tau)\rangle\langle \rho_R(x',0)\rangle \end{aligned} \tag{29}$$

となる。同様にして、

$$\begin{aligned}
&\langle \rho_L(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle \\
&\quad = \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, t'^*(k_1)t'(k_2)e^{i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\qquad + \langle \rho_L(x,\tau)\rangle \langle \rho_L(x',0)\rangle
\end{aligned} \tag{30}$$

である。他の電荷相関については、

$$\begin{aligned}
&\langle \rho_R(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4\, e^{-ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau}e^{ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau}e^{ik_3x'}e^{-ik_4x'} \\
&\quad \times \langle (t^*(k_1)c^\dagger_{k_1R} + r'^*(k_1)c^\dagger_{k_1L})(t(k_2)c_{k_2R} + r'(k_2)c_{k_2L}) \\
&\quad \times (t'^*(k_3)c^\dagger_{k_3L} + r^*(k_3)c^\dagger_{k_3R})(t'(k_4)c_{k_4L} + r(k_4)c_{k_4R})\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4\, e^{-ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau}e^{ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau}e^{ik_3x'}e^{-ik_4x'} \\
&\quad \times \Bigg[t^*(k_1)r(k_4)\langle c^\dagger_{k_1R}c_{k_4R}\rangle \left\{ t(k_2)r^*(k_3)\langle c_{k_2R}c^\dagger_{k_3R}\rangle + r'(k_2)t'^*(k_3)\langle c_{k_2L}c^\dagger_{k_3L}\rangle \right\} \\
&\quad + r'^*(k_1)t'(k_4)\langle c^\dagger_{k_1L}c_{k_4L}\rangle \left\{ t(k_2)r^*(k_3)\langle c_{k_2R}c^\dagger_{k_3R}\rangle + r'(k_2)t'^*(k_3)\langle c_{k_2L}c^\dagger_{k_3L}\rangle \right\} \Bigg] \\
&\quad + \langle \rho_R(x,\tau)\rangle \langle \rho_L(x',0)\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, e^{-i(k_1-k_2)(x+x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\quad \times \Big[t^*(k_1)r(k_1) + r'^*(k_1)t(k_1) \Big]\Big[t(k_2)r^*(k_2) + r'(k_2)t'^*(k_2) \Big] \\
&\quad + \langle \rho_R(x,\tau)\rangle \langle \rho_L(x',0)\rangle
\end{aligned} \tag{31}$$

となるが、散乱行列 S のユニタリー性より

$$t(k_2)r^*(k_2) + r'(k_2)t'^*(k_2) = t(k_2)r^*(k_2) - t(k_2)r^*(k_2) = 0 \tag{32}$$

なので、

$$\langle \rho_R(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle = \langle \rho_R(x,\tau)\rangle \langle \rho_L(x',0)\rangle \tag{33}$$

となる。同様に

$$\langle \rho_L(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle = \langle \rho_L(x,\tau)\rangle \langle \rho_R(x',0)\rangle \tag{34}$$

もいえる。以上より

$$\begin{aligned}
C_{JJ}(x,x',\tau) = &-\frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, t^*(k_1)t(k_2)e^{-i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&-\frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, t'^*(k_1)t'(k_2)e^{+i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&-\Big(\langle \rho_R(x,\tau)\rangle - \langle \rho_L(x,\tau)\rangle\Big)\Big(\langle \rho_R(x',0)\rangle - \langle \rho_L(x',0)\rangle\Big)
\end{aligned} \tag{35}$$

がいえる。最後の項は熱平衡状態で $\langle \rho_R(x',0)\rangle = \langle \rho_L(x',0)\rangle$ より、落とすことができる。松原振動数でフーリエ変換を施すと

$$
\begin{aligned}
C_{JJ}(x,x',i\omega_m) =& \frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, t^*(k_1)t(k_2)e^{-i(k_1-k_2)(x-x')}\frac{f(\varepsilon_{k_1})-f(\varepsilon_{k_2})}{i\omega_m+\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2}} \\
& \frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, t'^*(k_1)t'(k_2)e^{i(k_1-k_2)(x-x')}\frac{f(\varepsilon_{k_1})-f(\varepsilon_{k_2})}{i\omega_n+\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2}} \\
=& \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, t^*(\varepsilon_1)t(\varepsilon_2)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_m+\varepsilon_1-\varepsilon_2} \\
& \frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, t'^*(\varepsilon_1)t'(\varepsilon_2)e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_m+\varepsilon_1-\varepsilon_2}
\end{aligned}
\tag{36}
$$

となる。最後の等式では $\epsilon = v_F(k-k_F)$ を用いて波数からエネルギーに変数変換を行った。これより電気伝導度は

$$
\begin{aligned}
&\sigma(x,x',\omega) \\
&\quad = \frac{C_{JJ}(x,x',i\omega_m\to\omega+i\delta)}{-i(\omega+i\delta)} \\
&\quad = -\frac{1}{i(\omega+i\delta)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, t^*(\varepsilon_1)t(\varepsilon_2)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{\omega+i\delta+\varepsilon_1-\varepsilon_2} \\
&\qquad - \frac{1}{i(\omega+i\delta)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, t'^*(\varepsilon_1)t'(\varepsilon_2)e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{\omega+i\delta+\varepsilon_1-\varepsilon_2}
\end{aligned}
\tag{37}
$$

ここで $\omega > 0$ とし、最初の因子 $1/(\omega+i\delta)$ からでてくる Drude 重みは無視すれば、

$$
\begin{aligned}
&\sigma(x,x',\omega) \\
&\quad = -\frac{1}{i\omega(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1\int d\varepsilon_2 [t^*(\varepsilon_1)t(\varepsilon_2)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F} + t'^*(\varepsilon_1)t'(\varepsilon_2)e^{+i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}] \\
&\qquad \times (f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2))(-i\pi)\delta(\omega+\varepsilon_1-\varepsilon_2)
\end{aligned}
\tag{38}
$$

$$
= \frac{1}{4\pi}\int d\varepsilon (t^*(\varepsilon)t(\varepsilon+\omega) + t'^*(\varepsilon)t'(\varepsilon+\omega))\frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\omega)}{\omega} \tag{39}
$$

最後に $\omega \to 0$ の極限を考え、透過確率

$$
T(\epsilon) = t^*(\varepsilon)t(\varepsilon) = t'^*(\varepsilon)t'(\varepsilon) \tag{40}
$$

を用いると、

$$
\begin{aligned}
\sigma_{\mathrm{DC}}(x,x') &\equiv \lim_{\omega\to 0}\sigma(x,x',\omega) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int d\varepsilon\, T(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)
\end{aligned}
\tag{41}
$$

となり、x, x' の値によらなくなる (ただし、$x' < 0 < x$ を仮定していることに注意)。

次に $x' < -w,\, w < x$ に範囲を制限して考える。

$$
\begin{aligned}
&\langle \rho_R(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4\, e^{-ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau} e^{ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau} e^{-ik_3x'} e^{ik_4x'} \\
&\quad \times \langle (t^*(k_1)c^\dagger_{k_1R} + r'^*(k_1)c^\dagger_{k_1L})(t(k_2)c_{k_2R} + r'(k_2)c_{k_2L}) \\
&\qquad \times (t^*(k_3)c^\dagger_{k_3R} + r'^*(k_3)c^\dagger_{k_3L})(t(k_4)c^\dagger_{k_4R} + r'(k_4)c^\dagger_{k_4L})\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, (t^*(k_1)t(k_1) + r'^*(k_1)r'(k_1)) \times (t^*(k_2)t(k_2) + r'^*(k_2)r'(k_2)) \\
&\qquad e^{-i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\quad + \langle \rho_R(x,\tau)\rangle \langle \rho_R(x',0)\rangle
\end{aligned}
\tag{42}
$$

散乱行列 S のユニタリー性より

$$
t(k_1)t^*(k_1) + r'(k_1)t'^*(k_1) = t(k_2)t^*(k_2) + r'(k_2)t'^*(k_2) = 1 \tag{43}
$$

がいえるので、

$$
\begin{aligned}
\langle \rho_R(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, e^{-i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\quad + \langle \rho_R(x,\tau)\rangle \langle \rho_R(x',0)\rangle
\end{aligned}
\tag{44}
$$

となる。同様にして、

$$
\begin{aligned}
\langle \rho_L(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4\, e^{ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau} e^{-ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau} e^{ik_3x'} e^{-ik_4x'} \\
&\quad \times \langle c^\dagger_{k_1L} c_{k_2L} c^\dagger_{k_3L} c^\dagger_{k_4L}\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, e^{i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\quad + \langle \rho_L(x,\tau)\rangle \langle \rho_L(x',0)\rangle,
\end{aligned}
\tag{45}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle \rho_R(x,\tau)\rho_L(x',0)\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4\, e^{-ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau} e^{ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau} e^{+ik_3x'} e^{-ik_4x'} \\
&\quad \times \langle (t^*(k_1)c^\dagger_{k_1R} + r'^*(k_1)c^\dagger_{k_1L})(t(k_2)c_{k_2R} + r'(k_2)c_{k_2L}) c^\dagger_{k_3L} c^\dagger_{k_4L}\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, r'^*(k_1)r'(k_2) e^{-i(k_1-k_2)(x+x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\quad + \langle \rho_R(x,\tau)\rangle \langle \rho_L(x',0)\rangle,
\end{aligned}
\tag{46}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle \rho_L(x,\tau)\rho_R(x',0)\rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4\, e^{+ik_1x+\varepsilon_{k_1}\tau} e^{-ik_2x-\varepsilon_{k_2}\tau} e^{-ik_3x'} e^{+ik_4x'} \\
&\quad \times \langle c^\dagger_{k_1L} c^\dagger_{k_2L} (t^*(k_3)c^\dagger_{k_3R} + r'^*(k_3)c^\dagger_{k_3L})(t(k_4)c_{k_4R} + r'(k_4)c_{k_4L})\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, r'^*(k_1)r'(k_2) e^{i(k_1-k_2)(x+x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2})) \\
&\quad + \langle \rho_L(x,\tau)\rangle \langle \rho_R(x',0)\rangle
\end{aligned}
\tag{47}
$$

以上より

$$\begin{aligned}C_{JJ}(x,x',\tau) = &-\frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, e^{-i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2}))\\ &-\frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, e^{i(k_1-k_2)(x-x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2}))\\ &+\frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, r'^*(k_1)r'(k_2)e^{-i(k_1-k_2)(x+x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2}))\\ &+\frac{v_F^2}{(2\pi)^2}\int dk_1 dk_2\, r'^*(k_1)r'(k_2)e^{i(k_1-k_2)(x+x')+(\varepsilon_{k_1}-\varepsilon_{k_2})\tau} f(\varepsilon_{k_1})(1-f(\varepsilon_{k_2}))\\ &-(\langle\rho_L(x,\tau)\rangle-\langle\rho_R(x,\tau)\rangle)(\langle\rho_R(x',0)\rangle-\langle\rho_L(x',0)\rangle).\end{aligned} \tag{48}$$

最後の項は熱平衡状態で $\langle\rho_R(x',0)\rangle=\langle\rho_L(x',0)\rangle$ より、落とすことができる。フーリエ変換を行い、波数積分をエネルギー積分に置き換えると、

$$\begin{aligned}C_{JJ}(x,x',i\omega_n) = &\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}\\ &+\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}\\ &-\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, r'^*(\varepsilon_1)r'(\varepsilon_2)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x+x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}\\ &-\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, r'^*(\varepsilon_1)r'(\varepsilon_2)e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x+x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}.\end{aligned} \tag{49}$$

これより電気伝導度は、

$$\begin{aligned}&\sigma^R(x,x',\omega)\\ &=\frac{C_{JJ}(x,x',i\omega_m\to\omega+i\delta)}{i(\omega+i\delta)}\\ &=-\frac{1}{i(\omega+i\delta)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}\\ &-\frac{1}{i(\omega+i\delta)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}\\ &+\frac{1}{i(\omega+i\delta)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, r'^*(\varepsilon_1)r'(\varepsilon_2)e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x+x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}\\ &+\frac{1}{i(\omega+i\delta)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2\, r'^*(\varepsilon_1)r'(\varepsilon_2)e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)(x+x')/v_F}\frac{f(\varepsilon_1)-f(\varepsilon_2)}{i\omega_n+\varepsilon_1-\varepsilon_2}.\end{aligned} \tag{50}$$

ここで $\omega>0$ とし、最初の因子 $1/(\omega+i\delta)$ からでてくる Drude 重みは無視すれば、

$$\begin{aligned}\sigma^R(x,x',\omega) = &\frac{1}{4\pi}\int d\varepsilon\, e^{i\omega(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\omega)}{\omega}\\ &+\frac{1}{4\pi}\int d\varepsilon\, e^{-i\omega(x-x')/v_F}\frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\omega)}{\omega}\\ &-\frac{1}{4\pi}\int d\varepsilon\, r'^*(\varepsilon)r'(\varepsilon+\omega)e^{i\omega(x+x')/v_F}\frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\omega)}{\omega}\\ &-\frac{1}{4\pi}\int d\varepsilon\, r'^*(\varepsilon)r'(\varepsilon+\omega)e^{-i\omega(x+x')/v_F}\frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\omega)}{\omega}.\end{aligned} \tag{51}$$

最後に $\omega\to 0$ の極限を考え、透過確率

$$T(\epsilon)=1-r^*(\varepsilon)r(\varepsilon)=1-r'^*(\varepsilon)r'(\varepsilon) \tag{52}$$

を用いると、

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{DC}}(x,x') &= \lim_{\omega\to 0}\sigma(x,x',\omega)\\ &= \frac{1}{2\pi}\int d\varepsilon\, T(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)\end{aligned}\tag{53}$$

となり、やはり x, x' の値によらなくなる $(0 < x', x$ を仮定していることに注意)。またこの結果は、$x' < 0 < x$ の場合と同じである。

以上より、x' の符号に関わらず、$\sigma_{\mathrm{DC}}(x,x')$ は一定値である。これより、$x > 0$ に対して電流は、

$$\begin{aligned}\langle J(x)\rangle &= \int dx'\,\sigma_{\mathrm{DC}}(x,x')E(x')\\ &= \sigma_{\mathrm{DC}}\int dx'\,E(x') = \sigma_{\mathrm{DC}}(x,x')\Delta V\end{aligned}\tag{54}$$

となるので、コンダクタンス G は

$$G = \sigma_{\mathrm{DC}} = \frac{1}{2\pi}\int d\varepsilon\, T(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)\tag{55}$$

となる。最後に電荷 $e, \hbar$ を復活させると、

$$\begin{aligned}G &= \frac{e^2}{2\pi\hbar}\int d\varepsilon\, T(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)\\ &= \frac{e^2}{h}\int d\varepsilon\, T(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)\end{aligned}\tag{56}$$

となり、Landauer 公式が導かれる。

参考文献

[1] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics — An Introduction* (Oxford University Press, 2004).

[2] 高田康民「多体問題」(朝倉書店, 1999).

[3] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12** 570 (1957).