微小な系の電気伝導: 多体効果と非平衡電流に関する理論

大阪市立大学 理学部 物質科学科　**小栗 章**

1　序論

このノートでは、近年、メゾスコピック系における非平衡電流の計算に活用されている、Keldysh Green 関数について解説する [1, 2]。この方法の詳細な内容については、以下にも取り上げるように、いろいろな文献がある。そこで、本格的な文献を読む前の warming up に使えることを、このノートを作成するにあたって、目標とした。

ここで言う非平衡状態とは、試料の両端にかけた電圧が大きく、電流-電圧特性が非線形になる場合のことである。特に、非平衡ではあるが、定常的な場合に話しは限る。具体的には、このような状況における電流の計算を定式化すること、を考える。この問題に、Keldysh 流の摂動法を導入したのは、Caroli 達 [3] であり、近年の微小な系への応用に関しては、例えば 文献 [4, 5, 6] 等がある。以下の解説では、非平衡電流を定式化する問題設定に関しては、主に文献 [3, 4, 6] を参考にした。また、非平衡状態を記述する密度行列の摂動展開に関しては、主に Keldysh の原論文 [2] と Landau-Lifshitz の教科書 [7] を参考にした。その他に、 Mahan の本 [8] には手短で要領の良い説明がある。また、レビュー、および教科書として、文献 [9], [10] 等がある。

2　模型：平衡状態

全系は、中央 (C) に置いた試料、試料の左側 (L) に置いた reservoir、右側 (R) に置いた reservoir、以上の 3 部分からなるとする。各部分はトンネル・ハミルトニアン $\mathcal{H}_{mix}$ により連結され、$\mathcal{H}_{mix}=0$ の場合には、部分間の相互作用はなく、各系は独立しているとする。電場がかけられていない場合、全系のハミルトニアン $\mathcal{H}_{tot}^{eq}$ は次のように表わされる：

$$\mathcal{H}_{tot}^{eq} \;=\; \mathcal{H}_L \;+\; \mathcal{H}_R \;+\; \mathcal{H}_C \;+\; \mathcal{H}_{mix}\,. \tag{1}$$

ただし、$\mathcal{H}_{L,R,C}$ は、左右の reservoir、および試料の部分のハミルトニアンである。$\mathcal{H}_{tot}^{eq}$ の詳細な型に依らずに一般論を展開することも可能だが、以下では思考の補助のため、試料と左右の reservoir が、それぞれ ひとつの channel $(v_L,\, v_R)$ で結ばれている場合を考える：

$$\mathcal{H}_L \;=\; -\sum_{\substack{ij\in L\\ \sigma}} t_{ij}^{L}\, c_{i\sigma}^{\dagger}\, c_{j\sigma}\,, \qquad \mathcal{H}_R \;=\; -\sum_{\substack{ij\in R\\ \sigma}} t_{ij}^{R}\, c_{i\sigma}^{\dagger}\, c_{j\sigma}\,, \tag{2}$$

$$\mathcal{H}_C \;=\; \mathcal{H}_C^{0} \;+\; \mathcal{H}_C^{I}\,, \tag{3}$$

$$\mathcal{H}_C^{0} \;=\; -\sum_{\substack{ij\in C\\ \sigma}} t_{ij}^{C}\, c_{i\sigma}^{\dagger}\, c_{j\sigma}\,, \qquad \mathcal{H}_C^{I} \;=\; \frac{1}{2}\sum_{\substack{\{j\}\in C\\ \sigma\sigma'}} U_{j_4j_3:j_2j_1}\, c_{j_4\sigma}^{\dagger}\, c_{j_3\sigma'}^{\dagger} c_{j_2\sigma'}\, c_{j_1\sigma}\,, \tag{4}$$

$$\mathcal{H}_{mix} \;=\; -\sum_{\sigma} v_L\, \left[c_{1\sigma}^{\dagger}\, c_{0\sigma} + \mathrm{H.c.}\right] - \sum_{\sigma} v_R\, \left[c_{N+1\sigma}^{\dagger}\, c_{N\sigma} + \mathrm{H.c.}\right]\,. \tag{5}$$

ここで、$t_{ij}^{L,C,R}$ の非対角は各領域内部の hopping matrix element である。対角項 $t_{jj}^{L,C,R}$ は on-site のポテンシャルを表わすが、reservoir の中では不純物がなく、j に依らない一定の値をもつ ($t_{jj}^{L,R} = \mathrm{const}$) とする。さらに、電子間相互作用は、中央の試料の部分でのみ働くとする。(4) 式では、一般的に $U_{j_4 j_3 : j_2 j_1}$ としたが、イメージが持ち難くい人は、限定は強くなるが、とりあえず $\mathcal{H}_C^I \Rightarrow (1/2) \sum_{jj'} U_{jj'}\, n_j\, n_{j'}$ と置き換えて考えても良い ($n_j = \sum_\sigma c_{j\sigma}^\dagger\, c_{j\sigma}$)。連結を表わす (5) 式において、$i = 0$ は左側の reservoir の先端、$i = 1$ は試料の左端、$i = N$ は試料の右端、$i = N + 1$ は右側の reservoir の先端、を表わす。補助として、図 1 を参照されたい。ただし、作図の都合のため、図 1 は各領域内部の $t_{ij}^{L,C,R}$ を最近接の hopping に限っているような誤解を招き安い図になってしまった。以下の議論は、$t_{ij}^{L,C,R}$ で記述される長距離の hopping によって、各領域内は 2 次元, あるいは 3 次元的なネットワークになっている場合を含んでいることに、注意して欲しい。

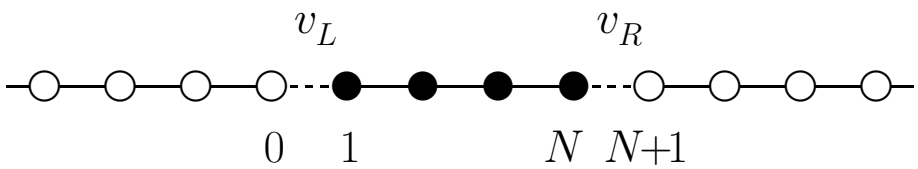


図 1　全系の概略：● は試料, ○ は reservoir 内の site.　ただし、各領域内部は $t_{ij}^{L,C,R}$ の長距離成分によって、高次元的なネットワークが構成されていても良い.

熱平衡状態における密度行列 ρ_{eq} の表式は、通常どおり次のように与えられる：

$$\rho_{eq} \;=\; e^{-\beta\{\mathcal{H}_{tot}^{eq} - \mu(N_L + N_C + N_R)\}} \;/\; \mathrm{Tr}\; e^{-\beta\{\mathcal{H}_{tot}^{eq} - \mu(N_L + N_C + N_R)\}}\,, \tag{6}$$

$$N_L \;=\; \sum_{i \in L,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger\, c_{i\sigma}\,, \qquad N_C \;=\; \sum_{i \in C,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger\, c_{i\sigma}\,, \qquad N_R \;=\; \sum_{i \in R,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger\, c_{i\sigma}\,. \tag{7}$$

平衡状態の場合、絶対零度 $T = 0$ では、バンドの底から化学ポテンシャル μ までの状態が、電子によって占有される。以下では、 便宜上 $k_B = 1, \hbar = 1$ とおく。また、$\beta = 1/T$ であり、$\hbar$ は必要な時には復活させる。

3　模型：非平衡状態

次に、外部から試料の両端に電位差 V を与えた場合を考える。このとき、全系のエネルギーには、(1) 式 の $\mathcal{H}_{tot}^{eq}$ の他に、電場によるポテンシャル・エネルギーの寄与が加わる；

$$\mathcal{H}_{tot} \;=\; \mathcal{H}_{tot}^{eq} \;+\; \mathcal{V}_{ext}\,, \tag{8}$$

$$\mathcal{V}_{ext} \;=\; \Phi_L\, N_L \;+\; \Phi_R\, N_R \;+\; \sum_{i \in C,\sigma} \Phi_C(i)\, c_{i\sigma}^\dagger\, c_{i\sigma}\,. \tag{9}$$

ここでは、左右の reservoir は理想的な金属である場合を考え、ポテンシャル Φ_L, Φ_R は一定とした。ただし、$eV = \Phi_L - \Phi_R$ である。試料内部のポテンシャル $\Phi_C(i)$ は、一般には

位置 i に依存する。例えば、試料にかけられた電場が一様な場合には、$\Phi_C(i)$ の微分が一定になるので、図 2 のように直線になる [11]。

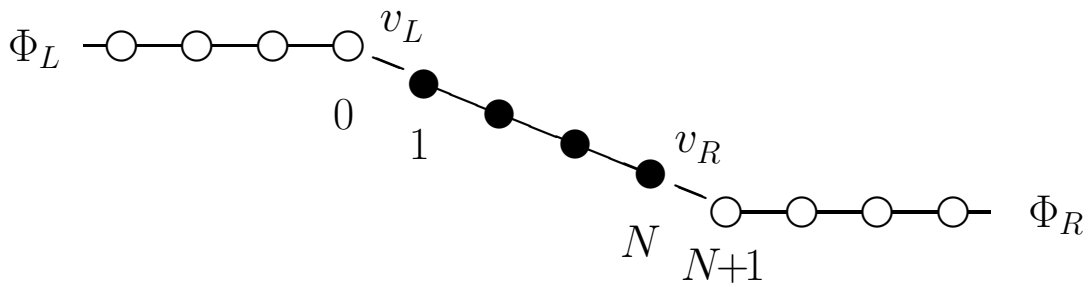


図 2　電場によるポテンシャル Φ、両端の電位差は $eV = \Phi_L - \Phi_R$.

さて、エネルギーは (8) 式で与えられるが、非平衡状態において、統計的に実現される状態の重みを記述する密度行列 ρ は、どのように与えられるだろうか？ 定常状態では、例えば $eV > 0$ とすると、一定の電流が左から右へ流れる続ける。 つまり、左の reservoir では、電子は流出しても減らずにどんどん追加され、右の reservoir では、電子は流入しても留まることを知らず遠くへ去って行く。まず、このような状態は、Eq. (6) のようには記述されない：

$$\rho \neq e^{-\beta\{\mathcal{H}_{tot} - \mu(N_L + N_C + N_R)\}} \;/\; \mathrm{Tr}\; e^{-\beta\{\mathcal{H}_{tot} - \mu(N_L + N_C + N_R)\}} \,. \tag{10}$$

なぜなら、(10) 式の右辺は、電子がポテンシャルの高い所から低い所へ移動し、最終的に全系の μ 以下の状態が占有された、流れ終わった状態を表わしているからである。そこで、Caroli 達によって考案された、流れのある定常状態を記述する方法を次に述べる [3]。

4　密度行列の時間発展

上述のように、空間的に一様な μ を用いて、流れのある状態を記述することはできない。そこで Caroli 達が考えたのは、試料と reservoir の連結を、時刻 $t = -\infty$ から断熱的に取り入れる方法である；

$$\mathcal{H}_{tot}(t) \;=\; \mathcal{H}_1 \;+\; \mathcal{H}_2(t) \,, \tag{11}$$

$$\mathcal{H}_1 \;=\; \mathcal{H}_{1;L} + \mathcal{H}_{1;C} + \mathcal{H}_{1;R} \,, \qquad \mathcal{H}_2(t) \;=\; \left[\mathcal{H}_{mix} + \mathcal{H}_C^I\right] e^{-\delta|t|} \,, \tag{12}$$

$$\mathcal{H}_{1;L} \;=\; \mathcal{H}_L + \Phi_L\, N_L \,, \qquad \mathcal{H}_{1;C} \;=\; \mathcal{H}_C^0 + \sum_{i\in C,\sigma} \Phi_C(i)\, c_{i\sigma}^\dagger\, c_{i\sigma} \,, \tag{13}$$

$$\mathcal{H}_{1;R} \;=\; \mathcal{H}_R + \Phi_R\, N_R \,. \tag{14}$$

ここで、δ は 無限小の正の数である。また、電子間相互作用 $\mathcal{H}_C^I$ も $\mathcal{H}_{mix}$ と同時に断熱的に取り入れる。これは、非摂動項 $\mathcal{H}_1$ を 2 次形式にとり、Wick の定理が使えるようにする

ためである。Caroli 達の方法の利点は、時刻 $t=-\infty$ では、左右の reservoir と試料がそれぞれ孤立しているため、各部分系における化学ポテンシャル $\mu_{L,R,C}$ という量を、初期条件を通して導入できる点にある。次に、この辺の事情を具体的に見るため、Keldysh の原論文にしたがい [2]、密度行列 ρ の時間発展を考える：

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho(t) \;=\; -i\left[\,\mathcal{H}_{tot}(t)\;,\;\rho(t)\,\right]. \tag{15}$$

$\mathcal{H}_2$ による摂動の効果を調べるには、相互作用表示を用いるのが便利である：

$$\widetilde{\rho}(t) \;=\; e^{i\,\mathcal{H}_1 t}\,\rho(t)\,e^{-i\,\mathcal{H}_1 t}\;, \qquad\qquad \widetilde{\mathcal{H}}_2(t) \;=\; e^{i\,\mathcal{H}_1 t}\,\mathcal{H}_2(t)\,e^{-i\,\mathcal{H}_1 t}\;. \tag{16}$$

このとき、$\widetilde{\rho}(t)$ の運動方程式 と その解は次のように表わされる；

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\widetilde{\rho}(t) \;=\; -i\left[\,\widetilde{\mathcal{H}}_2(t)\;,\;\widetilde{\rho}(t)\,\right], \tag{17}$$

$$\widetilde{\rho}(t) \;=\; U(t,t_0)\,\widetilde{\rho}(t_0)\,U(t_0,t)\;. \tag{18}$$

ここで、時間発展演算子 $U(t,t_0)$ は、以下の (19) 式を満たし、(20) のような形式解をもつ；

$$i\frac{\partial}{\partial t}\,U(t,t_0) \;=\; \widetilde{\mathcal{H}}_2(t)\,U(t,t_0)\;, \tag{19}$$

$$U(t,t_0) \;=\; \mathrm{T}\exp\left[-i\int_{t_0}^{t} dt'\;\widetilde{\mathcal{H}}_2(t')\right]\;. \tag{20}$$

ここで、T は通常の T 積のことであり、$-\infty$ から $+\infty$ への向きの時間順序を表わす。また、(18) 式が、(17) 式の解になっていることは、(18) 式を t で微分し、(19) 式, および 対応する Hermite 共役な演算子 $U^{\dagger}(t,t_0)=U(t_0,t)$ の運動方程式を用いれば、確認できる。ちなみに、(20) 式は Hermite 共役をとると、$+\infty$ から $-\infty$ への 通常とは逆の時間順序に演算子をならべる $\widetilde{\mathrm{T}}$ 積を用いて表わされる；

$$U(t_0,t) \;=\; \widetilde{\mathrm{T}}\exp\left[i\int_{t_0}^{t} dt'\;\widetilde{\mathcal{H}}_2(t')\right]\;. \tag{21}$$

さて、(18) 式は、初期条件が $t=t_0$ で与えられた場合に、その後の密度行列の時間発展を与えてくれる。Keldysh の方法では、初期条件を $t_0\to-\infty$ で与える。Caroli 達は、初期条件として、全系が連結されていない状態を考え、密度行列 $\widetilde{\rho}(-\infty)$ を次のように与えた；

$$\widetilde{\rho}(-\infty) \;=\; \frac{e^{-\beta\{\mathcal{H}_{1;L}-\mu_L N_L\}}\;e^{-\beta\{\mathcal{H}_{1;C}-\mu_C N_C\}}\;e^{-\beta\{\mathcal{H}_{1;R}-\mu_R N_R\}}}{\mathrm{Tr}\left[\,e^{-\beta\{\mathcal{H}_{1;L}-\mu_L N_L\}}\;e^{-\beta\{\mathcal{H}_{1;C}-\mu_C N_C\}}\;e^{-\beta\{\mathcal{H}_{1;R}-\mu_R N_R\}}\,\right]}\;. \tag{22}$$

これは、$t\to-\infty$ において、孤立した各部分系は、それぞれ化学ポテンシャル $\mu_{L,R,C}$ をもつ熱平衡にある、という仮定である。ただし、左右 reservoir の 化学ポテンシャルの差は、試料両端の電位差と等しくなるように選ぶ； $\mu_L-\mu_R=\Phi_L-\Phi_R=eV$ 。

5　物理量の期待値と摂動展開

摂動項 $\widetilde{\mathcal{H}}_2(t)$ の効果は、(12) 式 の定義により、$t=-\infty$ から徐々に switch-on され、$t=0$ の時に完全に取り入れられる。したがって、物理量の統計平均は、$t=0$ における密度行列 $\rho(0)$ を用いて定義される。

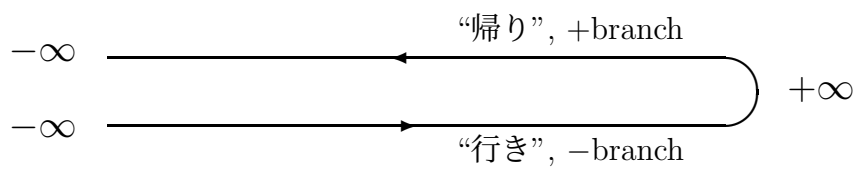
$$\begin{aligned}\langle\mathcal{O}\rangle &\equiv \mathrm{Tr}\,[\,\rho(0)\,\mathcal{O}_S\,] && (23)\\ &= \mathrm{Tr}\,[\,\widetilde{\rho}(0)\,\mathcal{O}_S\,] \;=\; \mathrm{Tr}\,[\,\widetilde{\rho}(-\infty)\,U(-\infty,0)\,\mathcal{O}_S\,U(0,-\infty)\,]\;. && (24)\end{aligned}$$

ここで、$\mathcal{O}_S$ は、物理量を表わす Schrödinger 表示の演算子である。また、(24) 式は、(16) 式と (18) 式 を用いて得られた。さらに、時間発展演算子の性質 $U(t_1,t_2)=U(t_1,t_3)\,U(t_3,t_2)$ を用いると、次のようにも書ける；

$$\langle\mathcal{O}\rangle \;=\; \langle\,U(-\infty,+\infty)\,U(+\infty,0)\,\mathcal{O}_S\,U(0,-\infty)\,\rangle_0\;. \qquad (25)$$

ただし、$\langle\cdots\rangle_0=\mathrm{Tr}\,[\,\widetilde{\rho}(-\infty)\cdots]$ とした。この表式は、Tr の中の時間経過を右から左へ読むと、図 3 のような絵がかける：$t=-\infty$ から出発し、$t=0$ で物理量 $\mathcal{O}$ の測定をし、その後、$t=+\infty$ まで行ったあと、$t=+\infty$ から $t=-\infty$ へ、U ターンする。通常の、絶対零度 Green 関数の摂動展開では、初期状態として $t=-\infty$ で縮退のない状態を考えるため、折り返し地点の $t=+\infty$ で元の状態に戻ることが示される [12]。このため、絶対零度 Green 関数の場合には、(25) 式の型の平均は、折り返し地点の $t=+\infty$ に相当するところで decouple され、“行き” と “帰り” を別々に考えることができる。しかし、我々が考えているのは、初期条件として (22) 式のように不均一な熱分布している系であるため、このような簡単化はできず、“行き” と “帰り” を同時に考えなければならない。

図 3　Time loop “C”：



次に、t 依存性のある演算子の平均を考えるために、(23) 式を一般化する。統計平均は密度行列 $\rho(0)$ を用いて定義されるため、物理量の時間依存性は演算子を通して記述されることになる。まず先に、Schrödinger 表示 $\mathcal{O}_S$、相互作用表示 $\widetilde{\mathcal{O}}(t)$、Heisenberg 表示 $\mathcal{O}_H(t)$、の間の関係を整理する。各表示が $t=0$ で一致する定義は、

$$\widetilde{\mathcal{O}}(t) \;=\; e^{i\,\mathcal{H}_1 t}\,\mathcal{O}_S\,e^{-i\,\mathcal{H}_1 t}\;, \qquad\qquad \mathcal{O}_H(t)=U(0,t)\,\widetilde{\mathcal{O}}(t)\,U(t,0)\;. \qquad (26)$$

時間依存性のある量の平均は、Heisenberg 表示を用いて表わされる；

$$\begin{aligned}\langle\mathcal{O}(t)\rangle &\equiv \mathrm{Tr}\,[\,\rho(0)\,\mathcal{O}_H(t)\,] && (27)\\ &= \langle\,U(-\infty,+\infty)\,U(+\infty,t)\,\widetilde{\mathcal{O}}(t)\,U(t,-\infty)\,\rangle_0 && (28)\\ &= \langle\,U(-\infty,+\infty)\,\Big\{\mathrm{T}\;U(+\infty,-\infty)\,\widetilde{\mathcal{O}}(t)\,\Big\}\rangle_0 && (29)\\ &= \langle\,\mathrm{T_C}\;U_c\,\widetilde{\mathcal{O}}(t^-)\,\rangle_0\;. && (30)\end{aligned}$$

(30) 式の $\mathrm{T_C}$、および U_c は、それぞれ図 3 で示した time loop に沿った時間順序、および 時間発展演算子（S 行列）を表わす。また、時刻を t^- と記したのは、loop に沿った時間発展において、往路 ($-$branch) の側に 演算子 $\tilde{\mathcal{O}}$ が位置していること、を指定するためである。具体的に計算しようと思うと (29) 式の方が、見通しが良い。この式を計算するには、$\mathcal{H}_2$ に関する摂動展開をすれば良い。このとき、“行き”の $U(+\infty,-\infty)$ と “帰り”の $U(-\infty,+\infty)$ の、両方を展開するのが、Keldysh の方法の特徴である：

$$
\begin{aligned}
\langle \mathcal{O}(t) \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!}\,\frac{(-i)^m}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt'_1 \cdots dt'_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \cdots dt_m \\
&\quad \times \langle \left\{ \widetilde{\mathrm{T}}\, \widetilde{\mathcal{H}}_2(t'_1) \cdots \widetilde{\mathcal{H}}_2(t'_n) \right\} \left\{ \mathrm{T}\, \widetilde{\mathcal{H}}_2(t_1) \cdots \widetilde{\mathcal{H}}_2(t_m)\, \tilde{\mathcal{O}}(t) \right\} \rangle_0 \,. \qquad (31)
\end{aligned}
$$

ここで、(20)–(21) 式を用いた。例えば、電流や密度を求めるには、$\mathcal{O}$ として、$c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma}$ 等を考えることになる。今、非摂動とした $\mathcal{H}_1$ が 2 次形式であるため、平均 $\langle \cdots \rangle_0$ は、Wick の定理を用いると、$\langle c^\dagger c \rangle_0$ のような対の相関関数の積へと分解できる。この相関関数は、対をなす 2 個の演算子が、“行き”の $U(+\infty,-\infty)$ からやって来たのか、“帰り”の $U(-\infty,+\infty)$ からやって来たのか、によって 4 種類に分類される。これに対応した 4 種類の Green 関数を導入することによって、Feynman diagram を用いた摂動展開が可能になる。

6 Green 関数

次に、4 種類の Green 関数を定義する：

$$
\begin{aligned}
G^{--}_{ij}(t_1,t_2) &\equiv -i \langle \mathrm{T}\, c_{i\sigma}(t_1)\, c^\dagger_{j\sigma}(t_2) \rangle && (32)\\
&= -i \langle \mathrm{T_C}\, U_c\, \tilde{c}_{i\sigma}(t_1^-)\, \tilde{c}^\dagger_{j\sigma}(t_2^-) \rangle_0 \,, && (33)\\
G^{++}_{ij}(t_1,t_2) &\equiv -i \langle \widetilde{\mathrm{T}}\, c_{i\sigma}(t_1)\, c^\dagger_{j\sigma}(t_2) \rangle && (34)\\
&= -i \langle \mathrm{T_C}\, U_c\, \tilde{c}_{i\sigma}(t_1^+)\, \tilde{c}^\dagger_{j\sigma}(t_2^+) \rangle_0 \,, && (35)\\
G^{+-}_{ij}(t_1,t_2) &\equiv -i \langle c_{i\sigma}(t_1)\, c^\dagger_{j\sigma}(t_2) \rangle && (36)\\
&= -i \langle \mathrm{T_C}\, U_c\, \tilde{c}_{i\sigma}(t_1^+)\, \tilde{c}^\dagger_{j\sigma}(t_2^-) \rangle_0 \,, && (37)\\
G^{-+}_{ij}(t_1,t_2) &\equiv \quad i \langle c^\dagger_{j\sigma}(t_2)\, c_{i\sigma}(t_1) \rangle && (38)\\
&= -i \langle \mathrm{T_C}\, U_c\, \tilde{c}_{i\sigma}(t_1^-)\, \tilde{c}^\dagger_{j\sigma}(t_2^+) \rangle_0 \,. && (39)
\end{aligned}
$$

ここで、$c_{i\sigma}(t_1)$, $c^\dagger_{j\sigma}(t_2)$ は、Heisenberg 表示の演算子である。また、$t^{+,-}$ は、上でも述べたように、loop に沿った時間発展において、演算子が、それぞれ $+$branch 側, $-$branch 側に位置することを指定している。上式の Green 関数には、Landau-Lifshitz の教科書 [7] で使用されている notation を用いたが、下の表には、他の良く見受ける記法との対応を示す：

Landau-Lifshitz	G^{--}	G^{++}	G^{+-}	G^{-+}
良く見受ける例	G_c	$\widetilde{G}_c$	$G^>$	$G^<$

表 1 notation の対応:causal 関数 G_c を, 単に G と表わすことも多い.

これらの Green 関数に対して、(31) 式のような摂動展開を行い、具体的に低次の項を Wick の定理を用いて分解すると、Feynman diagram との対応関係が見えてくる。この辺は、Landau-Lifshitz の教科書に詳しい記述があるので、ここでは省略する。結果として、摂動の効果は、各 Green 関数に対応した 4 種類の自己エネルギー Σ にまとめられ、行列形式の Dyson 方程式が得られる；

$$\boldsymbol{G}_{ij}(\omega) \;=\; \boldsymbol{g}_{ij}(\omega) \;+\; \sum_{lm} \boldsymbol{g}_{il}(\omega)\,\boldsymbol{\Sigma}_{lm}(\omega)\,\boldsymbol{G}_{mj}(\omega)\;, \tag{40}$$

$$\boldsymbol{G}_{ij} \;=\; \begin{bmatrix} G_{ij}^{--} & G_{ij}^{-+} \\ G_{ij}^{+-} & G_{ij}^{++} \end{bmatrix}\;, \qquad \boldsymbol{\Sigma}_{lm} \;=\; \begin{bmatrix} \Sigma_{lm}^{--} & \Sigma_{lm}^{-+} \\ \Sigma_{lm}^{+-} & \Sigma_{lm}^{++} \end{bmatrix}\;. \tag{41}$$

ここで、$\boldsymbol{g}_{ij}$ は、非摂動の Green 関数である。また、定常的な状態を考えているので、時間に関しては Fourier 変換を実行した：

$$G(t_1,t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, G(\omega)\, e^{-i\,\omega(t_1-t_2)}\;. \tag{42}$$

例えば、電子間相互作用を無視した場合には、左右の reservoir と試料の連結 $\mathcal{H}_{mix}$ のみが摂動となるため、自己エネルギーは次のように得られる；

$$\boldsymbol{\Sigma}_{lm} = -v_L\,(\,\delta_{l,0}\delta_{m,1} + \delta_{l,1}\delta_{m,0}\,)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} - v_R\,(\,\delta_{l,N}\delta_{m,N+1} + \delta_{l,N+1}\delta_{m,N}\,)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\;. \tag{43}$$

ところで、定義から確認できるように、4 種類の Green 関数は互いに独立ではない：

$$G^{--} + G^{++} \;=\; G^{+-} + G^{-+}\;, \qquad \Sigma^{--} + \Sigma^{++} \;=\; -\,\Sigma^{-+} - \Sigma^{+-}\;. \tag{44}$$

この従属関係のため、行列要素の 1 個がゼロになるように一次変換できる：

$$\boldsymbol{G} \;\Rightarrow\; \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{P}\;, \qquad \boldsymbol{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}\;, \tag{45}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & G_{ij}^{a} \\ G_{ij}^{r} & F_{ij} \end{bmatrix} \;=\; \begin{bmatrix} 0 & g_{ij}^{a} \\ g_{ij}^{r} & F_{ij}^{0} \end{bmatrix} + \sum_{lm} \begin{bmatrix} 0 & g_{il}^{a} \\ g_{il}^{r} & F_{il}^{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Omega_{lm} & \Sigma_{lm}^{r} \\ \Sigma_{lm}^{a} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & G_{mj}^{a} \\ G_{mj}^{r} & F_{mj} \end{bmatrix}\;. \tag{46}$$

ここで、各行列要素の定義は以下の通り。ただし、(44) 式が成立していることに注意：

$$G^{r} \;=\; G^{--} - G^{-+}\;, \qquad G^{a} \;=\; G^{--} - G^{+-}\;, \qquad F \;=\; G^{--} + G^{++}\;, \tag{47}$$

$$\Sigma^{r} \;=\; \Sigma^{--} + \Sigma^{-+}\;, \qquad \Sigma^{a} \;=\; \Sigma^{--} + \Sigma^{+-}\;, \qquad \Omega \;=\; \Sigma^{--} + \Sigma^{++}\;. \tag{48}$$

ここで、G^r, G^a は、それぞれ retarded, advanced 関数に対応し、関数 F は、粒子の分布関数と関連している。また、(46) 式の各成分は、次のような形式をしている；

$$G^{r} \;=\; g^{r} + g^{r}\,\Sigma^{r}\,G^{r}\;, \qquad G^{a} \;=\; g^{a} + g^{a}\,\Sigma^{a}\,G^{a}\;, \tag{49}$$

$$F \;=\; F^{0} + F^{0}\,\Sigma^{a}\,G^{a} + g^{r}\,\Sigma^{r}\,F + g^{r}\,\Omega\,G^{a}\;. \tag{50}$$

7　非摂動 Green 関数

次に、非摂動 Green 関数 $\boldsymbol{g}_{ij}$ の性質について述べる。我々は、非摂動ハミルトニアンとして、(11)–(14) 式 の $\mathcal{H}_1$ を取り、対応する密度行列は (22) 式で与えられるとした。このとき、左右の reservoir と試料は孤立しているので、各部分系の非摂動 Green 関数 $\boldsymbol{g}_{ij;\nu}$ $(\nu = L,\, R,\, C)$ は、定義から次のように得られる：

$$g^r_{ij;\nu}(\omega) \;=\; \sum_n \frac{\phi_{n;\nu}(i)\phi^*_{n;\nu}(j)}{\omega - \epsilon_{n;\nu} + i\delta}\,, \qquad g^a_{ij;\nu}(\omega) \;=\; \sum_n \frac{\phi_{n;\nu}(i)\phi^*_{n;\nu}(j)}{\omega - \epsilon_{n;\nu} - i\delta}\,, \tag{51}$$

$$F^0_{ij;\nu}(\omega) \;=\; \Big[\,1 - 2\,f_\nu(\omega)\,\Big]\,\Big[\,g^r_{ij;\nu}(\omega) - g^a_{ij;\nu}(\omega)\,\Big]\,. \tag{52}$$

ここで、$\epsilon_{n;\nu}$, $\phi_{n;\nu}(i)$ は $\mathcal{H}_{1;\nu}$ の 1 粒子状態のエネルギー固有値, 対応する固有関数であり、$f_\nu(\omega) = [e^{\beta(\omega-\mu_\nu)} + 1]^{-1}$ である。また、化学ポテンシャル μ_ν が、各部分において異なるため、エネルギーを化学ポテンシャルから測ることはしていない。したがって、初期条件における電子の分布、および その温度依存性は、$F^0_{ij;\nu}$ を通して取り入れられ、連結された全系における電子の分布関数は、(46) 式から決定されることになる。

非摂動状態において、左右の reservoir$(\nu = L,\, R)$ は、サイズが無限として扱えるため連続的なスペクトルを持ち、試料 $(\nu = C)$ は、サイズが有限なため離散的なスペクトルを持っている。そのため、全系が連結された後の定常状態では、Green 関数は $\mu_{L,R}$ のみに依存し、μ_C には依存しなくなる [6]：(49)–(50) 式を連立して形式的に解くと

$$F \;=\; [\,1 - g^r\,\Sigma^r\,]^{-1}\,F^0\,[\,1 + \Sigma^a\,G^a\,] \;+\; [\,1 - g^r\,\Sigma^r\,]^{-1}\,g^r\,\Omega\,G^a\,, \tag{53}$$

$$\;=\; G^r\,\{g^r\}^{-1}\,F^0\,\{g^a\}^{-1}\,G^a \;+\; G^r\,\Omega\,G^a\,. \tag{54}$$

今、(52) 式から $F^0 \propto [\,g^r - g^a\,]$ なので、試料 $(\nu = C)$ の領域では、$F^0_{ij;C}(\omega)$ は pole の寄与による δ 関数の和になっている。ところが、(54) 式の第 1 項では、両側にある $\{g^r\}^{-1}$ と $\{g^a\}^{-1}$ のため、F^0 の持っていた特異性はなくなり、$F^0_{ij;C}(\omega)$ の寄与はゼロになる。

8　非平衡電流

次に、電流や密度を求めるのに必要な相関関数を、Green 関数を用いて表わす；

$$\langle\, c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma}\,\rangle \;=\; -iG^{-+}_{ji}(0,0) \;=\; -i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\;G^{-+}_{ji}(\omega)\,. \tag{55}$$

ここで、(38), (42) 式を用いた。例えば、左の reservoir から試料に流れ込む電流 J_L は、

$$J_L \;=\; i\,ev_L\sum_\sigma\Big[\,c^\dagger_{1\sigma}c_{0\sigma} - c^\dagger_{0\sigma}c_{1\sigma}\,\Big]\,, \tag{56}$$

$$\langle J_L\rangle \;=\; 2ev_L\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,\Big[\,G^{-+}_{01}(\omega) - G^{-+}_{10}(\omega)\,\Big]\,. \tag{57}$$

試料から右の reservoir へ流れでる電流 J_R の期待値の表式も、同様に得られる。今は、定常状態であるので、電流の値は $\langle J_L\rangle = \langle J_R\rangle$ を満たす。以下では、$\langle J\,\rangle$ と記す。

電子間の相互作用を無視した場合には、(57) 式は次のような意味の取りやすい表式に、書き換えられる [3] ；

$$\langle J \rangle = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, [\, f_L(\omega) - f_R(\omega) \,] \, \mathcal{T}(\omega) \, , \tag{58}$$

$$\mathcal{T}(\omega) = 4 \, \Gamma_L(\omega) \, G^r_{1N}(\omega) \, \Gamma_R(\omega) \, G^a_{N1}(\omega) \, , \tag{59}$$

$$\Gamma_L(\omega) = -\,\mathrm{Im}\left[v_L^2 \, g^r_{00}(\omega) \right] , \qquad \Gamma_R(\omega) = -\,\mathrm{Im}\left[v_R^2 \, g^r_{N+1N+1}(\omega) \right] . \tag{60}$$

ここで、$h = 2\pi\hbar$、$\mathcal{T}(\omega)$ は透過確率に対応している [付録参照]。(58) 式は、Landauer 公式を電流-電圧特性が非線形な領域まで拡張した式になっている。分布関数, $f_L - f_R$, の制限のため、$\mu_R \lesssim \omega \lesssim \mu_L \ (= \mu_R + eV)$ の電子のみが電流に寄与する。(58) 式自身は、Keldysh の方法を用いなくても、直感的な議論 [13] からも導出できる。しかし、試料が 2 次元や 3 次元的な広がりを持つ場合に、電流の空間分布を調べようと思うと、直感だけでは不十分になる。その場合には、(57) と同様な表式にもどり、電子の分布に関する情報を含んだ関数 G^{-+} を求めることが必要になるため、Keldysh の方法が威力を発揮する [14]。

また、電子間相互作用がある場合には、試料と左右の reservoir を結ぶトンネル・ハミルトニアンの行列要素が、連結の仕方に特別な対称性を持っている場合を除き、一般には (58) のような表式は得られない [4]。このことは、電子間相互作用がある場合には、非弾性散乱による寿命が有限であることに起因している。ただし、Fermi 統計による散乱状態の制限のため、エネルギーが小さい準粒子の寿命は、低温では非常に長くなる。そのような、低エネルギーの準粒子が電気伝導を担う状況では、近藤問題で有効であった微視的な局所 Fermi 流体論 [15, 16] の考え方が、有用になる。例えば、線形応答の領域で、かつ絶対零度の場合には、コンダクタンスが Landauer 型の公式に表わされることを、特別な対称性を仮定せずに、示すことができる [17]。

9 おわりに

このノートでは、Keldysh Green 関数を用いた非平衡電流の計算法の概要を説明した。冒頭で述べたように、本格的な文献を読む前の warming up となることが目標だったが、少しでも役立つことになれば幸いである。ここまでの話しでは、試料と reservoir の連結が single-channel であるという、(5) 式の仮定は結局あまり使わなかった。積極的に使ったのは、最後の (58)–(60) 式の部分のみである。この部分も、複数の channel で連結される場合への一般化は、channel の数を考慮した行列を導入すれば straight forward に行える [4]。複数の channel の場合における具体的な応用として、例えば、野々山信二氏（山形大教育）と私は、量子細線中の非平衡電流分布の数値計算を試みている [14]。電流-電圧特性が非線形な領域では、渦が発生すること等が観測され、現在発展中である。最後に、このノートは共同研究を通して理解した内容をまとめたものであり、ご議論いただいた野々山さんに、深く感謝いたします。

参考文献

[1] ここでは、 “Keldysh Green 関数” という用語を用いるが、摂動の手法としては、Schwingerによる議論が先のようである； J. Schwinger: J. Math. Phys. **2**, 407 (1961).

[2] L. V. Keldysh: Sov. Phys. JETP **20**, 1018 (1965).

[3] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James: J. Phys. C **4**, 916 (1971).

[4] Y. Meir and N. S. Wingreen: Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).

[5] N. S. Wingreen and Y. Meir: Phys. Rev. **B 49**, 11 040 (1994).

[6] S. Hershfield, J. H. Davies, and J. W. Wilkins: Phys. Rev. **B46**, 7046 (1992).

[7] 井上健男 他 訳: ランダウ・リフシッツ,『物理的運動学 2』, 第10章, 東京図書 (1982).

[8] G. D. Mahan: *Many-Particle Physics* 2nd edition (Plenum Press, New York, 1990), Sec.2.9.

[9] K. Cho, Z. Su, B. Hao, and L. Yu: Physics Reports **118**, Nos. 1&2, 1 (1985).

[10] L. P. Kadanoff and G. Baym: *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1962).

[11] 正しくは、Poisson方程式と連立して、電荷分布とポテンシャルを自己無撞着に決める.

[12] 例えば、A. L. Fetter and J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGRAW-HILL, New York, 1971)、を参照されたい. 今は訳本もある.

[13] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).

[14] S. Nonoyama and A. Oguri: Phys. Rev. B **57**, 8797 (1998).

[15] K. Yosida and K. Yamada: Prog. Theor. Phys. **53**, 1286 (1975); K. Yamada: *ibid.* **54**, 316 (1975); H. Shiba: *ibid.* **54**, 967 (1975); A. Yoshimori: *ibid.* **55**, 67 (1976).

[16] A. C. Hewson: *The Kondo Problem to Heavy Femions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).

[17] A. Oguri: Phys. Rev. B **56**, 13422 (1997); Errata, ibid, B **58** (1998) 1690.

[付録]： Green 関数・透過係数・Friedel 総和則

この付録では、平衡な場合における透過係数 と Green 関数、Friedel 総和則、および時間発展との関連を簡単にまとめる。特に、相互作用のない場合を考え、$\hbar = 1$ とする。

A　透過係数と Green 関数

ハミルトニアンは、次の通り：

$$H \;=\; H_0 + V(x)\,, \qquad\qquad H_0 \;=\; -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,. \tag{61}$$

まず、連続スペクトル領域の波動関数を求める。$\phi_\omega(x)$ を エネルギーが ω の状態の波動関数、$\phi_\omega^{(0)}(x)$ を 対応する H_0 の波動関数とする：

$$[\,\omega \,-\, H\,]\,\phi_\omega(x) \;=\; 0\,, \qquad\qquad [\,\omega \,-\, H_0\,]\,\phi_\omega^{(0)}(x) \;=\; 0\,. \tag{62}$$

(62) から Lippmann-Schwinger 方程式が導かれる：

$$\phi_\omega(x) \;=\; \phi_\omega^{(0)}(x) \;+\; \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, G_0^r(x,x';\omega)\, V(x')\, \phi_\omega(x')\,. \tag{63}$$

同様に H および H_0 に対応する遅延 Green 関数は、それぞれ次の運動方程式を満たす：

$$[\,\omega \,-\, H\,]\, G^r(x,x';\omega) \;=\; \delta(x-x')\,, \tag{64}$$

$$[\,\omega \,-\, H_0\,]\, G_0^r(x,x';\omega) \;=\; \delta(x-x')\,. \tag{65}$$

(64)–(65) から、Dyson 方程式が導かれる：

$$G^r(x,x';\omega) \;=\; G_0^r(x,x';\omega) \;+\; \int_{-\infty}^{\infty} dx''\, G_0^r(x,x'';\omega)\, V(x'')\, G^r(x'',x';\omega)\,. \tag{66}$$

次に、Lippmann-Schwinger 方程式 および Dyson 方程式を T 行列を用いて書き換える：

$$\phi_\omega(x) \;=\; \phi_\omega^{(0)}(x) \;+\; \int_{-\infty}^{\infty}\!\!\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2\, G_0^r(x,x_1;\omega)\, T(x_1,x_2;\omega)\, \phi_\omega^{(0)}(x_2)\,, \tag{67}$$

$$\begin{aligned} G^r(x,x';\omega) \;=\;& G_0^r(x,x';\omega) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty}\!\!\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2\, G_0^r(x,x_1;\omega)\, T(x_1,x_2;\omega)\, G_0^r(x_2,x';\omega)\,, \end{aligned} \tag{68}$$

$$T(x,x';\omega) \;=\; V(x)\,\delta(x-x') \;+\; \int_{-\infty}^{\infty} dx''\, V(x)\, G_0^r(x,x'';\omega)\, T(x'',x';\omega)\,. \tag{69}$$

自由粒子の Green 関数 G_0^r は、1 次元の場合には次のように得られる：

$$
\begin{aligned}
G_0^r(x,x';\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\,\frac{e^{ip\,(x-x')}}{\omega-\frac{p^2}{2m}+i0^+} \\
&= \begin{cases} -i\,e^{ik|x-x'|}\,/\,v & , \quad \omega>0 \\ -\,e^{-\kappa|x-x'|}\,/\,\nu & , \quad \omega<0 \end{cases} \quad . \qquad (70)
\end{aligned}
$$

ここで、$k=\sqrt{2m\omega}$, $v=k/m$, $\kappa=\sqrt{2m|\omega|}$, $\nu=\kappa/m$ である。以後、k, v, κ, ν は、ω の関数であることに注意。ただし、以下では散乱問題を調べるので $\omega>0$ とおく。

今、簡単のためポテンシャル $V(x)$ は、$0<x<L$ でのみ有限な値を持ち、その外側 $x<0$ および $x>L$ では $V(x)=0$ であるとする。また、非摂動の波動関数として x の正方向に進む波を考え、 $\phi_\omega^{(0)}(x)=e^{ikx}$ とおく。次に、(68), (67) に (70) を代入すると；

$$
\phi_\omega(x) = e^{ikx} - \frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\,e^{ik|x-x_1|}\,T(x_1,x_2;\omega)\,e^{ikx_2}\,, \qquad (71)
$$

$$
G^r(x,x';\omega) = -\frac{i}{v}\left[e^{ik|x-x'|} - \frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\,e^{ik|x-x_1|}\,T(x_1,x_2;\omega)\,e^{ik|x_2-x'|}\right]. \qquad (72)
$$

- <u>$x>L$、$x'<0$ の場合</u> から、透過波の情報が得られる；

$$
\phi_\omega(x) = \tilde{t}(\omega)\,e^{ikx}\,, \qquad (73)
$$

$$
G^r(x,x';\omega) = -\frac{i}{v}\,\tilde{t}(\omega)\,e^{ik(x-x')}\,, \qquad (74)
$$

$$
\tilde{t}(\omega) = 1-\frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\,e^{-ikx_1}\,T(x_1,x_2;\omega)\,e^{ikx_2}\,. \qquad (75)
$$

- <u>$x'<x<0$ の場合</u> から、反射波の情報が得られる；

$$
\phi_\omega(x) = e^{ikx} + \tilde{r}(\omega)\,e^{-ikx}\,, \qquad (76)
$$

$$
G^r(x,x';\omega) = -\frac{i}{v}\left[e^{ikx} + \tilde{r}(\omega)\,e^{-ikx}\right]e^{-ikx'}\,, \qquad (77)
$$

$$
\tilde{r}(\omega) = -\frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\,e^{ikx_1}\,T(x_1,x_2;\omega)\,e^{ikx_2}\,. \qquad (78)
$$

たとえば (74) は、透過係数と Green 関数の関係を表わしていると解釈できる：

$$
\tilde{t}(\omega) = i\,v\,e^{-ik(x-x')}\,G^r(x,x';\omega)\,, \qquad x>L\,,\ \ x'<0\,. \qquad (79)
$$

B　透過係数と Friedel 総和則

基底状態では、Fermi エネルギー E_F までの 1 体状態が占有されている。 ポテンシャル V が働く場合 と 自由電子系との全電子数の差 ΔN は、Friedel の総和則により phase

shift と関連づけられる。簡単のためスピン自由度を無視すると、ΔN の定義は次のとおり：

$$\Delta N \;=\; -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{E_F} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dx\;\left[\,G^r(x,x;\,\omega)\;-\;G_0^r(x,x;\,\omega)\,\right]\;. \tag{80}$$

(68) を用い、Langer and Ambegaokar, Phys. Rev. **121** (1961) 1090 を参考に式変形をする；

$$\begin{aligned}
\Delta N \;&=\; -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{E_F} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx\; G_0^r(x,x_1;\,\omega)\,T(x_1,x_2;\,\omega)\,G_0^r(x_2,x;\,\omega)\\
&=\; -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{E_F} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\,e^{ip(x_2-x_1)}\left\{-\frac{\partial G_0^r(p,\omega)}{\partial\omega}\right\}\,T(x_1,x_2;\,\omega)\\
&=\; -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{E_F} d\omega\;\mathrm{Tr}\left[-\frac{\partial\widehat{G}_0^r(\omega)}{\partial\omega}\,\widehat{T}(\omega)\right]\\
&=\; -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{E_F} d\omega\;\frac{\partial}{\partial\omega}\;\mathrm{Tr}\,\log\left[\,\widehat{1}-\widehat{G}_0^r(\omega)\;\widehat{V}\,\right]\\
&=\; \frac{1}{2\pi i}\;\mathrm{Tr}\left\{\log\left[\,\widehat{1}-\widehat{G}_0^a(E_F)\;\widehat{V}\,\right]\;-\;\log\left[\,\widehat{1}-\widehat{G}_0^r(E_F)\;\widehat{V}\,\right]\right\}\\
&=\; \frac{1}{2\pi i}\;\mathrm{Tr}\;\log\left[\,\widehat{1}-\left\{\widehat{G}_0^a(E_F)\;-\;\widehat{G}_0^r(E_F)\right\}\,\widehat{T}(E_F)\right]\,.
\end{aligned} \tag{81}$$

ただし、$G_0^r(p,\omega)=[\omega-\omega_p+i0^+]^{-1}$ であること、Tr の中では演算子を巡回することができること等を用いた。次に、(81) の最後の表式で、さらに $\log[1-X]=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{X^n}{n}$ の展開を行って、中間状態を運動量の固有状態で作った完全系 $\int\frac{dp}{2\pi}\,|p\rangle\langle p|=1$ で記述すると、

$$\langle p|\,\left\{\widehat{G}_0^a(E_F)-\widehat{G}_0^r(E_F)\right\}\,\widehat{T}(E_F)\,|p'\rangle\;=\;2\pi i\,\delta(E_F-\omega_p)\,\langle p|\,\widehat{T}(E_F)\,|p'\rangle\;, \tag{82}$$

であるため、(81) の Tr は $p=\pm k_F$ の状態の寄与のみで表わされる：

$$\Delta N\;=\;\frac{1}{2\pi i}\;\mathrm{Tr}\,[\,\log\boldsymbol{S}\,]\;=\;\frac{1}{2\pi i}\;\log[\,\det\;\boldsymbol{S}\,]\;, \tag{83}$$

$$\boldsymbol{S}\;=\;\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}-\frac{i}{v_F}\begin{bmatrix}T_{k_F,k_F}(E_F)&T_{k_F,-k_F}(E_F)\\T_{-k_F,k_F}(E_F)&T_{-k_F,-k_F}(E_F)\end{bmatrix}\;=\;\begin{bmatrix}\widetilde{t}(E_F)&\widetilde{r}'(E_F)\\\widetilde{r}(E_F)&\widetilde{t}'(E_F)\end{bmatrix}\;, \tag{84}$$

$$T_{p,p'}(\omega)\;=\;\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2\,e^{-ipx_1}\,T(x_1,x_2;\,\omega)\,e^{ip'x_2}\;. \tag{85}$$

この (83) が Friedel 総和則である。ただし、$\widetilde{t}'(\omega)\,,\widetilde{r}'(\omega)$ は、右側からの入射波に対する透過・反射係数である。ここではハミルトニアン (61) に時間反転対称があるため、$\widetilde{t}(\omega)=\widetilde{t}'(\omega)$ となる。さらに、$V(x)=V(-x)$ という対称性がある場合には $\widetilde{r}(\omega)=\widetilde{r}'(\omega)$ となり、$\boldsymbol{S}$ を対角化することができる。その結果、$\widetilde{t}=e^{i(\delta_S+\delta_A)}\,\cos(\delta_S-\delta_A)$、$\widetilde{r}=i\,e^{i(\delta_S+\delta_A)}\,\sin(\delta_S-\delta_A)$、と表わされ、$\Delta N=(\delta_S+\delta_A)/\pi$、$|\widetilde{t}|^2=\cos^2(\delta_S-\delta_A)$ となる。ただし、$\delta_S,\,\delta_A$ は、それぞれ 偶・奇 の対称性をもつ成分の phase shift である。

C　透過係数と時間発展

次に、透過係数と時間発展の関係を整理する。$t = 0$ に初期条件が与えられた場合、$t \geq 0$ における波動関数は、Feynman 核 $K(x, x'; t)$ を用いて次のように表わされる：

$$\psi(x,t) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, K(x,x';t)\, \psi(x',0)\;, \tag{86}$$

$$K(x,x';t) \;=\; \theta(t)\, \sum_n \phi_n(x)\, \phi_n^*(x')\; e^{-i\epsilon_n t}\;. \tag{87}$$

ここで $\theta(t)$ は ステップ関数、ϵ_n、$\phi_n(x)$ は H の 固有値 および 固有関数; $H\phi_n(x) = \epsilon_n \phi_n(x)$。(87) を時間に関して Fourier 変換すると Feynman 核 と 遅延 Green 関数の関係がわかる：

$$K(x,x';\omega) \;\equiv\; \int_0^{\infty} dt\, e^{i\,(\omega + i0^+)\,t}\, K(x,x';t) \;\;=\; i\, G^r(x,x';\omega)\;. \tag{88}$$

そこで、遅延 Green 関数を用い、実時間における Feynman 核の振る舞いを調べる；

$$K(x,x';t) \;=\; i\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, G^r(x,x';\omega)\, e^{-i\omega t} \;+\; i\int_{-\infty}^{0} \frac{d\omega}{2\pi}\, G^r(x,x';\omega)\, e^{-i\omega t}\;. \tag{89}$$

第 1 項は $\omega > 0$ の成分を表わし、(72) を通して、透過・反射係数と関連づけられる。第 2 項の $\omega < 0$ の成分の寄与を表わしている。この項の振る舞いを見るために、(68) に (70) の $\omega < 0$ の表式を代入すると；

$$G^r(x,x';\omega) \;=\; -\frac{1}{\nu}\left[e^{-\kappa|x-x'|} \;-\; \frac{1}{\nu}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1 dx_2\, e^{-\kappa|x-x_1|}\, T(x_1,x_2;\omega)\, e^{-\kappa|x_2-x'|} \right]\;. \tag{90}$$

例えば、$x > L\,,\; x' < 0$ の場合、(90) は $e^{-\kappa\,(x-x')}$ に比例し、$x - x'$ の増大にしたがって指数関数的に減少する。つまり、$x\,,\, x'$ を、ポテンシャル散乱を受ける領域から十分離れた地点に取ると、$\omega < 0$ の成分の寄与は無視できる。したがって $x \to \infty\,,\; x' \to -\infty$ における $K(x,x';t)$ の漸近形は、(89) の第 1 項に (74) を代入して次のように得られる；

$$\begin{aligned} K(x,x';t) \;&\simeq\; \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \frac{1}{v}\, \widetilde{t}(\omega)\; e^{i\,[\,k\,(x-x')\,-\,\omega t\,]} \\ &=\; \int_0^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \widetilde{t}(\omega_k)\; e^{i\,[\,k\,(x-x')\,-\,\omega_k t\,]}\;. \end{aligned} \tag{91}$$

ここで $\omega_k = \dfrac{k^2}{2m}$、2 行目の表式では積分変数を ω から k に取り直した。この漸近形が、$k > 0$ の成分のみの寄与からなるのは、$x \to \infty$ に到達するのは正の方向に進む波のみであることに対応しているため、と思われる。