量子輸送・電子相関の基礎

大阪市立大学 理学部 物質科学科　**小栗 章**

目 次

1　多粒子系の量子力学

N 個の同種粒子系：

$$H_N \;=\; \sum_{i=1}^{N} h(r_i) \;+\; \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} U(r_i, r_j)\;, \tag{1}$$

$$h(r) \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \;+\; V(r)\;. \tag{2}$$

例えば、固有値・固有関数を求める場合、

$$H_N\,\Phi_N(r_1, r_2, \ldots, r_N) \;=\; E\,\Phi_N(r_1, r_2, \ldots, r_N)\;. \tag{3}$$

を解き、さらに同種粒子が区別できないことを要請として考慮する必要がある。すなわち、確率 $|\Phi_N|^2$ は、粒子の置換 $r_i \Leftrightarrow r_j$ に対して不変でなければならない。この要請を満たす可能性は、対称か反対称の２通り：

$$\Phi_N(\ldots,\; r_i\;, \ldots,\; r_j\;, \ldots) \;=\; \pm\,\Phi_N(\ldots,\; r_j\;, \ldots,\; r_i\;, \ldots)\;. \tag{4}$$

ここで複合は、Bose 粒子の場合 $+$、Fermi 粒子の場合 $-$。

問題を解く方針として、例えば次の二通りの方針が考えられる：

- 先に (3) 式を一般的に解き、その解の中から (4) 式を満たすものを選ぶ。
- 先に (4) 式を満たす完全系を用意し、それ基底として置換に対する不変性を満たす空間内で (3) 式を解く。

後者の方の定式化として、第二量子化がある。

2　Fermi 粒子系の第二量子化

Fermi 粒子系の第二量子化では、次の反交換関係を満たす演算子 c , $c^\dagger$ を用いる:

$$\{\,c\;,\;c^\dagger\,\} = 1\;, \qquad \{\,c\;,\;c\,\} = 0\;, \qquad \{\,c^\dagger,\;c^\dagger\,\} = 0\;. \tag{5}$$

定義より、$c\,c\;=0$、$c^\dagger c^\dagger = 0$。これから、占有数演算子 $\widehat{n} \equiv c^\dagger c$ は、$\widehat{n}^2 = \widehat{n}$ という性質がをもち、固有値が $n\;=\;0, 1$ に限られることがわかる。対応する固有ベクトルは、$\widehat{n}\,|0\rangle = 0$、および $\widehat{n}\,|1\rangle = |1\rangle$。次の関係が成立する：

$$c^\dagger|0\rangle = |1\rangle\;, \qquad c^\dagger|1\rangle = 0\;, \qquad c\;|1\rangle = |0\rangle\;, \qquad c\;|0\rangle = 0\;. \tag{6}$$

次に、一粒子 Hamiltonian (2) 式に対応する軌道関数 $h(r)\,\phi_k(r) \;=\; \epsilon_k\,\phi_k(r)$,

$$\int dr\,\phi^*_{k'}(r)\,\phi_k(r) \;=\; \delta_{kk'}\;, \qquad\qquad \sum_k \phi_k(r)\,\phi^*_k(r') \;=\; \delta(r - r')\;, \tag{7}$$

の各状態の占有数に対応する生成・消滅演算子を導入する：

$$\{\, c_{k\sigma},\ c^\dagger_{k'\sigma'}\,\} = \delta_{kk'}\,\delta_{\sigma\sigma'}\ , \qquad \{\, c_{k\sigma},\ c_{k'\sigma'}\} = 0\ , \qquad \{\, c^\dagger_{k\sigma},\ c^\dagger_{k'\sigma'}\,\} = 0\ . \tag{8}$$

これに対応した実空間で粒子の生成・消滅は、場の演算子で記述される：

$$\widehat{\psi}_\sigma(r)\ \equiv\ \sum_k c_{k\sigma}\,\phi_k(r)\ , \qquad \widehat{\psi}^\dagger_\sigma(r)\ \equiv\ \sum_k c^\dagger_{k\sigma}\,\phi^*_k(r)\ , \tag{9}$$

$$\{\, \widehat{\psi}_\sigma(r),\ \widehat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(r')\,\} = \delta(r-r')\,\delta_{\sigma\sigma'}\ , \tag{10}$$

$$\{\, \widehat{\psi}_\sigma(r),\ \widehat{\psi}_{\sigma'}(r')\,\} = 0\ , \qquad \{\, \widehat{\psi}^\dagger_\sigma(r),\ \widehat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(r')\,\} = 0\ . \tag{11}$$

N 粒子系の Hilbert space (Fock space) に、次の反対称化された基底を用いる：

$$|k_1\sigma_1,\ k_2\sigma_2\,,\ \ldots\ ,\ k_N\sigma_N\rangle\ \equiv\ c^\dagger_{k_1\sigma_1}\,c^\dagger_{k_2\sigma_2}\ \cdots\ c^\dagger_{k_N\sigma_N}\,|0\rangle\ . \tag{12}$$

この基底を用いると、(1) に対応する Hamiltonian は、次のように表される：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}\ &=\ \sum_\sigma\int dr\,\widehat{\psi}^\dagger_\sigma(r)\,h(r)\,\widehat{\psi}_\sigma(r)\ +\ \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int dr dr'\,\widehat{\psi}^\dagger_\sigma(r)\,\widehat{\psi}^\dagger_{\sigma'}(r')\,U(r,r')\,\widehat{\psi}_{\sigma'}(r')\,\widehat{\psi}_\sigma(r)\\ &=\ \sum_\sigma\sum_k \epsilon_k\,c^\dagger_{k\sigma}\,c_{k\sigma}\ +\ \frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{k_1,k_2\\ k_3,k_4}} U_{k_1k_2;k_3k_4}\,c^\dagger_{k_1\sigma}\,c^\dagger_{k_2\sigma'}\,c_{k_3\sigma'}c_{k_4\sigma}\ ,\end{aligned} \tag{13}$$

$$U_{k_1k_2;k_3k_4}\ =\ \int dr dr'\,\phi^*_{k_1}(r)\,\phi^*_{k_2}(r')\,U(r,r')\,\phi_{k_3}(r')\,\phi_{k_4}(r)\ . \tag{14}$$

3　平衡系の統計力学

第二量子化を用いて熱統計を考える場合は、Grand Canonical 集団を用いると見通しが良くなる。温度 T、化学ポテンシャル μ の熱平衡系の大分配関数は、

$$\Xi\ =\ \sum_N\sum_l e^{-\beta\left(E_{N,l}-\mu N\right)}\ =\ \mathrm{Tr}\,e^{-\beta\,(\mathcal{H}-\mu N)}\ , \tag{15}$$

$$\Omega\ =\ -\frac{1}{\beta}\,\log\Xi\ . \tag{16}$$

ただし、$E_{N,l}$ は粒子数が N の固有状態 l のエネルギーである。熱力学関数 Ω は、$\Omega = E - TS - N\mu$ に対応し、微分形では $d\Omega = -S\,dT - p\,dV - N\,d\mu$ と書ける。演算子 A に対応する物理量の熱平衡における期待値は、

$$\langle A\rangle\ =\ \mathrm{Tr}\Big[\,\rho_{\mathrm{eq}}\,A\Big]\ , \qquad \rho_{\mathrm{eq}}\ =\ \frac{e^{-\beta\,(\mathcal{H}-\mu N)}}{\Xi}\ . \tag{17}$$

相互作用のない Fermi 粒子系の大分配関数は、$\xi_k = \epsilon_k - \mu$ とおくと、

$$\Xi_0\ =\ \prod_{k\sigma}\Big(1+e^{-\beta\,\xi_k}\Big)\ , \qquad \Omega_0\ =\ -\frac{2}{\beta}\sum_k\log\Big(1+e^{-\beta\,\xi_k}\Big)\ . \tag{18}$$

以下では $k_B = 1$ の単位系を用いる、$\beta = 1/T$ 。また、μN の項を Hamiltonian に加え、$\mathcal{H} - \mu N$ を改めて $\mathcal{H}$ と記すことにする。

4 Heisenberg 表示と相互作用表示

Hamiltonian を二つの部分に分ける：　　（以下では、$\hbar = 1$ の単位系を用いる）

$$\mathcal{H} \;=\; \mathcal{H}_0 \;+\; \mathcal{H}_I \,. \tag{19}$$

Schrödinger 表示：時間発展は状態に、演算子 B は t によらない：

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\Psi(t)\rangle \;=\; \mathcal{H}\,|\Psi(t)\rangle \,, \qquad\qquad \overline{B} \;=\; \langle\Psi(t)|B|\Psi(t)\rangle \,. \tag{20}$$

Heisenberg 表示：時間発展は演算子に。演算子の初期条件は $B_H(0) = B$ 。

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\,B_H(t) \;=\; [\,B_H(t)\,,\,\mathcal{H}\,] \,, \qquad\qquad \overline{B} \;=\; \langle\Psi(0)|B_H(t)|\Psi(0)\rangle \,. \tag{21}$$

相互作用表示：時間発展の複雑な部分は状態に取り入れる。

$$|\Psi_I(t)\rangle \;=\; e^{i\mathcal{H}_0 t}\,|\Psi(t)\rangle \,, \qquad\qquad \overline{B} \;=\; \langle\Psi_I(t)|\widetilde{B}(t)|\Psi_I(t)\rangle \,, \tag{22}$$

$$\widetilde{B}(t) \;=\; e^{i\mathcal{H}_0 t} B\, e^{-i\mathcal{H}_0 t} \,, \qquad\qquad \widetilde{\mathcal{H}}_I(t) \;=\; e^{i\,\mathcal{H}_0 t}\,\mathcal{H}_I\, e^{-i\,\mathcal{H}_0 t} \,, \tag{23}$$

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\Psi_I(t)\rangle \;=\; \widetilde{\mathcal{H}}_I(t)\,|\Psi_I(t)\rangle \,. \tag{24}$$

初期条件は $|\Psi_I(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle$、$t = 0$ で全ての表示が一致するように選んでいる。

5 時間発展演算子

$\mathcal{H}_I$ 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。そこで、次に、時間発展演算子 $U(t, t_0)$ を導入する：

$$|\Psi_I(t)\rangle \;=\; U(t, t_0)\,|\Psi_I(t_0)\rangle \,. \tag{25}$$

定義より、$U(t, t) = 1$、$U^\dagger(t, t_0) = U(t_0, t)$ という性質がある。また、(25) 式を (22) の $\overline{B}$ の式 に代入すると、Heisenberg 表示の演算子 $B_H(t)$ との関係が得られる：

$$B_H(t) = U(0, t)\,\widetilde{B}(t)\,U(t, 0) \,. \tag{26}$$

次に、(25) 式 を (24) 式に代入すると、$U(t, t_0)$ に関する微分方程式が得られる：

$$i\frac{\partial}{\partial t}\,U(t, t_0) \;=\; \widetilde{\mathcal{H}}_I(t)\,U(t, t_0) \,. \tag{27}$$

両辺を t に関して積分し、整理すると、

$$U(t, t_0) \;=\; 1 \;-\; i\int_{t_0}^{t} dt_1\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_1)\,U(t_1, t_0) \,. \tag{28}$$

この式を逐次的 (iterative) に用いて、形式解を得る：

$$
\begin{aligned}
U(t,t_0) &= 1+\sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_1)\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_2)\cdots\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_n) \\
&= 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t}dt_n\,\mathrm{T}\left[\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_1)\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_2)\cdots\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_n)\,\right].
\end{aligned}
\tag{29}
$$

ここで、T は T 積と呼ばれ、積 $\left[\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_1)\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_2)\cdots\widetilde{\mathcal{H}}_I(t_n)\,\right]$ を時刻 $t_1,t_2,\ldots,t_n$ の値によって、大きいものを左、小さいものを右に、並べることを意味する。(29) 式は、$\mathcal{H}_I$ に関する摂動展開になっている。

6 密度行列の時間発展

時間変化する外場中では、密度行列 $\rho(t)$ は時間に依存し、物理量 B の期待値は

$$
\langle B\rangle \;=\; \mathrm{Tr}\,[\,\rho(t)\,B\,]\;, \tag{30}
$$

となる。$\rho(t)$ の時間発展 は von Neumann の式に従う：

$$
\frac{\partial}{\partial t}\,\rho(t) \;=\; -i\left[\,\mathcal{H}(t)\;,\;\rho(t)\,\right]. \tag{31}
$$

$\mathcal{H}_I$ 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：

$$
\widetilde{\rho}(t) \;=\; e^{i\,\mathcal{H}_0 t}\,\rho(t)\,e^{-i\,\mathcal{H}_0 t}\;, \tag{32}
$$

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；

$$
\frac{\partial}{\partial t}\,\widetilde{\rho}(t) \;=\; -i\left[\,\widetilde{\mathcal{H}}_I(t)\;,\;\widetilde{\rho}(t)\,\right], \tag{33}
$$

$$
\widetilde{\rho}(t) \;=\; U(t,t_0)\,\widetilde{\rho}(t_0)\,U^{\dagger}(t,t_0)\;. \tag{34}
$$

また、(34) 式が、(33) 式の解になっていることは、(34) 式を t で微分し、(27) 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。(34) 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る。

7　線形応答理論

ここでは、(19) 式のように Hamiltonian を二つの部分に分ける時、外場を $\mathcal{H}_I$ とし、$\mathcal{H}_0$ にはそれ以外の残り全ての部分を選ぶ。したがって、相互作用のある系では相互作用部分も $\mathcal{H}_0$ に含める。線形応答理論では、外場 $\mathcal{H}_I$ に関する 1 次摂動の範囲で、(30) 式の物理量 B の期待値を求める。外場は $t = t_0$ から断熱的にかけられ、系は $t \leq t_0$ においては外場のない熱平衡にあったとする：

$$\rho(t_0) \;=\; \frac{e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}} \;\equiv\; \rho_{\mathrm{eq}}\,. \tag{35}$$

このとき、(32) 式より $\tilde{\rho}(t_0) \,=\, \rho(t_0)$ 。そして、初期時刻を $t_0 \to -\infty$ とする。$\tilde{\rho}(t)$ に対する 1 次摂動は、(29) 式、(34) 式、および初期条件を用いると、

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(t) \;&=\; \left[1 - i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, \widetilde{\mathcal{H}}_I(t_1) \,+\, \cdots\right] \rho_{\mathrm{eq}} \left[1 + i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, \widetilde{\mathcal{H}}_I(t_1) \,+\, \cdots\right] \\ &=\; \rho_{\mathrm{eq}} \,+\, i\int_{-\infty}^{t} dt'\, \left[\,\rho_{\mathrm{eq}}\,,\, \widetilde{\mathcal{H}}_I(t')\,\right] \,+\, \cdots\,. \end{aligned} \tag{36}$$

ここで、外場を表す関数を $F(t)$、それ結合する演算子を A とする：

$$\mathcal{H}_I \;=\; -\,A\,F(t)\,. \tag{37}$$

これを (36) 式に代入し、(32) を用いて整理すると、$\rho(t)$ の 1 次摂動を得る：

$$\rho(t) \;\simeq\; \rho_{\mathrm{eq}} + \Delta\rho(t)\,, \tag{38}$$

$$\Delta\rho(t) \;=\; -\,i\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-i\,\mathcal{H}_0(t-t')}\,[\,\rho_{\mathrm{eq}}\,,\, A\,]\, e^{i\,\mathcal{H}_0(t-t')}\; F(t')\,. \tag{39}$$

物理量 B の期待値の、熱平衡における値 $\langle B\rangle_{\mathrm{eq}}$ からの線形応答 $\Delta B(t)$ は、

$$\langle B\rangle \;\simeq\; \mathrm{Tr}\left[\,\rho_{\mathrm{eq}}\, B\,\right] \,+\, \mathrm{Tr}\,[\,\Delta\rho(t)\, B\,] \;=\; \langle B\rangle_{\mathrm{eq}} \,+\, \Delta B(t)$$

$$\begin{aligned}\Delta B(t) \;&=\; -i\int_{-\infty}^{t} dt'\; \mathrm{Tr}\left[\, B\, e^{-i\,\mathcal{H}_0(t-t')}\,[\,\rho_{\mathrm{eq}}\,,\, A\,]\, e^{i\,\mathcal{H}_0(t-t')}\,\right] F(t') \\ &=\; \int_{-\infty}^{\infty} dt'\; \chi^r_{BA}(t-t')\, F(t')\,. \end{aligned} \tag{40}$$

応答関数 $\chi^r_{BA}(t-t')$ は、ステップ関数 $\theta(t-t')$ を用いて次のように定義した：

$$\begin{aligned}\chi^r_{BA}(t-t') \;&=\; -i\,\theta(t-t')\,\mathrm{Tr}\left[\, B\, e^{-i\,\mathcal{H}_0(t-t')}\,[\,\rho_{\mathrm{eq}}\,,\, A\,]\, e^{i\,\mathcal{H}_0(t-t')}\,\right] \\ &=\; i\,\theta(t-t')\,\langle\,[\,B(t-t')\,,\, A\,]\,\rangle_{\mathrm{eq}}\;\;. \end{aligned} \tag{41}$$

ここで、トレースの性質 $\mathrm{Tr}[CD] = \mathrm{Tr}[DC]$ を用いた。(41) 式中の $B(t)$ の定義は、

$$B(t) \;=\; e^{i\,\mathcal{H}_0 t} B\, e^{-i\,\mathcal{H}_0 t}\,. \tag{42}$$

この章では、$\mathcal{H}_0$ として相互作用を含む平衡系の全 Hamiltonian にとっているので、$B(t)$ は平衡系の Heisenberg 演算子である。

Fourier 変換, $F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\,\omega t}\, F(t)$, を行うと (40) 式は、次のように書ける：

$$\Delta B(\omega) \;=\; \chi^r_{BA}(\omega)\, F(\omega)\,. \tag{43}$$

以下では、電気伝導度の導出の準備として、$\chi^r_{BA}(\omega)$ を少し書き換える。$\chi^r_{BA}(t)$ を Fourier 変換では、ステップ関数 $\theta(t)$ が含まれるため、下限は $t = 0$ と置ける：

$$\chi^r_{BA}(\omega) \;=\; \int_0^{\infty} dt\; e^{i\,(\omega+i\delta)\,t}\, X(t)\,, \qquad\qquad X(t) \;=\; i\,\langle\,[\,B(t)\,,\,A\,]\,\rangle_{\rm eq}\,. \tag{44}$$

δ は 無限小の正の数、特異性のない項では $\delta \to 0$ とおける。次に部分積分すると

$$\chi^r_{BA}(\omega) \;=\; -\,\frac{X(0)}{i\,(\omega+i\delta)} \;-\; \int_0^{\infty} dt\; \frac{e^{i\,(\omega+i\delta)\,t}}{i\,(\omega+i\delta)}\;\frac{dX(t)}{dt}\,, \tag{45}$$

$$X(0) = \;-\;\int_0^{\infty} dt\; e^{-\delta\,t}\,\frac{dX(t)}{dt}\,. \tag{46}$$

(46) 式を (45) 式に代入すると、

$$\begin{aligned}\chi^r_{BA}(\omega) \;&=\; -\int_0^{\infty} dt\; e^{-\delta\,t}\;\frac{e^{i\,\omega t}-1}{i\,(\omega+i\delta)}\;\frac{dX(t)}{dt}\\ &=\; -\int_0^{\infty} dt\; e^{-\delta\,t}\;\frac{e^{i\,\omega t}-1}{i\,\omega}\;\frac{dX(t)}{dt}\,.\end{aligned} \tag{47}$$

ここで、被積分関数は、分子にある $(e^{i\,\omega t}-1)$ の因子が $\omega \to 0$ でゼロになるため、$\omega = 0$ に極をもたない。そのため、2 行目の分母では $\delta \to 0$ とした。次に、(44) 式で定義した $X(t)$ は、$X(t) \;=\; i\,\langle\,[\,B\,,\,A(-t)\,]\,\rangle_{\rm eq}$ とも書けるので

$$\frac{dX(t)}{dt} \;=\; i\left\langle\left[\frac{dB(t)}{dt}\,,\,A\right]\right\rangle_{\rm eq} \;=\; -\,i\left\langle\left[B(t)\,,\,\frac{dA}{dt}\right]\right\rangle_{\rm eq}\,. \tag{48}$$

まとめると、$\chi^r_{BA}(\omega)$ を次のようにも表すことができる：

$$\chi^r_{BA}(\omega) \;=\; -\;\frac{Q^r_{BA}(\omega) - Q^r_{BA}(0)}{i\,\omega}\,, \tag{49}$$

$$Q^r_{BA}(\omega) \;=\; -\,i\int_0^{\infty} dt\; e^{i\,(\omega+i\delta)\,t}\left\langle\left[B(t)\,,\,\frac{dA}{dt}\right]\right\rangle_{\rm eq}\,. \tag{50}$$

8　電気伝導度 part I (久保公式)

外場として電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$、その線形応答として電流密度 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$ を考える。外場の Hamiltonian は、電荷密度 $\rho_e(\boldsymbol{r}')$ とスカラーポテンシャル $\Phi_{\rm ex}(\boldsymbol{r}',t)$ を用いると

$$V \;=\; \int d\boldsymbol{r}'\,\rho_e(\boldsymbol{r}')\,\Phi_{\rm ex}(\boldsymbol{r}',t)\;, \qquad\qquad \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) \;=\; -\boldsymbol{\nabla}\Phi_{\rm ex}(\boldsymbol{r},t)\;. \tag{51}$$

前章との対応では、$A \Rightarrow -\rho_e(\boldsymbol{r}')$, $F(t) \Rightarrow \Phi_{\rm ex}(\boldsymbol{r}',t)$, $B \Rightarrow \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$.
電流の期待値は、(43) 式、(50) 式を用いると

$$\langle J_\mu(\boldsymbol{r},\omega)\rangle \;=\; -\int d\boldsymbol{r}'\;\frac{Q^r_\mu(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)\;-\;Q^r_\mu(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';0)}{i\,\omega}\;\Phi_{\rm ex}(\boldsymbol{r}',\omega)\;, \tag{52}$$

$$Q^r_\mu(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \;=\; i\int_0^\infty dt\;e^{i\,(\omega+i\delta)\,t}\left\langle\left[\,J_\mu(\boldsymbol{r},t)\;,\;\frac{\partial}{\partial t}\,\rho_e(\boldsymbol{r}')\right]\right\rangle_{\rm eq}\;. \tag{53}$$

次に、電荷・電流密度演算子は連続の式を通して関連している：

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho_e(\boldsymbol{r},t)\;+\;\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)\;=\;0\;. \tag{54}$$

この式を用い、(53) を電流-電流相関関数を用いて表す：

$$Q^r_\mu(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \;=\; -\sum_\nu\frac{\partial}{\partial x'_\nu}\,K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)\;, \tag{55}$$

$$K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \;=\; \int_{-\infty}^\infty dt\;e^{i\,(\omega+i\delta)\,t}\;K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t)\;, \tag{56}$$

$$K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t) \;=\; i\,\theta(t)\,\langle\,[\,J_\mu(\boldsymbol{r},t)\,,\,J_\nu(\boldsymbol{r}')\,]\,\rangle_{\rm eq}\;. \tag{57}$$

(55) 式を (52) 式に代入し部分積分すると、表面の項はゼロとなり、(51) を用いて

$$\langle J_\mu(\boldsymbol{r},\omega)\rangle \;=\; \sum_\nu\int d\boldsymbol{r}'\,\sigma_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)\;E_\nu(\boldsymbol{r}',\omega)\;, \tag{58}$$

$$\sigma_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \;=\; \frac{K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)\;-\;K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';0)}{i\,\omega}\;. \tag{59}$$

このように電気伝導度は、電流-電流相関関数によって決定される。また、体積 Ω のマクロな系の伝導度の一様成分は、全電流の相関関数によって決まる：

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) \;=\; \frac{1}{\Omega}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\,\sigma_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega)\;. \tag{60}$$

電流演算子の詳細な形は考える系に依存する。例えば、連続な系で磁場がない場合

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) \;=\; \sum_\sigma\frac{e}{2m\,i}\left[\,\widehat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{\nabla}\widehat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\;-\;\left\{\boldsymbol{\nabla}\widehat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\right\}\widehat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\,\right]\;, \tag{61}$$

$$\rho_e(\boldsymbol{r}) \;=\; \sum_\sigma\,e\;\widehat{\psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{r})\,\widehat{\psi}_\sigma(\boldsymbol{r})\;. \tag{62}$$

9　電気伝導度 part II (Lehmann 表示)

前章で導入された電気伝導度の性質を述べるため、Lehmann 表示を考える。まず、(57) 式の 2 個の電流演算子の間に系の固有状態 $\mathcal{H}|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$ からなる完全系 $|\alpha\rangle$ を挿入する。そうすると Heisenberg 演算子の t 依存性は次のようになる：

$$\langle\alpha|J_\mu(\boldsymbol{r},t)|\alpha'\rangle = e^{i\,(E_\alpha - E_{\alpha'})\,t}\,\langle\alpha|J_\mu(\boldsymbol{r})|\alpha'\rangle\ . \tag{63}$$

この表式を用い、Fourier 変換 (56) を実行すると、(59) 式によって

$$K^r_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \;=\; -\frac{1}{\Xi}\sum_{\alpha\alpha'}\left(\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha} - \mathrm{e}^{-\beta E_{\alpha'}}\right)\frac{\langle\alpha|J_\mu(\boldsymbol{r})|\alpha'\rangle\langle\alpha'|J_\nu(\boldsymbol{r}')|\alpha\rangle}{\omega + E_\alpha - E_{\alpha'} + i\delta}\ , \tag{64}$$

$$\sigma_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\omega) \;=\; -i\,\frac{1}{\Xi}\sum_{\alpha\alpha'}\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha} - \mathrm{e}^{-\beta E_{\alpha'}}}{E_\alpha - E_{\alpha'}}\,\frac{\langle\alpha|J_\mu(\boldsymbol{r})|\alpha'\rangle\langle\alpha'|J_\nu(\boldsymbol{r}')|\alpha\rangle}{\omega + E_\alpha - E_{\alpha'} + i\delta}\ . \tag{65}$$

(65) 式では、$E_\alpha = E_{\alpha'}$ において特異性はない (分子もゼロ) ので、対応する分母では δ はいらない。以下では、Hamiltonian が時間反転対称性を持つ場合を考える。このとき、全ての固有状態 $|\alpha\rangle$ を実数にとることができ、電流演算子は (61) 式の様に純虚数になるので、積 $\langle\alpha|J_\mu(\boldsymbol{r})|\alpha'\rangle\langle\alpha'|J_\nu(\boldsymbol{r}')|\alpha\rangle$ が実数になるよう基底を選べる。したがって、(65) 式の実数部を取り、$\omega \to 0$ とすると直流伝導度は

$$\sigma_{\mu\nu}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';0) = \frac{\pi\beta}{\Xi}\sum_{\alpha\alpha'}\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}\langle\alpha|J_\mu(\boldsymbol{r})|\alpha'\rangle\langle\alpha'|J_\nu(\boldsymbol{r}')|\alpha\rangle\,\delta(E_\alpha - E_{\alpha'})\ . \tag{66}$$

ここで、α と α' に関する和は δ 関数の寄与のため、$E_\alpha = E_{\alpha'}$ の状態間に限られる。次に、連続の式 (54) を、$\mathcal{H}$ の固有状態間の行列要素の関係式として見ると

$$i\,(\,E_{\alpha'} - E_\alpha\,)\,\left\langle\alpha'\left|\rho_e(\boldsymbol{r})\right|\alpha\right\rangle \;+\; \sum_\nu\frac{\partial}{\partial x_\nu}\,\langle\alpha'|J_\nu(\boldsymbol{r})|\alpha\rangle \;=\; 0\ . \tag{67}$$

エネルギーが等しい状態間では、第一項がゼロになる。

特に、1 次元の場合、電流はスカラー量であるため、$E_\alpha = E_{\alpha'}$ の状態間では $(\partial/\partial x)\,\langle\alpha'|J(x)|\alpha\rangle = 0$ となり、電流演算子の行列要素は位置 x に依らなくなる。したがって、1 次元系では $\sigma(x,x';0)$ は $x,\,x'$ に依存しない。一様な静電場 $\mathcal{E}$ が、$0 < x < L$ の有限な領域にかかる場合、(58) 式は電位差 $V_{\mathrm{eX}} = \mathcal{E}L$ を用いて

$$\langle J\rangle \;=\; \sigma(x,x';0)\;V_{\mathrm{ex}}\ . \tag{68}$$

すなわち、コンダクタンスが $g = \sigma(x,x';0)$ で与えられることになる。

10　平衡系の密度行列の摂動展開

熱平衡系の密度演算子 ρ を相互作用 $\mathcal{H}_I$ に関して摂動展開について記す。
ここでは、全 Hamiltonian $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$ は時間に依存しない。
$U(t, t_0)$ に対応した演算子 $\mathcal{U}(\beta)$ を導入する：

$$e^{-\beta\mathcal{H}} \;=\; e^{-\beta\mathcal{H}_0}\,\mathcal{U}(\beta)\;. \tag{69}$$

この式を $\mathcal{U}(\beta) \;=\; e^{\beta\mathcal{H}_0}\,e^{-\beta\mathcal{H}}$ と書き直し、β で微分すると

$$\frac{\partial\mathcal{U}(\beta)}{\partial\beta} \;=\; -\,\mathcal{H}_I(\beta)\mathcal{U}(\beta)\;, \qquad\qquad \mathcal{H}_I(\beta) \;=\; e^{\beta\mathcal{H}_0}\,\mathcal{H}_I\,e^{-\beta\mathcal{H}_0}\;. \tag{70}$$

この式を積分し、$\mathcal{U}(0) = 1$ であることを用い、(29) 式と同様な iteration によって

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\beta) \;&=\; 1 - \int_0^\beta d\tau\,\mathcal{H}_I(\tau)\,\mathcal{U}(\beta) \\
&=\; 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n\,\mathcal{H}_I(\tau_1)\,\mathcal{H}_I(\tau_2)\cdots\mathcal{H}_I(\tau_n) \\
&=\; 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \cdots \int_0^\beta d\tau_n\;T_\tau\Big[\,\mathcal{H}_I(\tau_1)\,\mathcal{H}_I(\tau_2)\cdots\mathcal{H}_I(\tau_n)\Big]\;.
\end{aligned} \tag{71}$$

ここで、T_τ は、$\tau_1,\,\tau_2,\,\ldots,\,\tau_n$ を大きさの順に並べ替える演算子。
これから大分配関数、および期待値は

$$\Xi \;\equiv\; \mathrm{Tr}\,e^{-\beta\,\mathcal{H}} \;=\; \mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\,\mathcal{U}(\beta)\Big] \;=\; \Xi_0\,\langle\,\mathcal{U}(\beta)\,\rangle_0 \;\;, \tag{72}$$

$$\begin{aligned}
\langle\mathcal{O}\rangle \;&\equiv\; \frac{\mathrm{Tr}\Big[e^{-\beta\,\mathcal{H}}\,\mathcal{O}\Big]}{\Xi} \;=\; \frac{\mathrm{Tr}\Big[e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\,\mathcal{U}(\beta)\,\mathcal{O}\Big]}{\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\,\mathcal{U}(\beta)\Big]} \\
&=\; \frac{\langle\,\mathcal{U}(\beta)\,\mathcal{O}\,\rangle_0}{\langle\,\mathcal{U}(\beta)\,\rangle_0}\;\;.
\end{aligned} \tag{73}$$

ただし、$\mathcal{H}_0$ で記述される非摂動系の平均値を $\langle\cdots\rangle_0 \;\equiv\; \mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\;\cdots\Big]\,/\,\Xi_0\,,$
$\Xi_0 \;\equiv\; \mathrm{Tr}\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}$ と記した。摂動展開は、$\mathcal{U}(\beta)$ に (71) 式を用いて得られる。ここまでの結論は、全 Hamiltonian を $\mathcal{H}_0$ と $\mathcal{H}_I$ に分割する分け方に依らず成立する。

11　自由Fermi粒子系の熱平均

非摂動系として作用のない系を選んだ場合に成立するいくつかの性質を述べる：

$$\mathcal{H}_0 \;=\; \sum_k \xi_k\, c_k^\dagger\, c_k\;, \qquad\qquad \xi_k \;=\; \epsilon_k \,-\, \mu\;, \qquad \text{（スピンは無視）}. \tag{74}$$

このとき、相互作用表示の演算子は簡単化される：

$$c_k(\beta) \;\equiv\; e^{\beta\mathcal{H}_0}\, c_k\, e^{-\beta\mathcal{H}_0} \;=\; c_k\, e^{-\beta\xi_k}\;, \tag{75}$$

$$c_k^\dagger(\beta) \;\equiv\; e^{\beta\mathcal{H}_0}\, c_k^\dagger\, e^{-\beta\mathcal{H}_0} \;=\; c_k^\dagger\, e^{\beta\xi_k}\;. \tag{76}$$

導出には、定義式を β に関して微分し、交換関係 $[\,c_k, \mathcal{H}_0\,] = \xi_k\, c_k$ を用いる

$$\frac{\partial c_k(\beta)}{\partial\beta} \;=\; -\,e^{\beta\mathcal{H}_0}\,\Big[\,c_k\,,\,\mathcal{H}_0\,\Big]\,e^{-\beta\mathcal{H}_0} \;=\; -\,\xi_k\, c_k(\beta)\;. \tag{77}$$

これを積分し (75) 式を得る。(76) 式も $[\,c_k^\dagger, \mathcal{H}_0\,] = -\xi_k\, c_k^\dagger$ を用い、同様に得られる。また、$\beta \Rightarrow i\,t$ と 置き換えると実時間の相互作用演算子に対しても、(75)-(76) 式に対応する表式が得られる。

この性質を用いた、自由粒子系の熱平均の計算例を以下に上げる：

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_1}^\dagger c_{k_2}\Big] \;&=\; \mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\,\Big(\,c_{k_1}^\dagger c_{k_2} + c_{k_2} c_{k_1}^\dagger \;-\; c_{k_2} c_{k_1}^\dagger\,\Big)\Big] \\
&=\; \delta_{k_1 k_2}\,\mathrm{Tr}\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0} \;-\; \mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_2} c_{k_1}^\dagger\,\Big] \\
&=\; \delta_{k_1 k_2}\,\mathrm{Tr}\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0} \;-\; \mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\; e^{\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_1}^\dagger\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_2}\,\Big] \\
&=\; \delta_{k_1 k_2}\,\mathrm{Tr}\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0} \;-\; e^{\beta\xi_{k_1}}\,\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\; c_{k_1}^\dagger c_{k_2}\,\Big]\;.
\end{aligned} \tag{78}$$

最後の行では、トレースが巡回置換に不変であること用いた。さらに整理すると

$$\Big\langle c_{k_1}^\dagger c_{k_2}\Big\rangle_0 \;\equiv\; \frac{\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_1}^\dagger c_{k_2}\Big]}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}} \;=\; \delta_{k_1 k_2}\,\frac{1}{e^{\beta\xi_{k_1}} + 1}\;. \tag{79}$$

同様の手順は、高次の相関に対しても使える。左側の演算子を右端までに移動し、トレースの公式で前に回し、(75)-(76) を用いて整理する。もう一例あげる：

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_1}^\dagger c_{k_2} c_{k_3}^\dagger c_{k_4}\Big] \;&=\; \delta_{k_1,k_2}\,\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_3}^\dagger c_{k_4}\Big] \;+\; \delta_{k_1,k_4}\,\mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_2} c_{k_3}^\dagger\Big] \\
&\quad -\; \mathrm{Tr}\Big[\,e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, e^{\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_1}^\dagger\, e^{-\beta\,\mathcal{H}_0}\, c_{k_2} c_{k_3}^\dagger c_{k_4}\Big]\;.
\end{aligned} \tag{80}$$

(79) 式を用いて、整理すると

$$\Big\langle c_{k_1}^\dagger c_{k_2} c_{k_3}^\dagger c_{k_4}\Big\rangle_0 \;=\; \Big\langle c_{k_1}^\dagger c_{k_2}\Big\rangle_0 \Big\langle c_{k_3}^\dagger c_{k_4}\Big\rangle_0 \;+\; \Big\langle c_{k_1}^\dagger c_{k_4}\Big\rangle_0 \Big\langle c_{k_2} c_{k_3}^\dagger\Big\rangle_0\;. \tag{81}$$

この一般論は、Bloch-de Dominicis の定理と呼ばれ、高次の相関が 2 個の演算子の相関 (79) の積に分解され、あらゆる可能なすべて組み合わせの和として表される。これは、Hamiltonian が (74) のように 2 次形式の場合に成立する関係である。

12　遅延・先進 Green 関数

遅延 (retarded)、および先進 (advanced) Green 関数の定義は、

$$G^r(r,r';t) \;=\; -i\,\theta(t)\,\Big\langle\Big\{\psi_\sigma(r,t)\,,\,\psi^\dagger_\sigma(r')\Big\}\Big\rangle\;, \tag{82}$$

$$G^a(r,r';t) \;=\; i\,\theta(-t)\,\Big\langle\Big\{\psi_\sigma(r,t)\,,\,\psi^\dagger_\sigma(r')\Big\}\Big\rangle\;. \tag{83}$$

(82) 式を t で微分すると運動方程式を得る。$d\theta(t)/dt \,=\, \delta(t)$ を用いると

$$\begin{aligned} i\,\frac{\partial}{\partial t}\,G^r(r,r';t) \;&=\; \delta(t)\,\Big\langle\Big\{\psi_\sigma(r)\,,\,\psi^\dagger_\sigma(r')\Big\}\Big\rangle \;+\; \theta(t)\,\Big\langle\Big\{\frac{\partial\psi_\sigma(r,t)}{\partial t}\,,\,\psi^\dagger_\sigma(r')\Big\}\Big\rangle \\ &=\; \delta(t)\,\delta(r-r') \;-i\,\theta(t)\,\Big\langle\Big\{\Big[\,\psi_\sigma(r,t)\,,\,\mathcal{H}\,\Big]\,,\,\psi^\dagger_\sigma(r')\Big\}\Big\rangle\;. \end{aligned} \tag{84}$$

二行目で Heisenberg 方程式を用いた。特に、相互作用がない時は、右辺の第 2 項が Green 関数を用いて書ける。自由 Hamiltonian を (13) の第 1 項のように置くと

$$\mathcal{H}_0 \;=\; \int dr\;\widehat{\psi}^\dagger(r)\Big(\,h(r)\;-\;\mu\,\Big)\,\widehat{\psi}\;(r)\;, \tag{85}$$

$$\Big(\,i\,\frac{\partial}{\partial t}\;-\;h(r)+\mu\,\Big)G^r_0(r,r';t) \;=\; \delta(t)\,\delta(r-r')\;. \tag{86}$$

先進 Green 関数に関しても (86) と同一の式を得る。t に関して Fourier 変換すると：

$$\Big(\,\omega\;-\;h(r)+\mu\,\Big)\,G_0(r,r';\omega) \;=\; \delta(r-r')\;, \tag{87}$$

$$G^r_0(r,r';\omega)=\sum_k\frac{\phi_k(r)\phi^*_k(r')}{\omega-\xi_k+i\delta}\;,\qquad G^a_0(r,r';\omega)=\sum_k\frac{\phi_k(r)\phi^*_k(r')}{\omega-\xi_k-i\delta}\;. \tag{88}$$

遅延・先進 Green 関数の解析性から、極のよけ方 $\pm i\delta$ の符号が決まる。(88) 式で $r=r'$ と置いた時の、虚数部分は局所状態密度になっている：

$$-\,\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G^r_0(r,r;\omega)=\sum_k\,|\phi_k(r)|^2\,\delta(\omega-\xi_k)\;. \tag{89}$$

r について積分すると規格化条件より、$\int dr\,(-1/\pi)\,\mathrm{Im}\,G^r_0(r,r;\omega)=\sum_k\delta(\omega-\xi_k)$。また、実時間では、$i\,G^r_0(r,r';t)=\theta(t)\,\sum_k\phi_k(r)\phi^*_k(r')\,e^{-i\,\xi_k t}$ となり、波動関数の初期値問題における積分核 (Feynman 核) に対応している。

相互作用がある場合、遅延 Green 関数を $\mathcal{H}_I$ に関して摂動展開する手順は

1) 期待値 $\langle\cdots\rangle$ を (73) を用いて書き換え、$\mathcal{U}(\beta)$ を (71) を用いて展開。

2) (82) 中の Heisenberg 演算子 $\psi_\sigma(r,t)$ を (26) 式を用い相互作用表示で表し、時間発展演算子 $U(t,0)$ を (29) を用いて展開。

13 温度 Green 関数

摂動展開には、松原形式 (虚時間形式) の演算子 $\psi_\sigma(r,\tau) = e^{\tau\mathcal{H}}\,\psi_\sigma(r)\,e^{-\tau\mathcal{H}}$ を用いて定義される温度 Green 関数の $\mathcal{G}$ の方が遅延 Green 関数 G^r より便利である：

$$\mathcal{G}(r,r';\tau) \;\equiv\; -\left\langle T_\tau\,\psi_\sigma(r,\tau)\,\psi_\sigma^\dagger(r')\right\rangle\;. \tag{90}$$

Fermi 粒子の場合、反周期性 $\mathcal{G}(\tau+\beta) = -\mathcal{G}(\tau)$ を持つ。Fourier 級数で表すと

$$\mathcal{G}(r,r';i\varepsilon_n) \;=\; \int_0^\beta d\tau\;\mathcal{G}(r,r';\tau)\,e^{i\,\varepsilon_n\tau}\;, \qquad \varepsilon_n \;=\; (2n+1)\pi/\beta\;, \tag{91}$$

$$\mathcal{G}(r,r';\tau) \;=\; \frac{1}{\beta}\sum_{\varepsilon_n}\mathcal{G}(r,r';i\varepsilon_n)\,e^{-i\,\varepsilon_n\tau}\;, \qquad (n=0,\,\pm1,\,\pm2,\,\ldots)\;. \tag{92}$$

自由粒子の場合は (75) 式を用いると、$\psi_\sigma(r,\tau) = \sum_k \phi_k(r)\,c_{k\sigma}\,e^{-\xi_k\tau}$ と演算子の τ 依存性が陽に求まる。(91) の積分を実行し、(88) に対応する温度 Green 関数を得る

$$\mathcal{G}_0(r,r';i\varepsilon) \;=\; \sum_k \frac{\phi_k(r)\phi_k^*(r')}{i\varepsilon_n-\xi_k}\;. \tag{93}$$

温度 Green 関数に対しては Wick 定理が成立し、Feynman diagram を用いることができる。そして、$\varepsilon_n > 0$ の領域で解析接続 $i\varepsilon_n \to \omega + i\delta$ を行うことにより、温度 Green 関数 $\mathcal{G}(i\varepsilon_n)$ から遅延 Green 関数 $G^r(\omega)$ を求めることができる。解析性を通した $G^r(\omega)$ と $\mathcal{G}(i\varepsilon_n)$ の関係の詳細は、Lehmann 表示を比較すれば分かる。

同様に、電流-電流相関関数の摂動展開においても、(57) 式で定義された遅延関数 $K^r_{\mu\nu}(r,r';t)$ より、対応する虚時間形式の相関関数の方が便利である：

$$\mathcal{K}_{\mu\nu}(r,r';\tau) \;\equiv\; \left\langle T_\tau\,J_\mu(r,\tau)\,J_\nu(r')\right\rangle \;=\; \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\mathcal{K}_{\mu\nu}(r,r';i\omega_n)\,e^{-i\,\omega_n\tau}\;. \tag{94}$$

ここで、$J_\mu(r,\tau) = e^{\tau\mathcal{H}}\,J_\mu(r)\,e^{-\tau\mathcal{H}}$ 。Bose 型の相関関数は周期性 $\mathcal{K}(\tau+\beta) = \mathcal{K}(\tau)$ を持つため、$\omega_n = 2\pi n/\beta$ である。この場合も、$\omega_n > 0$ の領域で解析接続 $i\omega_n \to \omega + i\delta$ を行うことにより、$\mathcal{K}(i\omega_n)$ から $K^r(\omega)$ を求めることができる。

14　電気伝導度 part III (相互作用のない場合)

電流演算子の詳細な形は考える系に依存し、例えば (61) のような場合もある。いずれにせよ電流演算子は 2 次形式、すなわち 1 組の生成・消滅演算子により表されるので、一般に次のように書ける：

$$J_\mu(r) \;=\; \sum_\sigma \sum_{k'k} \langle k'|j_\mu(r)|k\rangle \; c^\dagger_{k'\sigma} c_{k\sigma} \; . \tag{95}$$

ここで、$\langle k'|j_\mu(r)|k\rangle$ は 1 粒子状態間の行列要素である。例えば、(61) の場合には次のように書ける

$$\langle k'|j_\mu(r)|k\rangle \;=\; \frac{e}{2m\,i}\left[\phi^*_{k'}(r)\,\frac{\partial\phi_k(r)}{\partial x_\mu} \;-\; \frac{\partial\phi^*_{k'}(r)}{\partial x_\mu}\,\phi_k(r)\right] . \tag{96}$$

$$\;=\; \frac{e}{2m\,i}\,\lim_{r'\to r}\Big[\,(\partial/\partial x_\mu) \;-\; (\partial/\partial x'_\mu)\,\Big]\,\phi^*_{k'}(r')\phi_k(r) \; . \tag{97}$$

二行目は、微分を実行した後で $r' \to r$ と置くことを意味する。

以下では、相互作用のない系の電気伝導度を久保公式 (57)–(59) に基づき調べる。自由粒子の場合は、(75) 式で示した性質が実時間に対しても成立する：

$$c_k(t) \;\equiv\; e^{i\mathcal{H}_0 t}\, c_{k\sigma}\, e^{-i\mathcal{H}_0 t} \;=\; c_{k\sigma}\, e^{-i\,\xi_k t} \; , \tag{98}$$

$$c^\dagger_k(t) \;\equiv\; e^{i\mathcal{H}_0 t}\, c^\dagger_{k\sigma}\, e^{-i\mathcal{H}_0 t} \;=\; c^\dagger_{k\sigma}\, e^{i\,\xi_k t} \; . \tag{99}$$

(95)–(99) 式を用いると、(57) 式は自由粒子に対しては次のよう表される：

$$K^{r(0)}_{\mu\nu}(r,r';t) \;=\; i\,\theta(t) \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{k_1k_2} \sum_{k_3k_4} \langle k_1|j_\mu(r)|k_2\rangle\, \langle k_3|j_\nu(r')|k_4\rangle \; e^{i\,(\xi_{k_1}-\xi_{k_2})\,t}$$
$$\times \left\langle \Big[\, c^\dagger_{k_1\sigma} c_{k_2\sigma} \,,\; c^\dagger_{k_3\sigma'} c_{k_4\sigma'} \,\Big] \right\rangle_0 . \tag{100}$$

2 行目の熱平均は、(81) 式を用いると、Fermi 関数 $f(\epsilon) = [e^{\beta\epsilon}+1]^{-1}$ で書ける

$$\left\langle \Big[\, c^\dagger_{k_1\sigma} c_{k_2\sigma} \,,\; c^\dagger_{k_3\sigma'} c_{k_4\sigma'} \,\Big] \right\rangle_0 \;=\; \Big[\, f(\xi_{k_1}) \;-\; f(\xi_{k_2}) \,\Big]\, \delta_{k_1k_4}\, \delta_{k_2k_3}\, \delta_{\sigma\sigma'} \; . \tag{101}$$

これらの表式を用い、Fourier 変換 (56) を実行する。そして、(59) 式から

$$\sigma^0_{\mu\nu}(r,r';\omega) \;=\; -i \sum_\sigma \sum_{k_1k_2} \frac{f(\xi_{k_1}) - f(\xi_{k_2})}{\xi_{k_1} - \xi_{k_2}}\; \frac{\langle k_1|j_\mu(r)|k_2\rangle\, \langle k_2|j_\nu(r')|k_1\rangle}{\omega + \xi_{k_1} - \xi_{k_2} + i\delta} \; . \tag{102}$$

この式は、一見、(65) 式で与えた Lehmann 表示に似ているが、意味は全く異なる点に注意。(65) 式の α, α' の和は全ての多粒子固有状態で行うが、(102) 式の k_1, k_2 の和は 1 粒子の軌道関数に関するものである。以下、議論を時間反転対称性がある場合に限ると、このときは軌道関数 $\phi_k(r)$ にとることができ、電流演算子は (96) 式の様に純虚数になるので、積 $\langle k_1|j_\mu(r)|k_2\rangle\, \langle k_2|j_\nu(r')|k_1\rangle$ を全て実数に取ることがで

きる。(102) 式の実数部分に対し、$\omega \to 0$ の極限をとり、恒等式 $\int d\epsilon\, \delta(\epsilon - \xi_{k_1}) = 1$ を用い整理すると

$$\sigma^0(r,r';0) \;\equiv\; \frac{1}{d}\sum_{\nu=1}^{d} \sigma^0_{\nu\nu}(r,r';0) \;=\; \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon}\right) C(r,r';\epsilon)\;, \tag{103}$$

$$C(r,r';\epsilon) \;=\; \frac{\pi}{d}\sum_{\nu=1}^{d}\sum_{\sigma}\sum_{k_1k_2} \langle k_1|j_\nu(r)|k_2\rangle \langle k_2|j_\nu(r')|k_1\rangle\, \delta(\epsilon-\xi_{k_1})\,\delta(\epsilon-\xi_{k_2})\;. \tag{104}$$

空間の次元を d としテンソルの対角項を平均した。次に δ 関数を以下のように書き換え、$C(r,r';\epsilon)$ を (88) 式の遅延・先進 Green 関数で表す：

$$\delta(\epsilon-\xi_k) \;=\; \frac{-1}{2\pi i}\left(\frac{1}{\epsilon-\xi_k+i\delta} - \frac{1}{\epsilon-\xi_k-i\delta}\right)\;. \tag{105}$$

行列要素 $\langle k'|j_\nu(r)|k\rangle$ に (97) を用いると

$$\begin{aligned} C(r,r';\epsilon) \;&=\; -\frac{2\pi}{d}\left(\frac{e}{2m}\right)^2 \sum_{\nu=1}^{d} \lim_{\substack{r''\to r\\ r'''\to r'}} \left[\,(\partial/\partial x_\nu) - (\partial/\partial x''_\nu)\,\right]\left[\,(\partial/\partial x'_\nu) - (\partial/\partial x'''_\nu)\,\right] \\ &\qquad \times \sum_{k_1k_2} \phi^*_{k_1}(r'')\phi_{k_2}(r)\phi^*_{k_2}(r''')\phi_{k_1}(r')\delta(\epsilon-\xi_{k_1})\,\delta(\epsilon-\xi_{k_2})\;. \\ &=\; \frac{1}{2\pi d}\left(\frac{e}{2m}\right)^2 \sum_{\nu=1}^{d} \lim_{\substack{r''\to r\\ r'''\to r'}} \left[\,(\partial/\partial x_\nu) - (\partial/\partial x''_\nu)\,\right]\left[\,(\partial/\partial x'_\nu) - (\partial/\partial x'''_\nu)\,\right] \\ &\qquad \times \left[\,G^r_0(r',r'';\epsilon) - G^a_0(r',r'';\epsilon)\,\right]\left[\,G^r_0(r,r''';\epsilon) - G^a_0(r,r''';\epsilon)\,\right]\;. \end{aligned} \tag{106}$$

特に、1 次元系では (68) 式で議論したように $\sigma(x,x';0)$ の値が、$x,\, x'$ に依存しない。また、次章で述べるように、相互作用がなく、ポテンシャルの散乱が $V(x)$ が $0 < x < L$ に限られる場合には、Green 関数が (118)–(125) の性質を持つ。この漸近系を用いると以下に述べるように、(106) 式の位置に関する微分が簡単に実行できる。時間反転対称性がある場合は、$G(x,x';\epsilon) = G(x',x;\epsilon)$ という性質を遅延・先進 Green 関数の両方が持つため、$G^r(x,x';\epsilon) = \{G^a(x,x';\epsilon)\}^*$ が $x \neq x'$ の場合にも成立する。例えば、(106) において、$x > L,\, x'' > L,\, x' < 0,\, x''' < 0$ とおいて (121) 式を用い、微分を実行し整理すると

$$C(x,x';\epsilon) \;=\; \frac{e^2}{\pi\hbar}\left|\widetilde{t}(\epsilon+\mu)\right|^2 \;=\; \frac{2e^2}{h}\left|\widetilde{t}(\epsilon+\mu)\right|^2\;. \tag{107}$$

ここで、今まで 1 と置いていた $\hbar$ を復活させた。結果として (103) 式が Landaur の公式と同型に表される。ここで現れた $\widetilde{t}(\epsilon+\mu)$ は透過係数であり、次章で Green 関数との関係を述べる。なお、エネルギーを $\omega = \epsilon + \mu$ としたのは、便宜上、次章では ω の原点をバンドの底にとったことと、$\epsilon = 0$ を Fermi エネルギーとする定義との consistency のためである。

15　透過係数と Green 関数

相互作用のない 1 次元を例として、透過係数と Green 関数の関係を考える：

$$H \;=\; H_0 + V(x)\,, \qquad\qquad H_0 \;=\; -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,. \tag{108}$$

$V(x)$ はポテンシャル散乱。前章の G_0^r は、相互作用なないが不純物散乱を含んだ Green 関数なので、この章の g^r に対応する。また、この章では化学ポテンシャル μ をいれず、エネルギーは状態密度の底から測ることにする。

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：

$$[\,\omega \,-\, H\,]\,\phi_\omega(x) \;=\; 0\,, \qquad\qquad [\,\omega \,-\, H_0\,]\,\phi_\omega^{(0)}(x) \;=\; 0\,. \tag{109}$$

(109) から Lippmann-Schwinger 方程式が導かれる：

$$\phi_\omega(x) \;=\; \phi_\omega^{(0)}(x) \;+\; \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, g_0^r(x,x';\omega)\, V(x')\, \phi_\omega(x')\,. \tag{110}$$

ここで、H_0 および H に対応する遅延 Green 関数は、次の運動方程式を満たす：

$$[\,\omega \,-\, H_0\,]\, g_0^r(x,x';\omega) \;=\; \delta(x-x')\,, \tag{111}$$

$$[\,\omega \,-\, H\,]\, g^r(x,x';\omega) \;=\; \delta(x-x')\,. \tag{112}$$

(112)–(111) から、Dyson 方程式が導かれる：

$$g^r(x,x';\omega) \;=\; g_0^r(x,x';\omega) \;+\; \int_{-\infty}^{\infty} dx''\, g_0^r(x,x'';\omega)\, V(x'')\, g^r(x'',x';\omega)\,. \tag{113}$$

Lippmann-Schwinger 方程式、Dyson 方程式は T 行列を用いると次のように書ける

$$\phi_\omega(x) \;=\; \phi_\omega^{(0)}(x) \;+\; \int_{-\infty}^{\infty}\!\!\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2\, g_0^r(x,x_1;\omega)\, T(x_1,x_2;\omega)\, \phi_\omega^{(0)}(x_2)\,, \tag{114}$$

$$\begin{aligned} g^r(x,x';\omega) \;&=\; g_0^r(x,x';\omega) \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty}\!\!\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2\, g_0^r(x,x_1;\omega)\, T(x_1,x_2;\omega)\, g_0^r(x_2,x';\omega)\,, \end{aligned} \tag{115}$$

$$T(x,x';\omega) \;=\; V(x)\,\delta(x-x') \;+\int_{-\infty}^{\infty} dx''\, V(x)\, g_0^r(x,x'';\omega)\, T(x'',x';\omega)\,. \tag{116}$$

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：

$$\begin{aligned} g_0^r(x,x';\omega) \;&=\; \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi}\, \frac{e^{ip\,(x-x')}}{\omega - \frac{p^2}{2m} + i0^+} \\ &=\; \begin{cases} -i\, e^{ik|x-x'|}\,/\,v & , \quad \omega > 0 \\ -\, e^{-\kappa|x-x'|}\,/\,\nu & , \quad \omega < 0 \end{cases}\,. \end{aligned} \tag{117}$$

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、(115), (114) に (117) を代入すると；

$$\phi_\omega(x) \;=\; e^{ikx} \;-\; \frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\, e^{ik|x-x_1|}\, T(x_1,x_2;\,\omega)\, e^{ikx_2}\ , \tag{118}$$

$$g^r(x,x';\,\omega) \;=\; -\frac{i}{v}\left[e^{ik|x-x'|} \;-\; \frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\, e^{ik|x-x_1|}\, T(x_1,x_2;\,\omega)\, e^{ik|x_2-x'|}\right]. \tag{119}$$

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

$$\phi_\omega(x) \;=\; \widetilde{t}(\omega)\; e^{ikx}\ , \tag{120}$$

$$g^r(x,x';\,\omega) \;=\; -\frac{i}{v}\;\widetilde{t}(\omega)\; e^{ik(x-x')}\ , \tag{121}$$

$$\widetilde{t}(\omega) \;=\; 1-\frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\, e^{-ikx_1}\, T(x_1,x_2;\,\omega)\, e^{ikx_2}\ . \tag{122}$$

- <u>$x'<x<0$ の場合</u> から、反射波の情報が得られる；

$$\phi_\omega(x) \;=\; e^{ikx} \;+\; \widetilde{r}(\omega)\; e^{-ikx}\ , \tag{123}$$

$$g^r(x,x';\,\omega) \;=\; -\frac{i}{v}\left[e^{ikx} \;+\; \widetilde{r}(\omega)\; e^{-ikx}\right] e^{-ikx'}\ , \tag{124}$$

$$\widetilde{r}(\omega) \;=\; -\frac{i}{v}\int_0^L\!\!\int_0^L dx_1dx_2\, e^{ikx_1}\, T(x_1,x_2;\,\omega)\, e^{ikx_2}\ . \tag{125}$$

ここで (121) 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：

$$\widetilde{t}(\omega) \;=\; i\,v\, e^{-ik(x-x')}\; g^r(x,x';\,\omega)\ , \qquad x>L\ ,\quad x'<0\ . \tag{126}$$

16　不純物散乱 I (束縛状態・共鳴状態・位相のずれ)

ここでは相互作用のない系における、不純物散乱の例を考える。Hamiltonian $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$ は、

$$\mathcal{H}_0 \;=\; \sum_k \epsilon_k \, c_k^\dagger c_k \;, \qquad\qquad V \;=\; \sum_{k'k} V_{k'k} \, c_{k'}^\dagger c_k \tag{127}$$

波数空間の遅延 Green 関数に関して、運動方程式は次のように得られる：

$$G^r_{kk'}(t) \;=\; -i\,\theta(t)\,\left\langle \left\{ c_k(t)\,,\, c_{k'}^\dagger \right\} \right\rangle \;, \tag{128}$$

$$\left(i\,\frac{\partial}{\partial t} \,-\, \epsilon_k \right) G^r_{kk'}(t) \;=\; \delta(t)\,\delta_{kk'} \;+\; \sum_{k_1} V_{kk_1}\, G^r_{k_1k'}(t) \;. \tag{129}$$

Fourier 変換し、$\mathcal{H}_0$ に対応する Green 関数 $G^{0r}_k(\omega) = [\,\omega - \epsilon_k + i\delta\,]^{-1}$ を用いると

$$G^r_{kk'}(\omega) \;=\; G^{0r}_k(\omega)\,\delta_{kk'} \;+\; G^{0r}_k(\omega) \sum_{k_1} V_{kk_1} G^r_{k_1k'}(\omega) \;. \tag{130}$$

この式は象徴的には $\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0 \widehat{V} \widehat{G}$ という構造をしている。 T 行列を用いると

$$G^r_{kk'}(\omega) \;=\; G^{0r}_k(\omega)\,\delta_{kk'} \;+\; G^{0r}_k(\omega)\,T_{kk'}(\omega)\,G^{0r}_{k'}(\omega) \;, \tag{131}$$

$$T_{kk'}(\omega) \;=\; V_{kk'} \;+\; \sum_{k_1} V_{kk_1}\, G^{0r}_{k_1}(\omega)\; T_{k_1k'}(\omega) \;\; . \tag{132}$$

以下では、特に s 波散乱体を例として考える。この場合、$V_{kk'}$ は波数 k,k' に依存せず、実空間では δ 関数ポテンシャル $V(r) = v\,\delta(r)$ に対応する。

$$V_{kk'} = \frac{1}{N} \int dr\, e^{ikr}\, V(r)\, e^{-ik'r} \;\Rightarrow\; \frac{v}{N} \;, \qquad N\text{：全サイト数 or 全系の体積} \;. \tag{133}$$

(132) 式を $\widehat{T} \;=\; \widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \cdots$ と展開し、(133) を代入すると

$$T(\omega) \;=\; \frac{v}{N}\left[1 \,+\, \left\{ v\,\overline{G^r_0}(\omega) \right\} \,+\, \left\{ v\,\overline{G^r_0}(\omega) \right\}^2 \,+\, \cdots \right] \;=\; \frac{v}{N}\,\frac{1}{1 \,-\, v\,\overline{G^r_0}(\omega)} \;, \tag{134}$$

$$\overline{G^r_0}(\omega) \;=\; \frac{1}{N}\sum_k G^{0r}_k(\omega) \;=\; \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\delta} \;. \tag{135}$$

ここで、$\overline{G^r_0}(\omega)$ は、非摂動系の実空間における局所 Green 関数に対応している。s 波散乱の場合、$T_{kk'}$ は波数に依存しないので、(134) 式の左辺では k,k' を略した。

$$\overline{G^r_0}(\omega) \;=\; \int d\epsilon\, \frac{\rho(\epsilon)}{\omega - \epsilon + i\delta} \;, \qquad\qquad \rho(\epsilon) \;=\; \frac{1}{N}\sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k) \;. \tag{136}$$

散乱行列の分母を実部と虚部に分け、さらに絶対値と位相で記述すると

$$T(\omega) \;=\; \frac{v}{N}\,\frac{1}{\left[1 - v\mathrm{P}\displaystyle\int d\epsilon\,\frac{\rho(\epsilon)}{\omega-\epsilon}\right] \;+\; i\,\pi v\rho(\omega)} \;=\; \frac{v}{N}\,\frac{e^{i\,\delta(\omega)}}{\left|1\;-\;v\,\overline{G_0^r}(\omega)\right|}\;, \tag{137}$$

$$\cos\delta(\omega) \;=\; \frac{1 - v\mathrm{P}\displaystyle\int d\epsilon\,\frac{\rho(\epsilon)}{\omega-\epsilon}}{\left|1\;-\;v\,\overline{G_0^r}(\omega)\right|}\;, \qquad \sin\delta(\omega) \;=\; \frac{-\pi v\rho(\omega)}{\left|1\;-\;v\,\overline{G_0^r}(\omega)\right|}\;. \tag{138}$$

ここで、P は主値積分を表す。ω が伝導体のバンド内に相当する領域では、状態密度 $\rho(\omega)$ が有限であため、phase shift $\delta(\omega)$ は ω の関数として大体は連続的に変化する。バンド内のあるエネルギー ω_{res} で実部が $[1 - v\,\mathrm{Re}\,\overline{G_0^r}(\omega_{\mathrm{res}})] = 0$ となることがあれば、それは共鳴状態に対応し、そこで T 行列は純虚数の unitary 極限値 $T(\omega_{\mathrm{res}}) = -i\,/\,\{N\pi\rho(\omega_{\mathrm{res}})\}$ を持ち、$\delta(\omega_{\mathrm{res}}) = \pi/2$ となる。一方、バンド外のエネルギー ω_0 で実部がゼロになる場合は、束縛状態に対応する

$$1 - v\mathrm{P}\int d\epsilon\,\frac{\rho(\epsilon)}{\omega_0-\epsilon} \;=\; 0\;. \tag{139}$$

バンド外で虚部はないので、$T(\omega)$ は $\omega = \omega_0$ に極を持つ。例えば、引力 $v < 0$ の場合、実部は $\omega = \omega_0$ を境に正から負に変わる。したがって、$\delta(\omega)$ は $\omega = \omega_0$ の前後で、0 から π に飛ぶ。

17　不純物散乱 II (多数の散乱体による多重散乱)

簡単な例として、L 個の δ 関数型ポテンシャルがある 1 次元系を考える。以下では、転送行列を用いた解法の概略を述べる。Schrödinger 方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) \;+\; \sum_{n=1}^{L} v_n\,\delta(x-x_n)\,\phi(x) \;=\; \epsilon\,\phi(x)\,. \tag{140}$$

波動関数を各区間 $x_n < x < x_{n+1}$ で、$\phi(x) = A_n e^{ikx} \,+\, B_n\, e^{-ikx}$ と置く。ただし、$k = \sqrt{2m\epsilon/\hbar^2}$。$x < 0$、$x_L < x$ の領域の係数も同様に、A_0,B_0、A_L,B_L と置く。$x = x_n$ における波動関数の連続性 $= \phi(x_n + 0^+) = \phi(x_n - 0^+)$ から、

$$A_n\, e^{ikx_n} \,+\, B_n\, e^{-ikx_n} \;=\; A_{n-1}\, e^{ikx_n} \,+\, B_{n-1}\, e^{-ikx_n}\,. \tag{141}$$

微分係数の条件は、(140) 式を x_n を含む微小区間で積分すると、

$$\left.\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x\to x_n+0^+} - \left.\frac{d\phi(x)}{dx}\right|_{x\to x_n-0^+} = \frac{2m\,v_n}{\hbar^2}\,\phi(x_n)\,. \tag{142}$$

この式に $x = x_n$ の両側からの微分係数を代入し整理すると、

$$ikA_n\, e^{ikx_n} \,-\, ikB_n\, e^{-ikx_n} \;=\; (ik+\alpha_n)\, A_{n-1}\, e^{ikx_n} \,-\, (ik-\alpha_n)\, B_{n-1}\, e^{-ikx_n}. \tag{143}$$

ここで、$\alpha_n = 2m\,v_n/\hbar^2$。(141) と (143) 式から、係数 A_{n-1},B_{n-1}、A_n,B_n を関係づける 2×2 行列の転送行列 $\widehat{T}_n$ が得られる：

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \;=\; \widehat{T}_n \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix}, \qquad \widehat{T}_n = \frac{1}{2k}\begin{bmatrix} 2k - i\alpha_n & -i\alpha_n\, e^{-i2kx_n} \\ i\alpha_n\, e^{i2kx_n} & 2k + i\alpha_n \end{bmatrix}. \tag{144}$$

入射波と透過波、反射波の関係はすべての行列の積から得られる。

$$\begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} \;=\; \widehat{T}_L \begin{pmatrix} A_{L-1} \\ B_{L-1} \end{pmatrix} \;=\; \widehat{T}_L\, \widehat{T}_{L-1} \begin{pmatrix} A_{L-2} \\ B_{L-2} \end{pmatrix} \;=\; \cdots \tag{145}$$

$$=\; \widehat{T}_L\, \widehat{T}_{L-1}\, \cdots\, \widehat{T}_1 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}. \tag{146}$$

ここで $\det \widehat{T}_n = 1$ であることから、転送行列の積も行列式が 1 になる性質を持つ。この行列積の表式は数値計算にもしばしば用いられる。例えば、v_n を一定にし、x_n を等間隔にし、個数 L を大きくすると、(140) は周期ポテンシャルに近づく。また、v_n、x_n を無秩序に選ぶと、random 系の模型として用いられる。random な系では、個数 L を大きくすると、コンダクタンスは、$g \propto e^{-L/\xi}$ というふうに、指数関数的に減少する。ここで、ξ は局在長と呼ばれる。電子波の伝播が不純物散乱による影響を受け、定在し、絶縁体になる現象は **Anderson 局在**として知られている。空間の次元、外部磁場、スピン-軌道相互作用の有無などの状況の違いによって、多彩な振る舞いを示すことが分かっている。

18 Anderson Model

Anderson Model は、次の Hamiltonian で定義される：

$$\mathcal{H} \;=\; \mathcal{H}_d \;+\; \mathcal{H}_{\rm cond} \;+\; \mathcal{H}_{\rm mix}\;, \tag{147}$$

$$\mathcal{H}_d \;=\; \sum_\sigma E_d\, d_\sigma^\dagger d_\sigma \;+\; U\, n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}\;, \qquad \mathcal{H}_{\rm cond} \;=\; \sum_{k\sigma} \epsilon_k\, c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}\;, \tag{148}$$

$$\mathcal{H}_{\rm mix} \;=\; \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\sigma} \Big(V_k\, d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \;+\; V_k^* c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma \Big)\;. \tag{149}$$

ここで、$n_{d\sigma} \equiv d_\sigma^\dagger d_\sigma$ は、スピン σ の d 電子数。E_d は不純物の d 電子のエネルギー準位。U は d 電子間の Coulomb 斥力。$\mathcal{H}_{\rm cond}$ は伝導電子のエネルギー。$\mathcal{H}_{\rm mix}$ は d 電子と伝導電子の混成。伝導電子の 1 粒子状態を Unitary 変換し基底を取り直すことにより、$\mathcal{H}_{\rm mix}$ と $\mathcal{H}_{\rm cond}$ を次のように書き換えることができる：

$$\mathcal{H}_{\rm mix} \;=\; \sum_\sigma v \Big(d_\sigma^\dagger a_{1\sigma} \;+\; a_{1\sigma}^\dagger d_\sigma \Big)\;, \tag{150}$$

$$\mathcal{H}_{\rm cond} \;=\; \sum_\sigma \left[\sum_{n=1}^{N} \epsilon_n\, a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} \;+\; \sum_{n=1}^{N-1} v_n \Big(a_{n\sigma}^\dagger a_{n+1\sigma} \;+\; a_{n+1\sigma}^\dagger a_{n\sigma} \Big) \right]\;, \tag{151}$$

$$v\, a_{1\sigma}^\dagger \;=\; \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k V_k^* c_{k\sigma}^\dagger\;, \qquad v^2 \;=\; \frac{1}{N} \sum_k |V_k|^2\;. \tag{152}$$

Unitary 変換 $a_{n\sigma} \;=\; \sum_k u_k(n)\, c_{n\sigma}$ は反交換関係 $\Big\{ a_{n\sigma}\,,\, a_{n'\sigma'}^\dagger \Big\} \;=\; \delta_{nn'}\, \delta_{\sigma\sigma'}$ を保存する。(152) の v の表式は、d 電子と混成する軌道 $a_1^\dagger$ の規格化条件から決められた。新しい基底は $\mathcal{H}_{\rm cond}$ を対角化する表現ではないが、(151) 式のような三重対角化は一般的に可能であり、伝導電子の空間の次元によらず $\mathcal{H}_{\rm cond}$ を最近接サイト間の hopping を持つ 1 次元格子模型に mapping することができる。ϵ_n、v_n、および $u_k(n)$ は、次のように決定される。まず、(151) の $\mathcal{H}_{\rm cond}$ を $n = 1$ の軌道に作用すると、

$$\mathcal{H}_{\rm cond}\, |1\rangle \;=\; \epsilon_1 |1\rangle \;+\; v_1 |2\rangle\;, \qquad |n\rangle = a_n^\dagger\, |{\rm vac}\rangle\;. \tag{153}$$

ただし、スピンの添え字は略した。直交性 $\langle n'|n\rangle \;=\; \delta_{n'n}$、および (149), (152) 式を用いると利用すると、

$$\epsilon_1 \;=\; \langle 1|\, \mathcal{H}_{\rm cond}\, |1\rangle \;=\; \frac{1}{v^2 N} \sum_k \epsilon_k |V_k|^2\;, \tag{154}$$

$$v_1 a_2^\dagger\, |{\rm vac}\rangle \;=\; \mathcal{H}_{\rm cond}\, |1\rangle \;-\; \epsilon_1 |1\rangle \;=\; \frac{1}{v\sqrt{N}} \sum_k (\epsilon_k - \epsilon_1)\, V_k^* c_k^\dagger\, |{\rm vac}\rangle\;, \tag{155}$$

$$v_1^2 \;=\; \frac{1}{v^2 N} \sum_k (\epsilon_k - \epsilon_1)^2\, |V_k|^2\;. \tag{156}$$

同様に $\mathcal{H}_{\rm cond}\, |2\rangle$ から ϵ_2, v_2, $u_k(3)$ が求まり、残りの係数も順次決定される。

19 Tomonaga-Luttinger Model

ここでは相互作用する1次元電子系の例として、spin less の Tomonaga-Luttinger model について述べる。まず、Hamlitonian を一般的に書くと

$$H_0 \,-\, \langle H_0 \rangle_0 \;=\; \sum_k \left(\epsilon_k \,-\, \mu\right) \left[\, c_k^\dagger c_k \,-\, \langle c_k^\dagger c_k \rangle_0 \,\right] \,, \tag{157}$$

$$H_I \;=\; \frac{1}{2L} \sum_{qkk'} V_q \, c_{k+q}^\dagger \, c_{k'-q}^\dagger \, c_{k'} \, c_k \,. \tag{158}$$

(157) は、運動エネルギーから、相互作用がない場合の基底エネルギーに相当する定数を引いた表式である。低エネルギーでは、Fermi energy 付近の励起が重要である。Fermi 波数 $k = \pm k_F$ 付近で、ϵ_k を線形化すると、

$$\mathcal{H}_0 \;=\; \sum_k v_F(k - k_F) \left[\, a_k^\dagger a_k - \langle a_k^\dagger a_k \rangle_0 \,\right] \,+\, \sum_k v_F(-k - k_F) \left[\, b_k^\dagger b_k - \langle b_k^\dagger b_k \rangle_0 \,\right] . \tag{159}$$

ここで $a_k(b_k)$ は、正 (負) の方向に進む粒子の演算子である。(159) の k の和は、バンドの上下端のあたりで打ち切るべきだが、低エネルギーの性質は実質的に Fermi energy 近傍の励起で決められるので、$-\infty < k < +\infty$ としても問題はなく、その方が理論の取り扱いが便利なこともある。(158) 式では、相互作用に関与す粒子が Fermi energy の近くである項の寄与、つまり $k+q \simeq \pm k_F$, $k'-q \simeq \pm k_F$, $k' \simeq \pm k_F$, $k \simeq \pm k_F$, となる散乱が重要なる：

$$H_I \simeq \frac{1}{2L} \left(\sum_{q \simeq 0} V_q + \sum_{q \simeq \pm 2k_F} V_q \right) \left(\sum_{k \simeq k_F} + \sum_{k \simeq -k_F} \right) \left(\sum_{k' \simeq k_F} + \sum_{k' \simeq -k_F} \right) c_{k+q}^\dagger \, c_{k'-q}^\dagger \, c_{k'} \, c_k \,. \tag{160}$$

$q \simeq 0$ の場合には、k と k' の粒子の進行方向が同じ場合と異なる場合がある。また、$q \simeq \pm 2k_F$ の場合は、$-k_F$ 付近の粒子が k_F 付近へ、k_F 付近の粒子が $-k_F$ 付近へ散乱される (後方散乱)：

$$H_I \;\Rightarrow\; \mathcal{H}_4 \;+\; \mathcal{H}_2 \;+\; \mathcal{H}_1 \,, \tag{161}$$

$$\mathcal{H}_4 \;=\; \frac{g_4}{2L} \sum_{qkk'} a_{k+q}^\dagger \, a_{k'-q}^\dagger \, a_{k'} \, a_k \;+\; \frac{g_4}{2L} \sum_{qkk'} b_{k+q}^\dagger \, b_{k'-q}^\dagger \, b_{k'} \, b_k \,, \tag{162}$$

$$\mathcal{H}_2 \;=\; \frac{g_2}{2L} \sum_{qkk'} a_{k+q}^\dagger \, b_{k'-q}^\dagger \, b_{k'} \, a_k \;+\; \frac{g_2}{2L} \sum_{qkk'} b_{k+q}^\dagger \, a_{k'-q}^\dagger \, a_{k'} \, b_k \,, \tag{163}$$

$$\mathcal{H}_1 \;=\; \frac{g_1}{2L} \sum_{q'kk'} b_{k+q'-2k_F}^\dagger \, a_{k'-q+2k_F}^\dagger \, b_{k'} \, a_k \;+\; \frac{g_1}{2L} \sum_{q'kk'} a_{k+q'+2k_F}^\dagger \, b_{k'-q'-2k_F}^\dagger \, a_{k'} \, b_k \,. \tag{164}$$

上式中 (164) では、$q = q' \pm 2k_F$ とおいた。Tomonaga-Luttinger model では、相互作用として後方散乱 $\mathcal{H}_1$ を無視し、$\mathcal{H}_2$ と $\mathcal{H}_4$ を取り入れる。(162)-(163) 式は、正負の方向に進む粒子の電荷密度の Fourier 成分 $\rho_1(p)$, $\rho_2(p)$ を用いて表すことができる：

$$\rho_1(p) \;=\; \sum_k \Big[\, a^\dagger_{k-p}\, a_k \;-\; \delta_{p,0}\, \langle a^\dagger_k a_k \rangle_0 \,\Big] \;, \tag{165}$$

$$\rho_2(p) \;=\; \sum_k \Big[\, b^\dagger_{k-p}\, b_k \;-\; \delta_{p,0}\, \langle b^\dagger_k b_k \rangle_0 \,\Big] \;. \tag{166}$$

ここで、第 2 項は電荷密度の一様成分の平均値である。(159) 式において、a_k, b_k のそれぞれの波数を $-\infty < k < +\infty$ としたことにより、負のエネルギー状態の粒子が無限個存在している。このことに起因する無限大の量が現れないよう、真空からの揺らぎを曖昧さなく定義するために、この第 2 項のような引き算が必要になる。この目的のため、正規積 (normal product) による記述を用いることもある。(163),(162) は、定数項をあるいは化学ポテンシャル (k_F) の変化に対応する項をのぞき、次のように書ける。

$$\mathcal{H}_4 \;=\; \frac{g_4}{L} \sum_{p>0} \rho_1(-p)\, \rho_1(p) \;+\; \frac{g_4}{L} \sum_{p>0} \rho_2(-p)\, \rho_2(p) \;+\; \frac{g_4}{2L} \Big[\{\rho_1(0)\}^2 + \{\rho_2(0)\}^2 \Big] \;, \tag{167}$$

$$\mathcal{H}_2 \;=\; \frac{g_2}{L} \sum_{p>0} \rho_1(-p)\, \rho_2(p) \;+\; \frac{g_2}{L} \sum_{p>0} \rho_2(-p)\, \rho_1(p) \;+\; \frac{g_2}{L}\, \rho_1(0) \rho_2(0) \;. \tag{168}$$

(165)-(166) の定義に基づき、$\langle a^\dagger_k a_k \rangle_0 = \theta(k_F - k)$, $\langle b^\dagger_k b_k \rangle_0 = \theta(k_F + k)$ であることを用い注意深く計算すると、次の交換関係が得られる：

$$\Big[\, \rho_1(p)\,,\, \rho_1(-p') \,\Big] \;=\; \frac{Lp}{2\pi}\, \delta_{pp'} \;, \qquad \Big[\, \rho_2(-p)\,,\, \rho_2(p') \,\Big] \;=\; \frac{Lp}{2\pi}\, \delta_{pp'} \;. \tag{169}$$

本質的に bose 演算子と同一の交換関係を持っている。$p > 0$ とし、規格化すると

$$C_p \;=\; \sqrt{\frac{2\pi}{Lp}}\, \rho_1(p) \;, \qquad C^\dagger_p \;=\; \sqrt{\frac{2\pi}{Lp}}\, \rho_1(-p) \;, \tag{170}$$

$$C_{-p} \;=\; \sqrt{\frac{2\pi}{Lp}}\, \rho_2(-p) \;, \qquad C^\dagger_{-p} \;=\; \sqrt{\frac{2\pi}{Lp}}\, \rho_2(p) \;, \tag{171}$$

$$\Big[\, C_p\,,\, C^\dagger_{p'} \,\Big] \;=\; \delta_{pp'} \;, \qquad \Big[\, C_{-p}\,,\, C^\dagger_{-p'} \,\Big] \;=\; \delta_{pp'} \;. \tag{172}$$

密度揺らぎの時間発展を調べるには、Hamiltonian との交換関係を知る必要がある。(159),(165)–(168) 式から、次の結果が得られる：

$$\Big[\, \rho_1(p)\,,\, \mathcal{H}_0 \,\Big] \;=\; v_F\, p\, \rho_1(p) \;, \qquad \Big[\, \rho_2(-p)\,,\, \mathcal{H}_0 \,\Big] \;=\; v_F\, p\, \rho_2(-p) \;, \tag{173}$$

$$\Big[\, \rho_1(p)\,,\, \mathcal{H}_4 \,\Big] \;=\; \widetilde{g}_4 v_F\, p\, \rho_1(p) \;, \qquad \Big[\, \rho_2(-p)\,,\, \mathcal{H}_4 \,\Big] \;=\; \widetilde{g}_4 v_F\, p\, \rho_2(-p) \;, \tag{174}$$

$$\Big[\, \rho_1(p)\,,\, \mathcal{H}_2 \,\Big] \;=\; \widetilde{g}_2 v_F\, p\, \rho_2(p) \;, \qquad \Big[\, \rho_2(-p)\,,\, \mathcal{H}_2 \,\Big] \;=\; \widetilde{g}_2 v_F\, p\, \rho_1(-p) \;. \tag{175}$$

ここで $\widetilde{g}_4 = g_4/(2\pi v_F)$, $\widetilde{g}_2 = g_2/(2\pi v_F)$.

実空間における密度は、それぞれの進行方向の粒子 $\nu = 1,\, 2$ に対して、

$$\rho_\nu(x) \;=\; \frac{1}{L}\sum_{p>0}\left(\rho_\nu(p)\, e^{ipx} \;+\; \rho_\nu(-p)\, e^{-ipx}\right). \tag{176}$$

正負の方向へ進行する粒子両方の寄与から、系の電荷と流れの密度は、

$$\rho_c(p) \;=\; \rho_1(p) \,+\, \rho_2(p)\,, \qquad \rho_J(p) \;=\; \rho_1(p) \,-\, \rho_2(p)\,. \tag{177}$$

対応する実空間の表式は、(176) 式と同様に定義される。今、Tomonaga-Luttinger model の全 Hamiltoninan は、 $\mathcal{H}_{\rm TL} \;=\; \mathcal{H}_0 \;+\; \mathcal{H}_4 \;+\; \mathcal{H}_2$, である。電荷と流れの時間発展を Heisenberg 方程式に基づき、(173)–(175) の結果を用いて計算すると、

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho_c(x,t) \;+\; v_J\,\frac{\partial}{\partial x}\,\rho_J(x,t) \;=\; 0\,, \qquad v_J \;=\; v_F\,(\,1+\widetilde{g}_4-\widetilde{g}_2\,)\,, \tag{178}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\,\rho_J(x,t) \;+\; v_N\,\frac{\partial}{\partial x}\,\rho_c(x,t) \;=\; 0\,, \qquad v_N \;=\; v_F\,(\,1+\widetilde{g}_4+\widetilde{g}_2\,)\,. \tag{179}$$

(178) 式の電荷の流れに対する連続の式に加え、もう一つ独立な保存則 (179) 式が存在するため、この model は正確に解ける。(178) を t で微分し、(179) を用いると、

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} \;-\; v_\rho^2\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\rho_c(x,t) \;=\; 0\,, \qquad v_\rho^2 \;=\; v_J\,v_N\,, \quad v_\rho^2 \;=\; v_F\,\sqrt{(1+\widetilde{g}_4)^2-\widetilde{g}_2^2} \tag{180}$$

$\rho_J(x,t)$ も同様な速度 v_ρ の波動方程式に従う。また、v_ρ を用いると、v_J と v_N は

$$v_J \;=\; K_\rho v_\rho\,, \qquad v_N \;=\; \frac{v_\rho}{K_\rho}\,, \qquad K_\rho \;=\; \sqrt{\frac{1+\widetilde{g}_4-\widetilde{g}_2}{1+\widetilde{g}_4+\widetilde{g}_2}}\;. \tag{181}$$

次に、密度および流れに関する相関関数を調べる $(\mu,\nu \,=\, 1,\, 2)$：

$$\chi^r_{\mu\nu}(p,t) \;=\; i\,\frac{1}{L}\,\theta(t)\,\Big\langle\Big[\,\rho_\mu(p,t)\,,\,\rho_\nu(-p)\,\Big]\Big\rangle\;. \tag{182}$$

$\chi^r_{\mu\nu}$ から密度-密度相関関数、電流-電流相関関数が得られる。両辺を微分すると、

$$\begin{aligned} i\,\frac{\partial}{\partial t}\,\chi^r_{\mu\nu}(p,t) \;&=\; -\,\frac{1}{L}\,\delta(t)\,\Big\langle\Big[\,\rho_\mu(p)\,,\,\rho_\nu(-p)\,\Big]\Big\rangle - \,\theta(t)\,\frac{1}{L}\,\left\langle\left[\,\frac{\partial\rho_\mu(p,t)}{\partial t}\,,\,\rho_\nu(-p)\,\right]\right\rangle, \\ &=\; -\,\frac{p}{2\pi}\,\tau^3_{\mu\nu}\,\delta(t) \,+\, i\,\theta(t)\,\frac{1}{L}\,\Big\langle\Big[\,\Big[\rho_\mu(p,t)\,,\,\mathcal{H}_{\rm TL}\Big]\,,\,\rho_\nu(-p)\,\Big]\Big\rangle\;. \end{aligned} \tag{183}$$

ここで Pauli 行列 $\boldsymbol{\tau}^3$ を用いた：

$$\boldsymbol{\tau}^1 \;=\; \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau}^2 \;=\; \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\tau}^3 \;=\; \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{1} \;=\; \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{184}$$

(183) 式の右辺第 2 項の交換関係 $\Big[\rho_\mu(p,t)\,,\,\mathcal{H}_{\rm TL}\Big]$ は、(173)–(175) を用いると $\rho_{\mu'}(p,t)$ に比例するため、$\chi^r_{\mu'\nu}(p,t)$ で表わされる。したがって運動方程式は、$\chi^r_{1\nu}$ と $\chi^r_{2\nu}$ の連立方程式になる。t に関して Fourier 変換し整理しすると次のように書ける、

$$\left\{ \omega\,\boldsymbol{\tau}^3 \;-\; v_\rho p \left(\cosh\varphi\,\mathbf{1} \;+\; \sinh\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1 \right) \right\} \boldsymbol{\chi}^r(p,\omega) \;=\; -\frac{p}{2\pi}\,\mathbf{1}\,, \tag{185}$$

$$\cosh\varphi \equiv \frac{1+\widetilde{g}_4}{\sqrt{(1+\widetilde{g}_4)^2-\widetilde{g}_2^2}} \;=\; \frac{1}{2}\left(\frac{1}{K_\rho} \;+\; K_\rho\right)\,, \tag{186}$$

$$\sinh\varphi \;\equiv\; \frac{\widetilde{g}_2}{\sqrt{(1+\widetilde{g}_4)^2-\widetilde{g}_2^2}} \;=\; \frac{1}{2}\left(\frac{1}{K_\rho} \;-\; K_\rho\right)\,. \tag{187}$$

(185) 式の対角化は、演算子 C_p, $C^\dagger_{-p}$ の Bogoliubov 変換に対応する。行列の恒等式より $\cosh\varphi\,\mathbf{1} + \sinh\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1 \;\equiv\; \exp\left(\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1\right)$、 bose 統計性の保存と対応する性質は

$$\exp\left(\frac{\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1}{2}\right)\boldsymbol{\tau}^3\,\exp\left(\frac{\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1}{2}\right) \;\equiv\; \boldsymbol{\tau}^3\,. \tag{188}$$

これらの性質を用いると、(185) 式は簡単に対角化される：

$$\exp\left(\frac{\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1}{2}\right)\left\{\omega\,\boldsymbol{\tau}^3 \;-\; v_\rho p\,\mathbf{1}\right\}\exp\left(\frac{\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1}{2}\right)\boldsymbol{\chi}^r(p,\omega) \;=\; -\frac{p}{2\pi}\,\mathbf{1}\,. \tag{189}$$

Bogoliubov 変換はこの $\exp\left(\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1\,/\,2\right)$ によって、具体的には次のように表される：

$$\begin{bmatrix} \gamma_p \\ \gamma^\dagger_{-p} \end{bmatrix} \;=\; \begin{bmatrix} \cosh(\varphi/2) & \sinh(\varphi/2) \\ \sinh(\varphi/2) & \cosh(\varphi/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_p \\ C^\dagger_{-p} \end{bmatrix}\,, \tag{190}$$

$$\cosh(\varphi/2) \;=\; \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{K_\rho}} \;+\; \sqrt{K_\rho}\right), \qquad \sinh(\varphi/2) \;=\; \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{K_\rho}} \;-\; \sqrt{K_\rho}\right). \tag{191}$$

相関関数 $\boldsymbol{\chi}^r(p,\omega)$ の具体的表式は、(189) 式から

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\chi}^r(p,\omega) \;&=\; -\frac{p}{2\pi}\,\exp\left(-\frac{\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1}{2}\right)\left\{D^r_+(p,\omega)\,\boldsymbol{\tau}^3 \;+\; D^r_-(p,\omega)\,\mathbf{1}\right\}\exp\left(-\frac{\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1}{2}\right) \\ &=\; -\frac{p}{2\pi}\left\{D^r_+(p,\omega)\,\boldsymbol{\tau}^3 \;+\; D^r_-(p,\omega)\,\left(\cosh\varphi\,\mathbf{1} \;-\; \sinh\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1\right)\right\}, \end{aligned} \tag{192}$$

$$D^r_\pm(p,\omega) \;=\; \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega - v_\rho p + i\delta} \;\pm\; \frac{1}{\omega + v_\rho p + i\delta}\right)\,. \tag{193}$$

電荷感受率 $\chi^r_c(p,\omega)$ は、ρ_c-ρ_c の相関関数であり、(192) の 4 個の要素の和から

$$\chi^r_c(p,\omega) \;=\; \sum_{\mu\nu}\chi^r_{\mu\nu}(p,\omega) \;=\; -\frac{K_\rho}{\pi v_\rho}\,\frac{(v_\rho p)^2}{(\omega+i\delta)^2 \;-\; (v_\rho p)^2}\,. \tag{194}$$

一様感受率は $\lim_{p\to 0}\chi^r_c(p,0) \;=\; K_\rho/(\pi v_\rho)$、スピン 1/2 の場合はこの値の 2 倍になる。

電流演算子は (177)-(178) 式から $J = e\, v_J \rho_J$ であり、電流-電流 (J-J) の相関関数は

$$K^r(p,\omega) \;=\; -\,\frac{e^2 K_\rho v_\rho}{\pi}\;\frac{(v_\rho p)^2}{(\omega+i\delta)^2\;-\;(v_\rho p)^2}\;. \tag{195}$$

交流電気伝導度は Kubo 公式より $\sigma(p,\omega) = [\,K^r(p,\omega) - K^r(p,0)\,]/(i\omega)$ なので、

$$\sigma(p,\omega) \;=\; \frac{e^2 K_\rho v_\rho}{\pi}\;\frac{i\,\omega}{(\omega+i\delta)^2\;-\;(v_\rho p)^2}\;, \tag{196}$$

特に、一様成分の実部は $\mathrm{Re}\,\sigma(0,\omega) \;=\; e^2 K_\rho v_\rho\,\delta(\omega)$ 。実空間へ Fourier 変換すると

$$\begin{aligned}
\sigma(x,\omega) \;&=\; \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\,\sigma(p,\omega)\,e^{ipx} \\
&=\; \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\,\frac{i\,e^2 K_\rho v_\rho}{2\pi}\;\left[\frac{1}{\omega\;-\;v_\rho p + i\delta}\;+\;\frac{1}{\omega\;+\;v_\rho p + i\delta}\right]e^{ipx} \\
&=\; \frac{e^2 K_\rho}{2\pi}\,e^{i\frac{\omega}{v_\rho}|x|}\;\;.
\end{aligned} \tag{197}$$

直流コンダクタンスは、$\omega \to 0$ として得られる。ここで、$\hbar$ を復活させると

$$\sigma(x,0) \;=\; \frac{e^2}{2\pi\hbar}\,K_\rho \;=\; \frac{e^2}{h}\,K_\rho\;. \tag{198}$$

次に、boson を用いた有効 Hamiltonian を導入する。(173) と (174) 式の類似性に着目し、$\mathcal{H}_4$ が (167) 式で与えられることに注意すると、次式の $\widetilde{\mathcal{H}}_0$ は (173) 式と同一の交換関係を満たすことが分かる：

$$\widetilde{\mathcal{H}}_0 \;=\; \frac{2\pi v_F}{L}\sum_{p>0}\rho_1(-p)\,\rho_1(p)\;+\;\frac{2\pi v_F}{L}\sum_{p>0}\rho_2(-p)\,\rho_2(p)\;+\;\frac{2\pi v_F}{L}\,\frac{1}{2}\left[\{\rho_1(0)\}^2+\{\rho_2(0)\}^2\right], \tag{199}$$

したがって、少なくとも (173) 式の交換関係だけから調べられる量に対しては、$\mathcal{H}_0$ の代わりに $\widetilde{\mathcal{H}}_0$ を用いても結果は同じになる。$\widetilde{\mathcal{H}}_0$ は bose 演算子 C_p, $C^\dagger_{-p}$ で書けることから、有効 Hamiltonian による記述が可能になる。まず、$p>0$ のモードの寄与を先に考えると

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathcal{H}}_{\mathrm{TL}} \;&=\; \widetilde{\mathcal{H}}_0\;+\;\mathcal{H}_4\;+\;\mathcal{H}_2 \\
&=\; v_F\sum_{p>0}\Big[\;(1+\widetilde{g}_4)\,p\left(C^\dagger_p C_p + C^\dagger_{-p}C_{-p}\right)+\widetilde{g}_2\left(C^\dagger_p C^\dagger_{-p}+C_{-p}C_p\right)\Big] \\
&=\; \sum_{p>0}\begin{bmatrix}C^\dagger_p & C_{-p}\end{bmatrix}\,v_\rho p\left(\cosh\varphi\,\mathbf{1}\;+\;\sinh\varphi\,\boldsymbol{\tau}^1\right)\begin{bmatrix}C_p\\ C^\dagger_{-p}\end{bmatrix}+\sum_{p>0}(1+\widetilde{g}_4)\,v_F p \\
&=\; \sum_{p>0}v_\rho p\left(\gamma^\dagger_p\gamma_p\;+\;\gamma^\dagger_{-p}\gamma_{-p}\right)\;+\;\Delta E_{GS}\;.
\end{aligned} \tag{200}$$

$$\Delta E_{GS} \;=\; \sum_{p>0}\Big[(1+\widetilde{g}_4)\,v_F\;-\;v_\rho\Big]\,p\;. \tag{201}$$

ここで γ_p は、Bogoliubov 変換 (190) で定義された bose 演算子である。ΔE_{GS} は、基底状態のエネルギーのシフトに相当する。

$$
\begin{aligned}
E_{\text{zero}} &\equiv \frac{2\pi v_F}{L}\frac{\{\rho_2(0)\}^2+\{\rho_1(0)\}^2}{2}+\frac{g_4}{L}\frac{\{\rho_2(0)\}^2+\{\rho_1(0)\}^2}{2}+\frac{g_2}{L}\rho_2(0)\rho_1(0) \\
&= \frac{2\pi v_F}{L}\left[(1+\widetilde{g}_4)\frac{\{\rho_2(0)\}^2+\{\rho_1(0)\}^2}{2}+\widetilde{g}_2\rho_2(0)\,\rho_1(0)\right] \\
&= \frac{2\pi v_F}{L}\left[(1+\widetilde{g}_4+\widetilde{g}_2)\frac{\{\rho_2(0)+\rho_1(0)\}^2}{4}+(1+\widetilde{g}_4-\widetilde{g}_2)\frac{\{\rho_2(0)-\rho_1(0)\}^2}{4}\right] \\
&= \frac{2\pi}{L}\left[v_N\frac{\{\rho_2(0)+\rho_1(0)\}^2}{4}+v_J\frac{\{\rho_2(0)-\rho_1(0)\}^2}{4}\right]. \qquad (202)
\end{aligned}
$$