

# 久保公式とグリーン関数法の実践的基礎 (その 2)

伏屋雄紀<sup>1</sup>, 福山秀敏<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 電気通信大学大学院情報理工学研究科, <sup>2</sup> 東京理科大学

## 1 線形応答事始め

導体に一定の電圧を加えるとそれに応じて一定の電流が流れる。巨視的に見れば定常状態が保たれているので、一見それは平衡状態であるかに受け取られるかもしれない。しかし実際にはジュール熱の発生によりエネルギーは絶えず散逸し、その散逸を補う電圧を常に加え続けることで一定の電流が保たれている。そうした状況はもはや平衡状態ではなく、非平衡・定常状態として理解される。そして、平衡状態からのずれが外場の一次量で表される場合を記述する一般理論が線形応答理論であり、それが本稿の主題である。

熱平衡状態に外場を加え、擾乱を起こす。この擾乱に対する応答が外場の強さに比例しているとき、その比例係数が電気伝導度や磁化率にあたる<sup>1</sup>。そしてその比例係数を系の力学変数で表す公式がいわゆる久保公式である<sup>1</sup>！ジュール熱の発生を伴うような不可逆過程を可逆的な力学法則に基づいて記述する」という、ボルツマンをはじめ統計力学の巨頭たちが挑み続けた問題が、80 年余りを経てついにひとつの金字塔に到達したことになる。

そして大変誇らしいことに、この統計力学史上の偉大な業績を確立したのは、我が国の若き理論物理学者たちである<sup>2</sup>。久保公式で用いられるアイデアの原点は、久保・富田による磁気共鳴の理論 (1954 年) である<sup>2</sup>。当時急速に発展しつつあった核磁気共鳴や電子スピン共鳴の実験に対する具体的な理論の構築がきっかけとなり、非常に一般的な線形応答理論が生み出されたという歴史的経緯は大変教訓的である。この磁気共鳴理論のアイデアを電気伝導度に応用したのが中野の「ひとつの電気伝導計算法」(1955 年) であり<sup>3-5</sup>、それは中嶋に

<sup>1</sup> 電流を考えるならば、外場が電圧、その応答が電流、比例係数が電気伝導度で、オームの法則  $J = \sigma E$  が成り立つ状況が線形応答の対象となる。

<sup>2</sup> 我が国の偉大な先人たちには“先生”の敬称をつけたいところであるが、本稿では歴史上の人物としてあえて敬称をつけずに記述した。

よって直ちに低温まで機能することが示された<sup>6</sup> (1955 年)。そして久保はそれらを含む「非平衡系の量子統計力学」を非常に一般的な形で論じた<sup>7-9</sup> (1955 年)。その総まとめとも言える論文が“Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes” (1957 年) である<sup>1</sup>。非常に短期間で一気に研究が発展したのは印象的であり、まさに「革命的」であったといえよう<sup>3</sup>。一方、引用文献をみればわかるように、これら重要な発展の多くは「物性論研究」において日本語で公開された。それゆえこうした革命の経緯が世界的には見落とされがちなのが残念でもある<sup>4</sup>。

## 2 久保公式の素描

まず久保公式がどういうものなのか、大まかな形をつかむことから始める。

「物理量を観測する」とは、対象に外場 ( $A$ ) を加えてその応答 ( $B$ ) を観測することである。

$$H'(t) = -Ae^{-i\omega t}$$

という外場を加え、物理量の期待値として

$$\langle B(t) \rangle = B(\omega)e^{-i\omega t}$$

を得たとき、

$$B(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi^R(\omega) - \Phi^R(0)]$$

$$\Phi^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle B(t) \dot{A}(0) - \dot{A}(0) B(t) \rangle$$

と表せる。この一連の結果が久保公式と呼ばれる。久保公式が示していることは、加えた外場に対する線形応答は、外場に対応する演算子の時間微分

<sup>3</sup> なお、松原による温度グリーン関数も 1955 年に登場している。

<sup>4</sup> ここでは歴史的経緯についてこれ以上触れないが、興味があれば物性論研究を直接お読みいただきたい。具体的な理論内容のみならず、各著者とも非常に率直な意見を述べられており、当時の雰囲気が生き生きと伝わる、大変興味深い文献群である。

$\hat{A}$  と観測量に対応する演算子  $B$  との相関関数  $\Phi^R$  で与えられる, ということである<sup>5</sup>. この結果自体は厳密であることを強調しておく.

電気伝導の場合, オームの法則

$$\langle j_x \rangle = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma_{xx}(\omega) E_x e^{-i\omega t}$$

における比例係数  $\sigma_{xx}$  が電気伝導度にあたり<sup>6</sup>, それは久保公式により次のように表される (系の体積を  $\mathcal{V}$  とした.)

$$\sigma_{xx}(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi_{xx}^R(\omega) - \Phi_{xx}^R(0)]$$

$$\Phi_{xx}^R(t) = -\frac{i}{\hbar\mathcal{V}} \theta(t) \langle J_x(t) J_x(0) - J_x(0) J_x(t) \rangle$$

$J(t)$  は電流演算子であり, 上の形からわかるように, 電気伝導度に必要なのは電流-電流相関関数である. 先の一般形との対応で言えば,  $J_x(t)$  が応答  $B(t)$  に対応し,  $J_x(0)$  が外場  $\hat{A}(0)$  に対応する. 外場の時間微分が電流演算子となることについては後で詳しく見る. 他にたとえば磁化率の場合, 磁気モーメント-磁気モーメント相関関数 (スピン-スピン相関関数) を計算することになる (本稿では触れないが, 詳しくは文献<sup>1)</sup>を参照.)

一つの電流演算子は  $J = (e/m) \sum_p \psi^\dagger p \psi$  であることから, 電流-電流相関関数は二粒子グリーン関数と見ることもできる. したがって, 「線形応答を求めることは, 二粒子グリーン関数を求めることである」ともいえる. 繰り返しになるが, ここまでは厳密な結論である. しかし (その1) でも述べた通り, 厳密な二粒子グリーン関数を求めることが困難であるため, 具体的に相関関数 (あるいは二粒子グリーン関数) を計算しようとすると, その時点で何らかの近似が必要となる. そこでファインマン図形を援用したグリーン関数の方法がその効力を存分に発揮する.

<sup>5</sup>一般に, ある物理量  $X, Y$  に対して  $\langle X(x)Y(x') \rangle$  を  $X$  と  $Y$  の相関関数という. 変数  $x, x'$  は位置でも時刻でも良い (その1) で導入したグリーン関数  $\mathcal{G}(1, 1') = -\langle T_\tau \{ \psi(1) \bar{\psi}(1') \} \rangle$  も相関関数の一種といえる.

<sup>6</sup>伝導度は一般に, テンソル量  $\sigma_{\mu\nu}$  として与えられる. 通常の電流の場合, 電場と電流の向きが同じ方向であることから, 縦伝導度とも呼ばれ,  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}$  などとなる. 一方, 磁場中のホール伝導度などでは, 電場 ( $\hat{x}$ ) と磁場 ( $\hat{z}$ ) に垂直な方向 ( $\hat{y}$ ) に伝導が生じるので, 横伝導度とも呼ばれ,  $\sigma_{yx}$  のように表される.

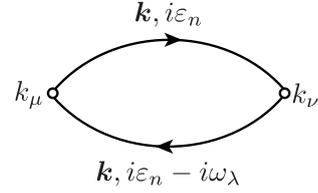


図 1: 電気伝導度に対するファインマン図形.

例えば二粒子間の相関を無視すれば, 電気伝導度に対応する相関関数は次のように一粒子グリーン関数を用いて表される.

$$\Phi_{xx}(i\omega_\lambda) = \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2 \mathcal{V}} \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, n} k_x^2 \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)$$

対応するファインマン図形は, 図1のように一つの閉じたループで表される. 左右の丸はバーテックス (頂点) を意味し, それぞれの電流演算子に対応する. 最も単純な近似を採用してグリーン関数部分の計算をさらに進めれば,

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2\tau}{m}$$

というよく知られた結果を得る. ここで  $n$  はキャリア密度,  $e$  は粒子の電荷,  $m$  はその質量で,  $\tau$  は準粒子寿命である. 本稿後半では, この近似のレベルをより高度にし, 自己エネルギー補正, バーテックス補正を加えていくことでより正確な電気伝導度を得る.

### 3 線形応答理論

#### 3.1 密度行列の運動方程式

量子統計力学における久保公式は, 密度行列に対する運動方程式から導かれる<sup>7</sup>.  $B$  を観測量に対する演算子 (例えば電流演算子など) とすれば, その期待値は密度行列  $\rho$  を用いて,

$$\langle B \rangle = \text{Tr}(\rho B) \quad (1)$$

<sup>7</sup>久保公式の原論文<sup>1)</sup>では, 古典と量子統計の双方について論じられている. 本稿では後者のみを扱う.

として与えられる．正準集団であれば，ハミルトニアンを  $H$  として，

$$\rho = e^{-\beta H} / \text{Tr}(e^{-\beta H}) \quad (2)$$

であり，大正準集団では上式で  $H \rightarrow \mathcal{H} = H - \mu N$  とすればよい．あるいは，固有状態  $|m\rangle$  を用いて密度行列を

$$\rho = \sum_m |m\rangle \rho_m \langle m| \quad (3)$$

と書くこともできる<sup>8</sup>．

密度行列は量子系の状態についてすべての情報を含んでいる．密度行列を用いれば，完全に量子的な形式で理論を構築することができる．したがって，密度行列に基づいて得られる久保公式もまた，(波動関数の位相の情報なども含んだ)完全に量子的な理論といえる．その意味で久保公式は，古典的なドルーデ理論や半古典的なボルツマン方程式に基づく理論と一線を画する．

集団の時間依存性は密度行列の時間依存性に反映される．そこで密度行列の運動方程式を求める．はじめに注意しておく，密度行列の運動方程式は一見ハイゼンベルグの運動方程式と同じように見えるが，符合が異なる．これは，状態を変えずに演算子に時間依存性を含ませるか，演算子はそのままで状態に時間依存性を含ませるかの違いによるものであり，その相対的な関係を反映して運動方程式の符号が反転する．

まずハイゼンベルグ表示とハイゼンベルグの運動方程式を復習しておく．時間発展演算子を  $U(t) = \exp(-i\mathcal{H}t/\hbar)$  と表せば，ハイゼンベルグ表示での演算子は

$$B(t) = U^*(t)B(0)U(t) \quad (4)$$

<sup>8</sup>観測量に対する期待値は，(3)の表記法を用いれば，

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \text{Tr}(\rho B) = \sum_n \langle n | \rho B | n \rangle = \sum_{mn} \langle n | m \rangle \rho_m \langle m | B | n \rangle \\ &= \sum_{mn} \rho_m \langle m | B | n \rangle \langle n | m \rangle = \sum_m \rho_m \langle m | B | m \rangle \end{aligned}$$

となる (ここで完全性  $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$  を用いた)． $\langle m | B | m \rangle$  は状態  $m$  に対する  $B$  の期待値であり， $\rho_m$  は系が状態  $m$  にある確率と解釈できる．このことより， $\text{Tr}(\rho B)$  が  $B$  の期待値の統計平均を取ったものであることがわかる．

である ( (その2) では  $\hbar$  をあらわに表記する ) このとき，ハイゼンベルグの運動方程式は，

$$i\hbar \frac{\partial B(t)}{\partial t} = [B(t), \mathcal{H}] \quad (5)$$

であった．

つぎに密度行列の場合を考える<sup>9</sup>．状態  $|m, t\rangle$  は時間発展演算子を用いて

$$|m, t\rangle = U(t)|m, 0\rangle \quad (6)$$

と表される．(3)で時間依存性を明示して書けば，

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \sum_m |m, t\rangle \rho_m \langle m, t| \\ &= \sum_m U(t)|m, 0\rangle \rho_m \langle m, 0| U^*(t) \\ &= U(t)\rho(0)U^*(t) \end{aligned} \quad (7)$$

である．上の結果と(5)を見比べれば， $U(t)$  と  $U^*(t)$  が入れ替わっているのがわかる．これがために密度行列の運動方程式はハイゼンベルグの運動方程式と逆の符合を持つ．詳しく書けば，

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= i\hbar \left[ \frac{\partial U(t)}{\partial t} \rho(0) U^*(t) + U(t) \rho(0) \frac{\partial U^*(t)}{\partial t} \right] \\ &= \mathcal{H} U(t) \rho(0) U^*(t) - U(t) \rho(0) U^*(t) \mathcal{H} \\ &= -[\rho(t), \mathcal{H}] \end{aligned} \quad (8)$$

である．この運動方程式はノイマン方程式ともよばれ，シュレディンガー方程式と等価である<sup>10</sup>．

熱平衡状態を保っている場合，密度行列は時間変化しないので，

$$[\rho, \mathcal{H}] = 0 \quad (9)$$

である．

### 3.2 線形応答の一般公式

線形応答理論が非常に強力なのは，系のハミルトニアン，加える外場，観測量の詳細によらず，一般的な形で論じることができるからである．この一般性を保つために，例えば久保論文では，加え

<sup>9</sup>ここでの議論は密度行列が系の粒子数を保存する場合を想定している．

る外場を  $A$  , 観測する物理量の演算子を  $B$  として議論を進める<sup>1)</sup> . しかし初学者にとっては, 一般形のまま議論を進めるとイメージを掴みにくいこともある . そこでここでは, 一般的な形を保ちつつそのイメージを持ってもらい易くするため, 具体例として電場をかけた時の電流を念頭におきながら話を進めることにする .

### 3.2.1 密度行列の時間変化を求める

運動方程式を解くには, 境界条件が必要である . 「系の初期状態は外場の影響を受けておらず, 平衡状態が保たれている」とするのは, 因果律からも自然な条件である . そこで初期平衡状態に対する密度行列を  $\rho_0$  とし, 外場は時刻  $t = -\infty$  からゆっくりに (断熱的に) 加えたと考え,

$$\rho(t = -\infty) = \rho_0 \quad (10)$$

を境界条件とする . ここで  $\rho_0 = e^{-\beta(\mathcal{H}-\Omega)}$  ,  $\Omega$  は熱力学ポテンシャルであり,  $e^{-\beta\Omega} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}}$  である . この平衡状態に外場として振動数  $\omega$  で時間変動する電場  $Ee^{-i\omega t}$  を加える . このときハミルトニアンに摂動として加わるのは

$$H'(t) = -e \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E} e^{-i\omega t} \quad (11)$$

である<sup>10</sup> . ここでは電荷  $e$  を持つ粒子を考え,  $\mathbf{r}_i$  はそれらの位置ベクトルである . より一般的な外場を表すには,

$$H'(t) = -Ae^{-i(\omega+i\delta)t} \quad (12)$$

と書くことにする<sup>11</sup> .

(12) の指数部分が  $\omega + i\delta$  ( $\delta$  は正の無限小量) となっているのは,

$$H'(t \rightarrow -\infty) = -Ae^{-i\omega t} e^{-\infty} = 0 \quad (13)$$

のように, 外場が初期状態 ( $t = -\infty$ ) ではゼロになることを保証するためである . このように加え

<sup>10</sup> 負符号は, 電場と静電ポテンシャルの関係  $E = -\nabla\phi$  から来ている .

<sup>11</sup> さらに空間変化も加味して  $A_q e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$  として定式化することもできるが, ここでは簡単のため,  $q = 0$  として話を進める .

る外場を時間の関数として表現する必要があったため, 時間変動する外場  $-Ae^{-i\omega t}$  を導入した .  $e^{i\delta t}$  の項は久保公式がまさに非平衡現象を扱っていることの表れといえよう . このため (外場を印加した後は) 時間に依存しない静的な外場及びその静的な応答を考える場合においても, まず時間依存性を考え, 次に  $\omega \rightarrow 0$  の極限をとるのが久保公式に特徴的な理論行程である . 以降,  $i\delta$  をあらわには書かないが, 外場の時間依存性は常に  $e^{i\omega t} \rightarrow e^{i(\omega+i\delta)t}$  であることを意識しておこう .

また, ここで考える外場は, 摂動ハミルトニアンとして記述できる力学的擾乱によるものに限っていることも注意しておく . 温度勾配による電流駆動 (熱電効果) などの熱的擾乱については, これまで力学的なハミルトニアンで表現する明快な方法が知られておらず, 久保公式の対象外とされてきた . しかしごく最近この状況に変化が生まれている .

外場をかけたあとの密度行列はその運動方程式に従って次のように時間変化する .

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [\mathcal{H} + H'(t), \rho(t)] \quad (14)$$

この運動方程式を厳密に解くのは簡単ではない . しかし我々は線形応答に興味があるので, 外場 (今の場合電場) の一次までに限って密度行列の変化を調べるだけで十分である . そこで

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho'(t) \quad (15)$$

と表し,  $\rho'(t)$  は外場の一次に比例しているとする . 同じように一次の範囲内で (14) は

$$i\hbar \frac{\partial \rho'(t)}{\partial t} = [\mathcal{H}, \rho'(t)] + [H'(t), \rho_0] \quad (16)$$

となる .  $H'(t)$  は外場の一次なので,  $[H'(t), \rho'(t)]$  は全体で外場の二次となり, 線形応答の範囲外であるため考えない . また (9) より,  $[\mathcal{H}, \rho_0] = 0$  である .

この方程式は一見複雑であるが, 次のようにして解くことができる . まず,

$$\rho'(t) = U(t)g(t)U^*(t) \quad (17)$$

とおく．すると (16) の左辺は

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho'(t)}{\partial t} &= \mathcal{H}U(t)g(t)U^*(t) + i\hbar U(t) \frac{\partial g(t)}{\partial t} U^*(t) \\ &\quad - U(t)g(t)U^*(t)\mathcal{H} \\ &= i\hbar U(t) \frac{\partial g(t)}{\partial t} U^*(t) + [\mathcal{H}, \rho'(t)] \quad (18) \end{aligned}$$

となり，この第2項は (16) 右辺第1項と打ち消される．したがって (16) は，次のように書き換わる．

$$\frac{\partial g(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} U^*(t) [H'(t), \rho_0] U(t) \quad (19)$$

この微分方程式の両辺を時間で積分すると，

$$g(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' U^*(t') [H'(t'), \rho_0] U(t') \quad (20)$$

最後に (17) に基づいて  $g(t)$  から  $\rho'(t)$  を求めれば，それが (16) の解となる．

$$\rho'(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' U(t-t') [H'(t'), \rho_0] U^*(t-t') \quad (21)$$

### 3.2.2 観測量を密度行列から求める

密度行列が求まれば，観測量は (1) から計算することができる．例えば観測量として電流を考えるのであれば，電流演算子  $j_\mu$  を用いて

$$\begin{aligned} \langle j_\mu(t) \rangle &= \text{Tr} \{ [\rho_0 + \rho'(t)] j_\mu \} \\ &= \text{Tr} [\rho'(t) j_\mu] \quad (22) \end{aligned}$$

を計算すれば良いことになる．ここで平衡状態で電流は生じていないことから  $\text{Tr}[\rho_0 j_\mu] = 0$  である．より一般に，観測する物理量に対応する演算子を  $B$  とすれば，

$$\langle B(t) \rangle = \text{Tr} [\rho'(t) B] \quad (23)$$

が求めたい観測量である．(23) に (12) と (21) をあわせれば，

$$\langle B(t) \rangle = B(\omega) e^{-i\omega t} \quad (24)$$

$$B(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \text{Tr} \{ [A, \rho_0] B(t) \} e^{i\omega t} \quad (25)$$

となる．ここで対角和の巡回不変性 ( $\text{Tr}\{XYZ\} = \text{Tr}\{YZX\}$ ) を用いて， $B(t) = U^*(t) B U(t)$  とした．また，変数変換  $t-t' \rightarrow t$  も行っている．

### 3.2.3 相関関数とフーリエ展開でより簡潔な形へ

$A$  を電場によるポテンシャル， $B$  を電流演算子とした場合， $B(\omega)$  は電気伝導度  $\sigma(\omega)$  に相当する．(25) では観測量をその演算子と外場の演算子の一次で表しているのので，一通りの結果は求まったことになる．ここではさらに計算を進めてより簡潔な形を導く．

$$X(t) = \text{Tr} \{ [A, \rho_0] B(t) \} \quad (26)$$

とにおいて (25) を部分積分する．

$$\begin{aligned} B(\omega) &= -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{i\omega} \left[ X(0) + \int_0^\infty dt \frac{dX(t)}{dt} e^{i\omega t} \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{1}{i\omega} \int_0^\infty dt (1 - e^{i\omega t}) \frac{dX(t)}{dt} \quad (27) \end{aligned}$$

ここで (外場を断熱的に印加したことを反映して)  $\omega \rightarrow \omega + i\delta$  であったので， $t = \infty$  の寄与をゼロとした<sup>12</sup>．また，二つ目の等号では，時間を無限に隔てた演算子の間に相関はないこと ( $X(\infty) \rightarrow 0$ ) を前提として<sup>13</sup>，

$$X(0) = -\int_0^\infty dt \frac{dX(t)}{dt} \quad (28)$$

も用いた． $B(t)$  についての運動方程式 (5) と， $\rho_0$  は  $\mathcal{H}$  と交換可能であること，巡回不変性を用いれば

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ [A, \mathcal{H}] \rho_0 B(t) - [A, \mathcal{H}] B(t) \rho_0 \} \\ &= -\langle B(t) \dot{A}(0) - \dot{A}(0) B(t) \rangle \quad (29) \end{aligned}$$

となる．二つ目の等号では，ハイゼンベルグの運動方程式  $i\hbar \dot{A} = [A, \mathcal{H}]$  と (1) を用いている．

(29) 右辺は時刻の異なる二つの演算子を並べ替えたものの差である．そこで，遅延グリーン関数の定義にあわせて<sup>14</sup>，遅延相関関数を次のように

<sup>12</sup>ここでの  $t$  は， $t-t' \rightarrow t$  と変数変換したものであった．したがって，外場を印加した時刻  $t' = -\infty$  は，今の場合  $t = +\infty$  に相当する．

<sup>13</sup>系が外場によって不安定になる (相転移する) 場合はこの前提は成り立たない．

<sup>14</sup>遅延グリーン関数の定義は，

$$G^R(t) = -i\theta(t) \langle \psi_{p\sigma}(t) \psi_{p\sigma}^\dagger(0) \mp \psi_{p\sigma}^\dagger(0) \psi_{p\sigma}(t) \rangle$$

であった．符合は上がボーズ粒子，下がフェルミ粒子に対応している．ここで議論する演算子  $A, B$  はあとで見るようにそれぞれ  $\psi^\dagger \psi$  の対からなるため，全体として  $\Phi$  はボーズ統計に従う．

定義する .

$$\Phi^R(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\langle B(t)\dot{A}(0) - \dot{A}(0)B(t) \rangle \quad (30)$$

これを用いれば

$$B(\omega) = \frac{1}{i\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt (1 - e^{i\omega t}) \Phi^R(t) \quad (31)$$

となる . さらに  $\Phi^R(t)$  のフーリエ展開

$$\Phi^R(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \Phi^R(\omega) e^{-i\omega t} \quad (32)$$

を用いれば<sup>15</sup> ,

$$B(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi^R(\omega) - \Phi^R(0)] \quad (33)$$

と非常に簡単な形になる .

(24), (30), (33) が線形応答理論の最も一般的な形での結果で, これらを総称して久保公式とよぶ . ('久保公式' が指す表式については補遺も参照のこと .)

### 3.3 電気伝導度の公式

では(11)に戻り, 時間変動する電場について(33)を適用してみよう . その場合,

$$A = e \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E} \quad (34)$$

であったので,

$$\begin{aligned} \dot{A} &= -\frac{i}{\hbar} [A, \mathcal{H}] = -\frac{i}{\hbar} \frac{e}{2m} \sum_i [\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E}, p_i^2] \\ &= \frac{e}{m} \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (35)$$

<sup>15</sup>フーリエ展開を代入するだけだが, 積分変数をすでに用いている  $\omega$  と共通になってしまう間違いがよくある . 代入する時の積分変数は  $\omega'$  のように別の変数を導入する必要があることに注意しよう . ただし下に見るように, デルタ関数が現れ, 積分を実行した結果, 変数は  $\omega$  だけになる .

$$\begin{aligned} B(\omega) &= \frac{1}{i\omega} \int dt (1 - e^{i\omega t}) \int \frac{d\omega'}{2\pi} \Phi^R(\omega') e^{-i\omega' t} \\ &= \frac{1}{i\omega} \int dt \frac{d\omega'}{2\pi} \{ e^{-i\omega' t} - e^{i(\omega - \omega') t} \} \Phi^R(\omega') \\ &= \frac{1}{i\omega} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \{ 2\pi\delta(\omega') - 2\pi\delta(\omega - \omega') \} \Phi^R(\omega') \\ &= \frac{1}{i\omega} [\Phi^R(0) - \Phi^R(\omega)] \end{aligned}$$

である . ここで  $[x, p_x] = i\hbar$ ,  $[x, p_x^2] = 2i\hbar p_x$  を用いた . ところで全電流は

$$\mathbf{J} = \frac{e}{m} \sum_i \mathbf{p}_i \quad (36)$$

で与えられるので, 結局

$$\dot{A} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} \quad (37)$$

であることがわかる . 一方, 観測量として  $\mu$  方向の電流密度  $j_\mu = J_\mu/V$  を考えれば,  $B = j_\mu$  である .

以上をまとめて, 線形応答理論に基づく電気伝導度は次のように求まる .

$$\langle j_\mu \rangle = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma_{\mu\nu}(\omega) E_\nu e^{-i\omega t} \quad (38)$$

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi_{\mu\nu}^R(\omega) - \Phi_{\mu\nu}^R(0)] \quad (39)$$

$$\Phi_{\mu\nu}^R(t) = -\frac{i}{\hbar V} \theta(t) \langle J_\mu(t) J_\nu(0) - J_\nu(0) J_\mu(t) \rangle \quad (40)$$

$\sigma_{\mu\nu}$  は電気伝導度テンソルで, 例えば  $\sigma_{xx}$  は通常の電気伝導度,  $\sigma_{xy}$  はホール伝導度に相当する<sup>16</sup> . ここで(38)のように重ねて現れる添字については和をとることを約束しておく .

このようにして, 電気伝導度は平衡状態における電流演算子の時間相関(電流-電流相関)によって与えられることが明らかとなった . ここでの電気伝導度の公式が最も有名で, これのみを特に取り上げて久保公式とよばれることもある . しかし, 久保公式は様々な観測量に適用することのできる普遍性の高い公式であって, 電気伝導度以外の様々な物理量に対しても適用できる . 例えば原論文にも例として取り上げられているように, 外場を磁場, 観測量を磁化として, 磁化率も久保公式によって計算することができる<sup>1)</sup> . その場合, 磁化率は磁気モーメント-磁気モーメント相関(スピン-スピン相関)によって与えられることがわかる .

なお, ここまでの導出で, 対象となる系の具体的な性質は一切仮定されていない . つまり, 対象が金属であるか絶縁体であるかにかかわらず, 久保公式は厳密に成立する . したがって, 金属でも

<sup>16</sup>今の場合磁場を加えていないので,  $\sigma_{xy} = 0$  である . しかし磁場を加えた場合も, 計算は難しくなるが, 同じ理論的枠組みでホール伝導度を計算することができる<sup>11), 12)</sup> .

絶縁体でもその電気伝導度を全く同じ枠組みで求めることができる。このことは、良い金属であることを前提とするドルーデやボルツマン理論と大きく異なっており、半導体や半金属、強い乱れに伴う金属絶縁体転移（アンダーソン局在）近傍などを扱う上で非常に大きな利点となる。

## 4 久保公式とグリーン関数

前節で久保公式に基づく電気伝導度の表式 (38)-(40) を得た。しかしこれらから直ちに具体的な伝導度のふるまいが分かるわけではない。久保公式はハミルトニアンから物理量を計算する一般公式であり、特定の模型や近似によらない厳密な公式である。それはいわば理論の外枠を規定する額縁のようなものであり、その中に入れる具体的な内容を知りたい場合は、模型や近似を定めてからさらに計算する必要がある。そこで活躍するのがグリーン関数を用いた方法である。本節では久保公式に基づいて得られた電気伝導度の具体的な計算をグリーン関数を用いて行う<sup>17</sup>。

### 4.1 温度相関関数と遅延相関関数

(その1) で述べたように、具体的な物理量を計算する際は、まず虚時間と松原振動数を用いて有限温度グリーン関数を計算したのち、解析接続によって遅延グリーン関数の計算を行う。久保公式に必要な遅延相関関数は、温度相関関数から解析接続によって求まる。両者の関係付けは(その1) で見た一粒子グリーン関数での手続きと全く同じようにして行うことができる。ここでは復習も兼ねて再度その手順を踏むが、先を急ぐ読者は本小節を読み飛ばして頂いて構わない。

考えているハミルトニアンと固有状態を  $\mathcal{H}|m\rangle =$

$E_m|m\rangle$  で表すことにすると、

$$\begin{aligned} \Phi^R(t) &= -\frac{i}{\hbar}\theta(t)e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \\ &\quad \times \left[ \langle n|B(t)|m\rangle \langle m|\dot{A}(0)|n\rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle n|\dot{A}(0)|m\rangle \langle m|B(t)|n\rangle \right] \end{aligned} \quad (41)$$

と書ける。ハイゼンベルグ表示の定義より、

$$\begin{aligned} \langle n|B(t)|m\rangle &= \langle n|e^{i\mathcal{H}t/\hbar}B(0)e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}|m\rangle \\ &= \langle n|B(0)|m\rangle e^{i(E_n-E_m)t/\hbar} \end{aligned} \quad (42)$$

であったので、

$$\begin{aligned} \Phi^R(t) &= -\frac{i}{\hbar}\theta(t)e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \\ &\quad \times \left[ e^{i(E_n-E_m)t/\hbar} \langle n|B|m\rangle \langle m|\dot{A}|n\rangle \right. \\ &\quad \left. - e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar} \langle n|\dot{A}|m\rangle \langle m|B|n\rangle \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar}\theta(t)e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \\ &\quad \times e^{i(E_n-E_m)t/\hbar} \langle n|B|m\rangle \langle m|\dot{A}|n\rangle \end{aligned} \quad (43)$$

が導かれる(二つ目の等号で  $m$  と  $n$  の入れ替えを行った。)このフーリエ展開は

$$\begin{aligned} \Phi^R(\omega) &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} \langle n|B|m\rangle \langle m|\dot{A}|n\rangle \\ &\quad \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\hbar\omega + E_n - E_m + i\delta} \end{aligned} \quad (44)$$

で与えられる<sup>18</sup>。

<sup>18</sup>階段関数を含むフーリエ展開は次のように機械的に行うことができる(その1)参照。

$$\theta(t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega t}}{\omega - i\delta}$$

であることを用いて、 $F(t) = -i\theta(t)e^{iXt} \{\dots\}$  のフーリエ展開は、

$$\begin{aligned} F(\omega) &= -i \int dt e^{i\omega t} \theta(t) e^{iXt} \{\dots\} \\ &= -i \int dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{i(\omega+\omega'+X)t}}{\omega' - i\delta} \{\dots\} \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\delta(\omega + \omega' + X)}{\omega' - i\delta} \{\dots\} \\ &= \frac{1}{\omega + X + i\delta} \{\dots\} \end{aligned}$$

<sup>17</sup>久保公式に基づいた電気伝導度の具体的な計算を、グリーン関数を用いて明瞭な形で実践したのは、筆者らの知る限り文献<sup>11)</sup>が初めてである。

この遅延相関関数に解析接続される温度相関関数は次の形で与えられる．

$$\Phi(\tau) = -\langle T_\tau \{ B(\tau) \dot{A}(0) \} \rangle \quad (45)$$

$$\Phi(i\omega_\lambda) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \Phi(\tau) \quad (46)$$

ここで演算子  $B, \dot{A}$  はボーズ統計に従うとして (脚注 14) ,

$$\omega_\lambda = 2\lambda\pi k_B T \quad (47)$$

である ( $\lambda$  は整数) .  $\tau > 0$  のとき ,

$$\begin{aligned} \Phi(\tau) &= -e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} \langle n | e^{-\beta\mathcal{H}} B(\tau) | m \rangle \langle m | \dot{A}(0) | n \rangle \\ &= -e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} e^{(E_n - E_m)\tau} \\ &\quad \times \langle n | B | m \rangle \langle m | \dot{A} | n \rangle \end{aligned} \quad (48)$$

であるから , このフーリエ展開は

$$\begin{aligned} \Phi(i\omega_\lambda) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \Phi(\tau) \\ &= -e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} \langle n | B | m \rangle \langle m | \dot{A} | n \rangle \\ &\quad \times \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} e^{-\beta E_n} e^{(E_n - E_m)\tau} \\ &= e^{\beta\Omega} \sum_{m,n} \langle n | B | m \rangle \langle m | \dot{A} | n \rangle \\ &\quad \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\omega_\lambda + E_n - E_m} \end{aligned} \quad (49)$$

となる . ここで  $e^{i\omega_\lambda \beta} = 1$  を用いた .

以上のことから , (45) で定義される温度相関関数のフーリエ展開 (46) は ,

$$i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta \quad (50)$$

の置き換えによって遅延相関関数 (44) に解析接続されることがわかる . なお , 本稿では便宜上 , 松原振動数はそのままの  $\omega_\lambda$  でエネルギーの次元を持ち , 実振動数は  $\hbar\omega$  でエネルギーの次元を持つこととする .

## 4.2 電気伝導度の具体的な計算

久保公式に基づいて物理量を具体的に計算するには , 温度相関関数を求めれば良いことがわかった . ではいよいよその具体的な計算に入る .

実際の研究においては , 本小節の内容に相当する計算が重要になってくるであろう . ここでの計算を新しい模型や近似に適用することによって未知の現象の発見につながるかも知れない . ここでの具体的な計算の進め方をマスターすることで計算法の本質を会得し , 新現象の開拓に役立てていただきたい .

### 4.2.1 温度相関関数を一粒子温度グリーン関数で表す

通常の電気伝導度の場合 , 加える電場と観測する電流の方向を共に  $x$  方向として ,

$$\sigma_{xx} = -\frac{1}{i\omega} [\Phi_{xx}^R(\omega) - \Phi_{xx}^R(0)] \quad (51)$$

$$\Phi_{xx}(i\omega_\lambda) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \{ J_x(\tau) J_x(0) \} \rangle \quad (52)$$

を計算すればよい . 電荷  $e$  を持つ粒子に対する電流演算子は第二量子化に基づけば ,

$$\mathbf{J} = \frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma} \quad (53)$$

である . これを (52) に代入すれば ,

$$\Phi_{xx}(i\omega_\lambda) = \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} k_x k'_x \mathcal{K}(i\omega_\lambda) \quad (54)$$

$$\mathcal{K}(i\omega_\lambda) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \mathcal{K}(\tau) \quad (55)$$

$$\mathcal{K}(\tau) = -\langle T_\tau \{ \bar{\psi}_{\mathbf{k}}(\tau) \psi_{\mathbf{k}}(\tau) \bar{\psi}_{\mathbf{k}'}(0) \psi_{\mathbf{k}'}(0) \} \rangle \quad (56)$$

となる . ここで  $\mathcal{K}$  は二粒子グリーン関数に相当する .

(その 1) で見たように , 二粒子グリーン関数を正確に計算することは簡単ではない . そこで適当な近似が必要となる . その最も単純な近似として , 二粒子グリーン関数を二つの独立な一粒子グリーン関数で表した

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\tau) &\simeq -\langle \bar{\psi}_{\mathbf{k}}(\tau) \psi_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}}(\tau) \bar{\psi}_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \\ &= \langle T_\tau \{ \psi_{\mathbf{k}'}(0) \bar{\psi}_{\mathbf{k}}(\tau) \} \rangle \langle T_\tau \{ \psi_{\mathbf{k}}(\tau) \bar{\psi}_{\mathbf{k}'}(0) \} \rangle \\ &= \mathcal{G}(\mathbf{k}, -\tau) \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) \end{aligned} \quad (57)$$

を考える<sup>19</sup> ( $\tau > 0$ とした) そのフーリエ展開は、  
温度グリーン関数のフーリエ展開

$$\mathcal{G}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\varepsilon_n \tau} \mathcal{G}(i\varepsilon_n) \quad (58)$$

を用いて、

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(i\omega_\lambda) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \frac{1}{\beta^2} \sum_{n,n'} e^{i(\varepsilon'_n - \varepsilon_n)\tau} \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon'_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \quad (59) \end{aligned}$$

となる<sup>20</sup>。以上をまとめれば、温度相関関数を

$$\begin{aligned} \Phi_{xx}(i\omega_\lambda) &= \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2 \mathcal{V}} \\ &\times \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, n} k_x^2 \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \quad (60) \end{aligned}$$

のように、一粒子温度グリーン関数を用いて表せたことになる。係数の2でスピンの和を考慮してある。

<sup>19</sup> 今の場合、結局残るのは  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$  のみであるので、 $\mathbf{k}'$  依存性を落としてある。このことは次のようにして示すことができる。 $\mathbf{k}$  表示の生成・消滅演算子を一度実空間に戻し、並進対称性の元で改めて運動量表示のグリーン関数を導入する。

$$\begin{aligned} &\langle T_\tau \{ \psi_{\mathbf{k}}(\tau) \bar{\psi}_{\mathbf{k}'}(0) \} \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \langle T_\tau \{ \psi(\mathbf{r}_1, \tau) \bar{\psi}(\mathbf{r}_2, 0) \} \rangle e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_2} \\ &= - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \int \frac{d\bar{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \mathcal{G}(\bar{\mathbf{k}}, \tau) e^{i\bar{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_2} \\ &= - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \int \frac{d\bar{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \mathcal{G}(\bar{\mathbf{k}}, \tau) e^{i(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1} e^{i(\mathbf{k}' - \bar{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{r}_2} \\ &= - \int \frac{d\bar{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \mathcal{G}(\bar{\mathbf{k}}, \tau) (2\pi)^6 \delta(\bar{\mathbf{k}} - \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \bar{\mathbf{k}}) \\ &= -\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned}$$

ここで現れた  $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$  は (54) に含まれる  $\mathbf{k}'$  積分によって消える。以上のことを考慮すれば、以降の計算で  $\mathbf{k}'$  依存性を落とすことができる。

<sup>20</sup>  $\varepsilon_n$  はフェルミ粒子、 $\omega_\lambda$  はボーズ粒子に対する松原振動数であることに注意しておこう。 $\omega_n + \varepsilon_n - \varepsilon'_n$  は全体でボーズ粒子の松原振動数として扱える。このことから、ここでの計算では (その1) §8.1 でも現れた

$$\int_0^\beta d\tau e^{i(\varepsilon_n - \varepsilon'_n)\tau} = \beta \delta_{\varepsilon_n, \varepsilon'_n}$$

なる関係を用いている。

#### 4.2.2 松原振動数の和をとる

次に行うべきは、振動数に関する和をとることである。温度グリーン関数を用いる場合、他で見られない松原振動数についての和をとる必要があり、やや特殊な配慮を要する。とはいえ、気をつけるべき点は限られている。ここで紹介する一通りの手順が理解できてしまえば、あとはほぼ機械的に計算できるはずである。

温度相関関数において松原振動数が関係する、次の振動数和我们を考える。

$$\mathcal{K}(i\omega_\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}(i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)$$

$\sum_n$  は、より正確には

$$\varepsilon_n = (2n + 1)\pi/\beta \quad (61)$$

についての和をとることである。このように奇数についてのみ和をとることは一見難しそうであるが、複素関数と留数定理をうまく使うことで、簡単に和をとることができる。

まず次のような複素積分を考える。

$$\oint_C \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) F(z) \quad (62)$$

$F(z)$  は任意の関数とし、 $n_F(z)$  はフェルミ分布関数

$$n_F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \quad (63)$$

である。 $n_F(z)$  は  $z = (2n + 1)\pi i/\beta$  に極を持ち、それがちょうどフェルミ粒子の松原振動数  $i\varepsilon_n$  と一致する<sup>21</sup>。この性質を利用して、留数定理から、

$$\frac{1}{\beta} \sum_n F(i\varepsilon_n) = - \oint_C \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) F(z) \quad (64)$$

の関係が得られる<sup>22</sup> ( $\varepsilon_n \rightarrow z$  ではなく、 $i\varepsilon_n \rightarrow z$  の対応であることに注意すること)。

ここでの径路  $C$  は、図2のように個別の極を囲む径路の和としても良いし、全てを囲む大きな径

<sup>21</sup> すぐわかるように、ボーズ粒子の松原振動数を考える場合、ボーズ分布関数  $n_B(\varepsilon) = 1/(e^{\beta\varepsilon} - 1)$  を用いれば良い。

<sup>22</sup>  $e^{\beta z}$  を  $z = (2n + 1)\pi i/\beta$  の周りで展開すれば、

$$\frac{1}{e^{\beta z} + 1} \simeq -\frac{1}{\beta} \frac{1}{z - (2n + 1)\pi/\beta} \quad (65)$$

であることから、 $n_F(z)$  の留数は  $-1/\beta$  である。

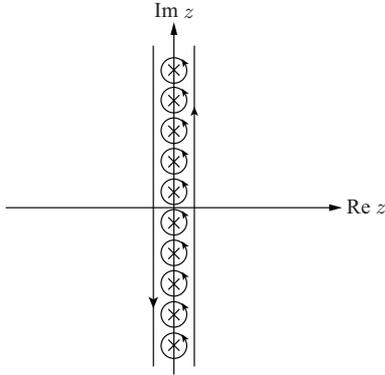


図 2:  $n_F(z)$  の極の位置とそれを囲む積分径路 .

路に変形して考えても良い . ただしこうした径路の変形は , 正則な領域のみに許され , 解析性の異なる領域をまたぐ径路の変形は許されない .

#### 4.2.3 解析接続を行う

今の場合 ,  $F(z)$  にあたる被積分関数は二つのグリーン関数の積  $\mathcal{G}(z)\mathcal{G}(z-i\omega_\lambda)$  であり , それぞれ  $\text{Im } z = 0$  の上下および  $\text{Im } z = i\omega_\lambda$  の上下で解析性が異なる<sup>23</sup> . そのため , 実軸に平行な  $\text{Im } z = 0$  と  $\text{Im } z = i\omega_\lambda$  の直線をよぎって径路を変形することはできない . そこで径路  $C$  を図 3(a) のように  $C_a$  ( $\text{Im } z > i\omega_\lambda$ );  $C_b$  ( $0 < \text{Im } z < i\omega_\lambda$ );  $C_c$  ( $\text{Im } z < 0$ ) の三つの閉じた径路に分割する ( $\omega_\lambda > 0$  とした .) 各領域で  $\mathcal{G}(z)$  ,  $\mathcal{G}(z-i\omega_\lambda)$  は解析的であるので , その領域内でそれぞれの径路を図 3(b) のように引き延ばすことができる . 各径路は無遠で閉じた周回径路であるが , 半径無限大の周回積分部分の寄与はゼロとなるので , 結局積分としては  $\text{Im } z = 0$  ,  $i\omega_\lambda$  に沿った実軸に平行な  $C_1 \sim C_4$  の  $-\infty$  から  $+\infty$  に至る積分のみが寄与する . そこで  $x$  を実数として ,  $C_1, C_2$  では  $z = x + i\omega_\lambda \pm i\delta$  ,  $C_3, C_4$  では  $z = x \pm i\delta$  を代入し , 松原振動数の和は次の 4 径

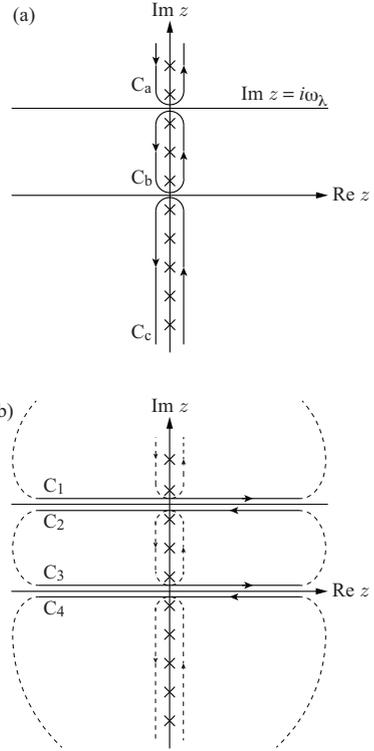


図 3: 松原振動数の和をとるための複素積分の径路 .

路の積分となる .

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(i\omega_\lambda) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x+i\omega_\lambda) \mathcal{G}(x+i\delta) \quad (C_1) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x+i\omega_\lambda) \mathcal{G}(x-i\delta) \quad (C_2) \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x+i\delta) \mathcal{G}(x-i\omega_\lambda) \quad (C_3) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x-i\delta) \mathcal{G}(x-i\omega_\lambda) \quad (C_4) \end{aligned}$$

$\mathcal{G}$  の引数で  $i\omega_\lambda$  を含む場合は ,  $i\omega_\lambda$  に比べて十分小さい  $i\delta$  はつける必要がない . また  $C_1, C_2$  では ,  $e^{i\beta\omega_\lambda} = 1$  より ,  $n(x+i\omega_\lambda) = n(x)$  であることを用いている . “最後に” ,  $i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta$  の解析接

<sup>23</sup>温度グリーン関数は次のように解析接続されることを思い出そう .

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \xrightarrow{i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta} G^R(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad \text{for } \varepsilon_n > 0 \quad (66)$$

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, i\varepsilon_n) \xrightarrow{i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon - i\delta} G^A(\mathbf{p}, \varepsilon) \quad \text{for } \varepsilon_n < 0 \quad (67)$$

続を行うことで<sup>24</sup> ,

$$K(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \times \left[ G^R(x + \hbar\omega) G^R(x) - G^R(x + \hbar\omega) G^A(x) + G^R(x) G^A(x - \hbar\omega) - G^A(x) G^A(x - \hbar\omega) \right] \quad (68)$$

となる<sup>25</sup> .

このように、輸送係数の計算では外部振動数  $i\omega_\lambda$  の存在により、複素平面は3分割され、 $-\infty < x < \infty$  の実数積分が  $C_1 \sim C_4$  の4径路現れる。そのとき解析接続されたグリーン関数は、 $G^R G^R$ ,  $G^R G^A$ ,  $G^A G^A$  の組み合わせで現れる。このうち、 $C_2 + C_3$  の  $G^R G^A$  の寄与は非平衡流に相当し、散逸を伴う通常の輸送現象に主要な役割を果たす。一方、 $C_1 + C_4$  の  $G^R G^R$  と  $G^A G^A$  は、平衡流に相当し、反磁性電流など散逸をともなわない場合に重要となるが、散逸を伴う輸送現象では  $G^R G^A$  の寄与に比べて小さく、特異的でないことが「通常」である<sup>26</sup> .

#### 4.2.4 $\omega$ の一次項を取り出す

静的伝導度を求める場合、(39) で最終的に  $\omega \rightarrow 0$  をとる必要がある。相関関数を  $\Phi_{\mu\nu}^R(\omega) = \Phi_{\mu\nu}^{R(0)} +$

<sup>24</sup> “最後に”を強調したのは、電子に対する松原振動数  $i\varepsilon_n$  と外場に対する  $i\omega_\lambda$  の二段階の解析接続の順序を決して逆にしていけないことを注意するためである。

<sup>25</sup> ここでの変形をより丁寧に書くと次のようになる。まず単純に  $i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta$  の置き換えをすると

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\hbar\omega + i\delta) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x + \hbar\omega + i\delta) \mathcal{G}(x + i\delta) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x + \hbar\omega + i\delta) \mathcal{G}(x - i\delta) \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x + i\delta) \mathcal{G}(x - \hbar\omega - i\delta) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \mathcal{G}(x - i\delta) \mathcal{G}(x - \hbar\omega - i\delta) \end{aligned}$$

この段階ですべての  $\mathcal{G}$  の引数は (実数  $\pm i\delta$ ) となっている (その1) で見たように、上半面で解析的な場合は遅延グリーン関数、下半面で解析的な場合は先進グリーン関数に解析接続される。したがって、(実数  $+ i\delta$ ) の場合は  $G^R$ , (実数  $- i\delta$ ) の場合は  $G^A$  とする。これにより (68) を得る。

<sup>26</sup> ここで「通常」としたが、新しい輸送現象を調べる場合、 $G^R G^R - G^A G^A$  の寄与が必ずしも無視できるほど小さいかどうかは自明ではない。常にすべての寄与に意識を向けておくことで、思わぬ大発見につながるかもしれない。

$\Phi_{\mu\nu}^{R(1)}\omega + \Phi_{\mu\nu}^{R(2)}\omega^2 + \dots$  のように  $\omega$  で展開すれば、(39) は  $\omega \rightarrow 0$  の極限で

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = i\Phi_{\mu\nu}^{R(1)} \quad (69)$$

与えられることがわかる。したがって、我々に必要なのは  $\omega$  の一次項ということになる。その求め方はグリーン関数の解析的性質の違いにより、 $G^R G^A$  と  $G^R G^R$ ,  $G^A G^A$  とで異なる。

#### $G^R G^A$ の $\omega^1$ 次項

$C_2 + C_3$  の結果は次の形をもっている。

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \times \left[ G^R(x) G^A(x - \hbar\omega) - G^R(x + \hbar\omega) G^A(x) \right] \quad (70)$$

$x \rightarrow x + \hbar\omega$  の変数変換を行えば、

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} [n_F(x + \hbar\omega) - n_F(x)] \times G^R(x + \hbar\omega) G^A(x) \quad (71)$$

となるため、 $n_F(x + \hbar\omega)$  を  $\hbar\omega$  についてテイラー展開すれば、その一次項

$$\frac{\hbar\omega}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) G^R(x) G^A(x) \quad (72)$$

が得られる。フェルミ分布関数の微分  $-dn_F(x)/dx$  の部分は  $T \rightarrow 0$  でデルタ関数と一致する。つまり、 $-dn_F(x)/dx$  がかかることで、フェルミ面近傍の寄与のみを取り出すことになる。そのためこの項はフェルミ面項 (Fermi surface term) ともよばれる。このように、 $C_2 + C_3$  の寄与は必ずフェルミ分布関数の微分項で書き表される<sup>27</sup>。これに対し、フェルミ分布関数そのものに比例する項はフェルミ海項 (Fermi sea term) ともよばれる。

<sup>27</sup> なお、 $C_2 + C_3$  の寄与において  $\omega^0$  次項は、(70) で  $\omega = 0$  とすると、 $G^R(x) G^A(x) - G^R(x) G^A(x) = 0$  となることから、常にゼロとなることがわかる。つまり、 $\omega^0$  次項は  $C_1 + C_4$  から現れ、それが  $-\Phi_{\mu\nu}^R(0)$  と打ち消しあう。

## $G^R G^R, G^A G^A$ の $\omega^1$ 次項

$C_1 + C_4$  の結果は次の形をもっている .

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \times [G^R(x + \hbar\omega)G^R(x) - G^A(x)G^A(x - \hbar\omega)] \quad (73)$$

$G^R(x + \hbar\omega) = G^R(x) + \hbar\omega \partial_x G^R(x)$  より,  $[\dots]$  内の  $\omega^1$  次項は  $G^R \partial_x G^R = \frac{1}{2} \partial_x \{G^R\}^2$  を用いることで,

$$\begin{aligned} & \hbar\omega \left[ G^R(x) \frac{\partial G^R(x)}{\partial x} + G^A(x) \frac{\partial G^A(x)}{\partial x} \right] \\ &= \hbar\omega \operatorname{Re} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \{G^R(x)\}^2 \right] \end{aligned}$$

となる ( $G^A = [G^R]^*$  の関係があったことを思い出しておこう.) さらに部分積分することで,

$$\begin{aligned} & -\hbar\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} n_F(x) \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{Re} \left[ \{G^R(x)\}^2 \right] \\ &= -\hbar\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) \operatorname{Re} \left[ \{G^R(x)\}^2 \right] \end{aligned}$$

が得られる. ここで  $\lim_{\varepsilon \rightarrow \pm\infty} G^R(\varepsilon) = 0$  の性質を用いた.

以上で  $C_2 + C_3$  のみならず  $C_1 + C_4$  の寄与も  $-dn_F/dx$  に比例する形で与えられることがわかった. つまり, 伝導に寄与するのはフェルミ面の極近傍の準粒子だけである (そうした粒子による伝導は通常散逸を伴う.) しかしいつもこの変形ができるわけではないことに注意を要する<sup>11)</sup>. これは対角伝導度 (縦伝導度,  $\sigma_{xx}$  や  $\sigma_{yy}$  など) は散逸的 (dissipative) であるがゆえに,  $C_1 + C_4$  の寄与を含めても  $-dn_F/dx$  に比例する形で与えられたのである. 一方, 非対角伝導度 (横伝導度,  $\sigma_{xy}$  など) は分散的 (dispersive) であるため,  $C_1 + C_4$  の寄与はいかに部分積分を用いようとも  $n_F$  に比例する項が残る. つまり, フェルミ面以下すべての粒子が伝導に寄与し得る (フェルミ面から離れた粒子による伝導は通常散逸を伴わない.)

## 4.2.5 電気伝導度の具体的な形を得る

以上をまとめると電気伝導度は,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\hbar e^2}{\pi \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k_x^2}{m^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left( -\frac{dn_F(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \\ &\times \left[ G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) G^A(\mathbf{k}, \varepsilon) - \operatorname{Re} \{G^R(\mathbf{k}, \varepsilon)\}^2 \right] \end{aligned} \quad (74)$$

のように  $-dn_F/d\varepsilon$  に比例した形で表すことができる. さらに

$$G^R G^A - \operatorname{Re} \{G^R\}^2 = 2 [\operatorname{Im} G^R]^2 \quad (75)$$

の関係が成り立つので, 十分低温 ( $T \ll \mu$ ) では,

$$\sigma_{xx} = \frac{2\hbar e^2}{\pi \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k_x^2}{m^2} [\operatorname{Im} G^R(\mathbf{k}, 0)]^2 \quad (76)$$

となる.

これ以上の計算を行うには, グリーン関数の具体的な形を知る必要がある. そこで遅延グリーン関数の一般的な形として,

$$G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma'(\mathbf{k}, \varepsilon) + i\Sigma''(\mathbf{k}, \varepsilon)} \quad (77)$$

を考えてみよう<sup>11)</sup>.  $\Sigma'$  と  $\Sigma''$  はそれぞれ自己エネルギーの実部と虚部である. このとき, 遅延グリーン関数の解析性から,  $\Sigma'' > 0$  である.  $\Sigma'$  は正にも負にもなる.  $\Sigma'(\mathbf{k}, \varepsilon)$  を  $\xi_{\mathbf{k}}$  と  $\varepsilon$  について展開し,  $\Sigma''$  の  $\xi_{\mathbf{k}}$  と  $\varepsilon$  の依存性を無視すれば, 遅延グリーン関数はより簡単に

$$G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{a^{-1}\varepsilon - b^{-1}\xi_{\mathbf{k}} + i\Sigma''} \quad (78)$$

と表せる. ここで  $a, b$  はそれぞれ振動数とエネルギー分散のくりこみ因子であり,  $k_F$  をフェルミ波数として,

$$a^{-1} = 1 - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \Sigma'(\mathbf{k}_F, \varepsilon) \Big|_{\varepsilon=0} \quad (79)$$

$$b^{-1} = 1 + \frac{\partial}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} \Sigma'(\mathbf{k}, 0) \Big|_{|\mathbf{k}|=k_F} \quad (80)$$

である. たとえば低温の電子比熱は, 電子-格子相互作用により  $a^{-1}$  だけ増強される<sup>13), 14)</sup>. また状態密度

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \operatorname{Im} G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) \quad (81)$$

は,

$$\tilde{\rho}_0 = b\rho_0 \quad (82)$$

のように, 自由粒子の状態密度  $\rho_0 (= \rho(0))$  に対して  $b$  だけくりこまれる<sup>28</sup>.

このグリーン関数の元では,  $G^R G^A$  は

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{k}, 0)G^A(\mathbf{k}, 0) &= \frac{b}{\Sigma''} \frac{b\Sigma''}{\xi_k^2 + (b\Sigma'')^2} \\ &= \frac{\pi b}{\Sigma''} \delta(\xi_k) \end{aligned} \quad (83)$$

となる. 最後の等号では,  $b\Sigma''$  が十分小さいとし,  $\pi\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} a/(x^2 + a^2)$  を用いた. この形からわかる通り,

$$G^R G^A \propto \frac{1}{\Sigma''} \quad (84)$$

のように  $G^R G^A$  は  $\Sigma''$  が小さければ発散的に大きくなる.

一方,  $C_1 + C_4$  の寄与  $\text{Re}\{G^R\}^2$  は

$$\text{Re} \left[ \{G^R(\mathbf{k}, 0)\}^2 \right] = b^2 \frac{\xi_k^2 - b^2 \Sigma''^2}{(\xi_k^2 + b^2 \Sigma''^2)^2} \quad (85)$$

となるが,  $\xi_k$  積分することを考慮すれば,

$$\text{Re} \left[ \{G^R\}^2 \right] \sim 0 \quad (86)$$

としてよい<sup>29</sup>.

<sup>28</sup>自由粒子の場合, (81) に  $G^R = 1/(\varepsilon - \xi_k + i\delta)$  を代入すると,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{(\varepsilon - \xi_k)^2 + \delta^2} = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \xi_k)$$

となる. これは状態密度の定義そのものである. 一方, 遅延グリーン関数が (78) で与えられている場合,

$$\tilde{\rho}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Sigma''}{(a^{-1}\varepsilon - b^{-1}\xi_k)^2 + \Sigma''^2}$$

であり,  $\Sigma''$  が十分小さいとすれば,

$$\tilde{\rho}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \delta(b^{-1}\xi_k) = b \sum_{\mathbf{k}} \delta(\xi_k) = b\rho_0$$

を得る.

<sup>29</sup>十分よい金属 ( $E_F \gg k_B T$ ) では,

$$\sum_{\mathbf{k}} = \frac{\rho_0}{2} \int_{-E_0}^{E_0} d\xi$$

とすることができる.  $E_0$  はカットオフエネルギーである. こ

結局, 電気伝導度を支配するのは  $G^R G^A$  の寄与であり,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\hbar e^2}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k_x^2}{m^2} \frac{b}{\Sigma''} \delta(\xi_k) \\ &= \hbar e^2 \int_0^\infty \frac{dk}{6\pi^2} \frac{\hbar^2}{m^2} k^4 \frac{b}{\Sigma''} \frac{m}{\hbar^2 k_F} \delta(k - k_F) \\ &= \frac{\hbar e^2}{6\pi^2} \frac{k_F^3}{m} \frac{b}{\Sigma''} \end{aligned} \quad (87)$$

となる<sup>30</sup>. ここで  $d\xi_k/dk = \hbar^2 k/m$  の関係を用いた.

最後に準粒子の寿命を

$$\tau_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2\Sigma''} \quad (88)$$

と改めて定義し, キャリア密度は  $n = k_F^3/3\pi^2$  で与えられることから,

$$\boxed{\sigma_{xx} = \frac{ne^2 \tau_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_0}{m \rho_0}} \quad (89)$$

を得る. これは古典的なドルーデ理論や半古典的なボルツマン方程式によるよく知られた結果  $\sigma_{xx} = ne^2 \tau/m$  と本質的に一致し, さらに状態密度のくりこみ分も反映している.

## 5 不純物散乱と自己エネルギー

前節では自己エネルギーの中身に立ち入らず, 一般的な形を仮定して電気伝導度を導いた. ここでこのことから, (85) の  $\xi_k$  積分を考えると,

$$\begin{aligned} \int_{-E_0}^{E_0} dx \frac{x^2 - a^2}{(x^2 + a^2)^2} &= \left[ -\frac{x}{x^2 + a^2} \right]_{-E_0}^{E_0} \\ &= -\frac{2E_0}{E_0^2 + a^2} \sim -\frac{2}{E_0} \end{aligned}$$

バンドの底が  $E_F$  より十分離れていれば,  $E_0 \rightarrow \infty$  とすることができ, 上の積分はゼロとなる.

逆に,  $E_F \tau/\hbar$  が小さいドーブした半導体や半金属では,  $\text{Re}\{G^R\}^2$  の寄与は小さいが有限になる.

<sup>30</sup> $k_x^2$  の積分について. 等方的なエネルギー分散の場合,

$$\begin{aligned} &\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} k_x^2 \dots \\ &= \int_0^\infty k^2 \frac{dk}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \frac{d\theta}{2\pi} k^2 \sin \theta^2 \cos \varphi^2 \dots \\ &= \frac{1}{6\pi^2} \int_0^\infty k^4 dk \dots \end{aligned}$$

は電気伝導に大きく影響を及ぼす不純物散乱を具体例として取り上げ、自己エネルギーの詳細をみてみよう。このことは同時に (その1) で習得したファインマン図形によるグリーン関数の方法が具体的な問題でどのように活かされるのかを知る良い機会でもある。

## 5.1 不純物の集団平均

金属中に不純物がランダムに含まれている場合を考える<sup>31</sup>。ある不純物の位置を  $R_i$  とし、その不純物からのポテンシャルを  $U(r - R_i)$  とする。それが  $N_i$  個含まれているとすれば、すべての不純物によるポテンシャルは

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_i} U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (90)$$

で表され、ハミルトニアンには

$$\int d\mathbf{r} \bar{\psi}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (91)$$

として含まれる。(その1) (85) で見たことから、この場合の温度グリーン関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(1, 1') &= G_0(1, 1') + \int d2 \mathcal{G}_0(1, 2) U(2) \mathcal{G}_0(2, 1') \\ &+ \int d2 d3 \mathcal{G}_0(1, 2) U(2) \mathcal{G}_0(2, 3) U(3) \mathcal{G}_0(3, 1') + \dots \end{aligned} \quad (92)$$

のようになる。

実際に測定される物理量を考えるにあたっては、個々の不純物の具体的な分布を知る必要はなく、巨視的な領域において多くの不純物の集団平均を考えれば良い。例えば (92) の右辺第2項の集団平均をとる場合、 $\mathcal{G}_0$  は不純物に依存しないので、 $U(\mathbf{r})$  についての集団平均を考えれば良いことになる。 $U(\mathbf{r})$  のフーリエ展開を

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \quad (93)$$

<sup>31</sup>不純物とは、物質の組成原子と異なる種類の原子や格子欠陥などを指す。いずれにせよ、物質の周期性を乱す局所的ポテンシャルを与えるものを考えている。

とすれば、その集団平均は

$$\begin{aligned} \langle U(\mathbf{r}) \rangle_{\text{ave}} &= \sum_{i, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \langle e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} \rangle_{\text{ave}} \\ &= \sum_{i, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \int \frac{d\mathbf{R}_i}{V} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} \\ &= \sum_{i, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{q}, 0} = N_i u(0) \end{aligned} \quad (94)$$

となる。これは  $U(\mathbf{r})$  の空間平均  $\int d\mathbf{r} U(\mathbf{r})$  に等しく、エネルギー原点をずらすだけの効果しか与えない<sup>32</sup>。そこで  $u(0) = 0$  としても一般性は失われない。

つぎに (92) 右辺第3項を考えてみよう。その場合、

$$\begin{aligned} \langle U(1)U(2) \rangle_{\text{ave}} &= \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} u(\mathbf{q}_1) u(\mathbf{q}_2) e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \\ &\times \sum_{i, j} \langle e^{-i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{R}_i + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{R}_j)} \rangle_{\text{ave}} \end{aligned} \quad (95)$$

を考える必要がある。 $u(0) = 0$  としたので、この平均が意味を持つのは、 $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_j$  かつ  $\mathbf{q}_1 = -\mathbf{q}_2$  のときである。したがって、

$$\langle U(1)U(2) \rangle_{\text{ave}} = N_i \sum_{\mathbf{q}} u(\mathbf{q}) u(-\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (96)$$

となる<sup>33</sup>。

## 5.2 不純物散乱とファインマン図形

さてこのことをファインマン図形で見よう。ある不純物による散乱を図4(a)のように表す。×印が一つの不純物を表し、それによる散乱  $u(\mathbf{q})$  を破線で表している。不純物が  $N_i$  個あるときは、この図形の寄与を  $N_i$  倍する。体積あたりで考えるなら、 $n_i = N_i/V$  倍する。 $u(\mathbf{q})$  の一次の散乱では、 $\mathbf{q} = 0$  のみが値を持つ。つまり、この散乱による粒子の運動量の変化はなく、粒子は元の運動量  $k$  を保つ。ただし  $u(0) = 0$  とするエネルギーの基準

<sup>32</sup>このことはハートリー近似の結果と類似している。その類似性はそれぞれが対応するファインマン図形(図4(a))の構造を見比べればより明確に分かるだろう。

<sup>33</sup>実ポテンシャルの場合は、 $u(-\mathbf{q}) = u^*(\mathbf{q})$  となるので、 $u(\mathbf{q})u(-\mathbf{q}) = |u(\mathbf{q})|^2$  とすることもできる。

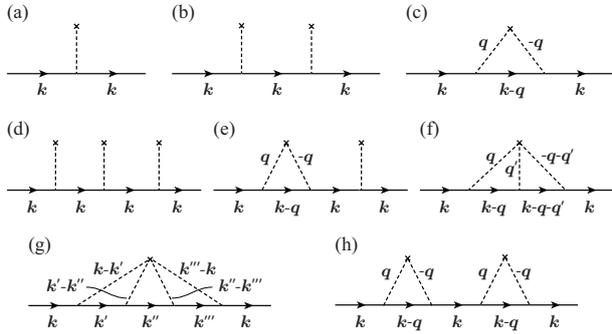


図 4: 不純物散乱を表す運動量表示に基づく図形の例．1 次の図形 (a) の要素を含む (b), (d), (e) は  $u(0) = 0$  より全てゼロとなる．

を採用するので，結果的に図 4(a) の寄与はゼロとなる．

次に二次の散乱を考えた場合，図 4(b) と (c) が考えられるが，(b) は (a) の繰り返しであり，その寄与はゼロである．(c) は単一不純物により二度散乱されることを表しており，前述の  $R_i = R_j$  に対応している．そしてそのときは  $q_1 + q_2 = 0$  の条件が付与されることから，散乱過程全体での粒子の運動量変化はない．このことは高次の散乱でも当てはまり，例えば三次の場合は図 4(f) のようになる．途中の粒子の運動量は，散乱されるたびに運動量を吸い上げられ，それら散乱の運動量の和を取ればゼロとなるように選ばれよ<sup>34</sup>．

四次の散乱になると単一不純物による散乱（図 4(g)）の他に，二つの不純物に二度ずつ散乱される (h) のような散乱も考えられる．この場合，前者は  $n_i^1$  に比例するが，後者は  $n_i^2$  に比例する．

### 5.3 不純物散乱と自己エネルギー

こうした無限次まで続く散乱の効果は自己エネルギーを用いて表すと簡潔に表現できる．例えば，図 4(c) は，不純物散乱部分（図形的には三角の部分）が自己エネルギーに相当し，

$$\mathcal{G}^{(c)} = \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 \quad (97)$$

<sup>34</sup>三次の場合も二次と同様に計算すれば， $e^{-i(q_1+q_2+q_3)\cdot R_i}$  の因子が現れ， $q_1 + q_2 + q_3 = 0$  の条件がつく．

となる．これを用いれば，図 4(h) は

$$\mathcal{G}^{(h)} = \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 \quad (98)$$

のように自己エネルギー  $\Sigma^{(c)}$  を用いて表すことができる．したがって， $\Sigma^{(c)}$  を基本ブロックとして，無限級数和

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\infty^{(c)} &= \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 + \dots \\ &= \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \left[ \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_0 + \dots \right] \\ &= \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma^{(c)} \mathcal{G}_\infty^{(c)} \end{aligned} \quad (99)$$

をとることで，この型の無限次までの散乱を計算することができる．

この考え方は一般の図形に対して拡張することができる．無限次の不純物散乱まで考慮した一般の温度グリーン関数は，不純物の平均を考慮して，

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \rangle_{\text{ave}} &= \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \\ &+ \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \langle \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \rangle_{\text{ave}} \end{aligned} \quad (100)$$

と表すことができる<sup>35</sup>．この方程式をファインマン図形で表せば，図 5 のようになる．ここで，自己エネルギーは一本の  $\mathcal{G}_0$  線を切って二つの図形に分けられないような形になっている必要がある．そうした自己エネルギーのことを既約自己エネルギーという．上の例でもわかるように，図 4(h) は  $\mathcal{G}_0$  を切れれば二つの (c) に分けられ，それは (c) の級数和をとることで考慮されているため， $\Sigma$  に含んでしまうと，二重に勘定してしまうことになる．それを避けるために，既約自己エネルギーだけを  $\Sigma$  として考える．

不純物散乱が弱い場合は，既約自己エネルギーとして二次の項（図 4(c)）のみを考えるだけで十

<sup>35</sup>この表現は（その 1）で見た運動方程式 (98) と等価である．このことは次のようにして確かめることができる．

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma \mathcal{G}$$

の両辺に，左から  $\mathcal{G}_0^{-1}$  をかけて整理すれば，

$$\left( \mathcal{G}_0^{-1} - \Sigma \right) \mathcal{G} = 1$$

となり，これは（その 1）(98) に一致する．また，これらと等価な表現として，さらに右から  $\mathcal{G}^{-1}$  をかけて整理した

$$\mathcal{G}^{-1} = \mathcal{G}_0^{-1} - \Sigma$$

もよく用いられる．

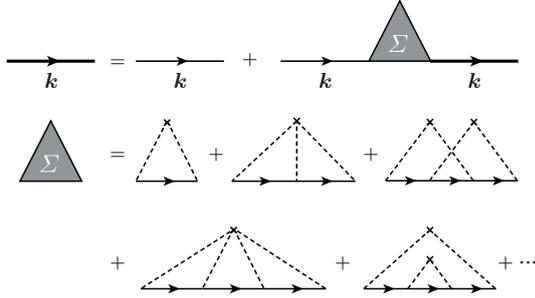


図 5: 不純物散乱の無限次まで考慮した方程式の図形的表現．ここで自己エネルギー  $\Sigma$  には既約な自己エネルギーしか含まれない．

分な近似となる．このとき，

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) &= N_i \sum_{\mathbf{q}} |u(\mathbf{q})|^2 \mathcal{G}_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\varepsilon_n) \\
 &= N_i \sum_{\mathbf{k}'} \frac{|u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{k}'}} \\
 &= -N_i \sum_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \frac{i\varepsilon_n + \xi_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{k}'}} \quad (101)
 \end{aligned}$$

となる．ところで今考えている不純物散乱は，静的な散乱を考えており，電子は  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$  と散乱されるが，その過程においてエネルギーのやりとりはない．そこで  $\sum_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2$  をエネルギー方向と角度方向とに分けて考えることができる．角度依存部分を改めて

$$\frac{\hbar}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{2} N_i \rho_0 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \quad (102)$$

とおけば<sup>36</sup>，自己エネルギーは，

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \frac{\hbar}{2\pi\tau_{\mathbf{k}}} \frac{i\varepsilon_n + \xi'}{\varepsilon_n^2 + \xi'^2} = - \frac{\hbar}{2\tau_{\mathbf{k}}} \frac{i\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|} \quad (103)$$

と求まる<sup>37</sup>． $\tau_{\mathbf{k}}$  は  $\mathbf{k}$  を持つ準粒子の寿命である．これにより (88) で導入した  $\tau_{\mathbf{k}}$  が正当化され，その微視的起源も (102) で明らかになった．

以上をまとめて，不純物散乱を考慮した温度グリーン関数は， $\mathcal{G} = [\mathcal{G}_0^{-1} - \Sigma]^{-1}$  より，

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{k}} + i \operatorname{sgn}(\varepsilon_n) \hbar / 2\tau_{\mathbf{k}}} \quad (104)$$

<sup>36</sup>波数に対する和  $\sum_{\mathbf{k}}$  は次のようにしてエネルギー積分  $\int d\xi$  と角度積分  $\int d\Omega$  に置き換えられる．

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{2\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int k^2 dk \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{\mathcal{V}}{\pi^2} \int k^2 dk \int \frac{d\Omega}{4\pi}$$

ここで  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  は立体角積分である．被積分関数に角度依存性がない場合は， $\int d\Omega / 4\pi = 1$  である．また，被積分関数にスピン依存性がないとし，スピンの和による係数 2 が付いている．エネルギーの基準を化学ポテンシャルにとり， $\xi = \hbar^2 k^2 / 2m$  とすれば，

$$k^2 dk = \frac{1}{2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\xi} d\xi$$

ここで状態密度

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$$

を用いると，

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} = \int d\xi \rho(\xi) \int \frac{d\Omega}{4\pi}$$

となる．実際の計算では， $-dn_{\mathbf{F}}(x)/dx$  などがつき，フェルミ面上の関数のみ取り出すことが多々ある．そこで上の結果で  $\rho(\xi) \rightarrow \rho_0$  とし， $\rho_0$  を積分の外に出してしまう近似もよく用いられる．

<sup>37</sup>分子が  $\xi'$  の項は  $\xi'$  に対して奇関数であるのでゼロとなる．分子が  $i\varepsilon_n$  の積分は留数定理を使えば直ちに積分できる．ただし， $\varepsilon_n$  の正負に気をつける必要がある． $\varepsilon_n > 0$  のとき， $\pm i\varepsilon_n$  の極のうち上半面にある  $+i\varepsilon_n$  を囲む径路を採用し，

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \frac{1}{\xi'^2 + \varepsilon_n^2} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \frac{1}{(\xi' - i\varepsilon_n)(\xi' + i\varepsilon_n)} = \frac{\pi}{\varepsilon_n}$$

となる． $\varepsilon_n < 0$  のとき，上半面にある極は  $-i\varepsilon_n$  であるから，

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \frac{1}{(\xi' - i\varepsilon_n)(\xi' + i\varepsilon_n)} = -\frac{\pi}{\varepsilon_n}$$

と符号を変える．双方合わせて，

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \frac{1}{\xi'^2 + \varepsilon_n^2} = \frac{\pi}{|\varepsilon_n|}$$

である．

として与えられる．これを解析接続した遅延・先進グリーン関数は，

$$G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i\hbar/2\tau_{\mathbf{k}}} \quad (105)$$

$$G^A(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} - i\hbar/2\tau_{\mathbf{k}}} \quad (106)$$

である．このときのスペクトル関数は (その1) (41) より，次のように与えられる．

$$A(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{\hbar/\tau_{\mathbf{k}}}{(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})^2 + \hbar^2/4\tau_{\mathbf{k}}^2} \quad (107)$$

これを見れば明らかにスペクトル関数が  $\hbar/2\tau_{\mathbf{k}}$  だけ幅を持つことがわかる．このように，スペクトル関数は (その1) で見たように相互作用によっても幅を持つが，不純物散乱によっても幅を持つ．

## 6 不純物散乱とバーテックス補正

前節では自己エネルギーに対する不純物散乱の効果を見た．一粒子グリーン関数に対する不純物散乱の影響を調べる場合はこれで十分である．しかし電気伝導度などの物理量を久保公式に基づいて計算するには，相関関数 (あるいは二粒子グリーン関数) を計算する必要があった．最終目標が物理量に対する不純物散乱の影響を調べることであれば，相関関数に対する不純物散乱の影響を調べる必要がある．このことは，§4 (60) で二粒子グリーン関数を一粒子グリーン関数の単純な積とする近似を採用したが，それを超えた近似に進む，という意味合いを持つ．

相関関数における不純物散乱を考慮したファインマン図形を改めて描き出せば，図6のようになる．このうち (a)-(c) は，前節の自己エネルギー補正を加えることで考慮できる．一方，(d)-(f) のように，不純物が両側のグリーン関数に影響を及ぼす効果は，いくら自己エネルギーを正確に評価しても取り込むことはできない．そのような補正は，バーテックス<sup>38</sup>に対する補正とみなすことができるので，バーテックス補正 (頂点補正) とよばれ，特に輸送現象などでは重要な補正を与える．

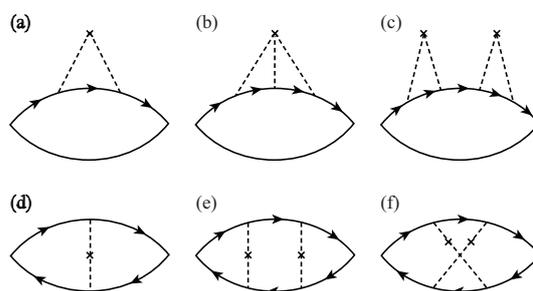


図6: 相関関数に対する不純物散乱の例．(a)-(c) は自己エネルギー補正．(d)-(e) はバーテックス補正．

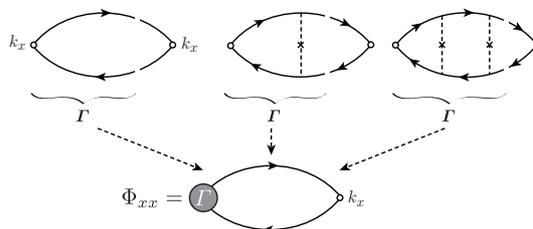


図7: 相関関数に対する不純物散乱の高次項をバーテックスで表す ( (108) に対応する ) 片方のバーテックスは  $k_x$  のままで残しておかないと，二重取り込みになってしまう．

ここではまず最も基本的なバーテックス補正として，図6(d)の型をとりあげる．図6(e)のように続く高次項は，自己エネルギーと同様の級数和をとることで無限次まで取り込むことができる．電気伝導度の場合，温度相関関数は (60) で与えられたので，バーテックス補正についての方程式は次

$$\Gamma = \text{bare vertex} + \Gamma \text{ with self-energy correction}$$

図8: バーテックス補正に対する無限級数和 ( (109) に対応する )

<sup>38</sup>vertex. 日本語では，頂点，結節点，などと訳されるが，「バーテックス」とそのまま呼ばれることが多い．

の形で与えられる．

$$\Phi_{xx}(i\omega_\lambda) = \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2 \mathcal{V}} \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, n} k_x \Gamma_x(\mathbf{k}) \times \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \quad (108)$$

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \mathbf{k} + N_i \sum_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \Gamma(\mathbf{k}') \times \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \quad (109)$$

これらの方程式をファインマン図形で表したのが図 7, 8 である．ここでパーテックスは  $\Gamma$  で表し，今の場合ベクトル量である<sup>39</sup>．ただし，上式で他にベクトル量であるのは  $\mathbf{k}$  だけなので，

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \gamma \mathbf{k} \quad (110)$$

とすることができる．よって  $\Gamma$  に対する方程式 (109) は， $\gamma$  に対する方程式

$$\gamma = 1 + \frac{\gamma}{2\pi} \frac{\hbar}{\tau'} \int d\xi \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \quad (111)$$

$$\frac{\hbar}{\tau'} = \frac{1}{2} N_i \rho_0 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2} \quad (112)$$

に置き換えることができる<sup>40</sup>．

(111) の  $\xi$  に関する積分は，留数定理を用いて次のように実行することができる．積分したい関数は  $\eta(\varepsilon_n) = \text{sgn}(\varepsilon_n) \hbar / 2\tau_k$  を用いて，

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi + i\eta(\varepsilon_n)} \times \frac{1}{i(\varepsilon_n - \omega_\lambda) - \xi + i\eta(\varepsilon_n - \omega_\lambda)} \quad (113)$$

である．ここでは  $\varepsilon_n$  に対する和をとる必要はなく，ただの変数と見なせば良い．被積分関数は  $i\varepsilon_n +$

<sup>39</sup> パーテックスを  $\Gamma(\mathbf{k}; i\varepsilon_n, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)$  と振動数依存性を含めて記述する方がより正確であるが，今の場合，振動数の引数は常にこの形が保たれるので省略した．

<sup>40</sup> (109) に  $\Gamma(\mathbf{k}) = \gamma \mathbf{k}$  を代入すれば，

$$\gamma \mathbf{k} = \mathbf{k} + N_i \sum_{\mathbf{k}'} \gamma \mathbf{k}' |v|^2 \mathcal{G} \mathcal{G}$$

となる．この段階ではベクトルの方程式であるが，両辺と  $\mathbf{k}$  の内積をとり， $k^2 = |\mathbf{k}|^2$  で割ると，

$$\gamma = 1 + N_i \sum_{\mathbf{k}'} \gamma \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2} |v|^2 \mathcal{G} \mathcal{G}$$

となる．

$i\eta(\varepsilon_n)$ ,  $i(\varepsilon_n - \omega_\lambda)$  に極を持つ．この積分が値を持つのは，二つの極が実軸を挟んで反対側にあるときだけである． $\omega_\lambda > 0$  だとすれば， $\varepsilon_n > 0$  かつ  $\varepsilon_n - \omega_\lambda < 0$  がその条件となる．その場合において，(113) の積分を実行し， $i\omega_\lambda \rightarrow \omega + i\delta$  の解析接続の後  $\omega \rightarrow 0$  の極限をとれば，その値は  $2\pi / (\hbar / \tau_k)$  となる．その結果， $\gamma$  に対する方程式 (111) は

$$\gamma = 1 + \gamma \frac{\tau_k}{\tau'} \quad (114)$$

となるから，これを解いて

$$\gamma = \frac{1}{1 - \tau_k / \tau'} = \frac{\tau_{\text{tr}}}{\tau_k} \quad (115)$$

を得る．ここで

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{\tau_{\text{tr}}} &= \frac{\hbar}{\tau_k} - \frac{\hbar}{\tau'} \\ &= \frac{1}{2} N_i \rho_0 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \left( 1 - \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2} \right) \end{aligned} \quad (116)$$

を新たに輸送緩和時間として定義した．

以上でパーテックス補正の計算は完了した．結果を元の相関関数に代入すると，

$$\begin{aligned} \Phi_{xx}(i\omega_\lambda) &= \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2 \mathcal{V}} \frac{1}{\beta} \left[ 1 + \left( \frac{\tau_{\text{tr}}}{\tau} - 1 \right) \theta(\varepsilon_n) \theta(\omega_\lambda - \varepsilon_n) \right] \\ &\times \sum_{\mathbf{k}, n} k_x^2 \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \end{aligned} \quad (117)$$

とすることができる．階段関数  $\theta(x)$  の部分で  $\varepsilon_n > 0$  かつ  $\varepsilon_n - \omega_\lambda < 0$  の条件を課しており，これを満たさないときは上で考えたパーテックス補正が効かない．ところでこの条件は §4 でみた経路  $C_2 + C_3$  に対応している．つまり，上記パーテックス補正は  $G^R G^A$  の項にしか寄与しないことになる．ただ，もともと (89) の結果には  $C_2 + C_3$  の寄与しか含まれていなかったため，最終結果は単に係数  $\tau_{\text{tr}} / \tau$  を乗じれば良い．以上をまとめると，パーテックス補正を考慮した結果，電気伝導度は次のように修正される．

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2 \tau_{\text{tr}} \tilde{\rho}_0}{m \rho_0} \quad (118)$$

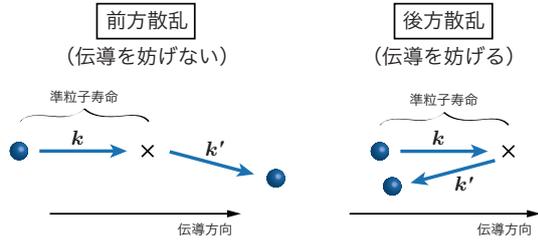


図 9: 前方散乱と後方散乱．不純物に散乱されるまでの平均時間が準粒子の寿命．準粒子寿命は散乱角と関係ない．一方，電気伝導については前方散乱は寄与するが，後方散乱は寄与しない．

最後に輸送緩和時間  $\tau_{tr}$  の物理的意味について触れておく． $\tau_{tr}$  に含まれる因子  $(1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'/k^2)$  は，不純物散乱による運動量の変化（散乱角）について重みをつける働きをしている<sup>41</sup>．フェルミ面が等方的な場合はこの因子を  $1 - \cos \chi$  とすることができる（ $\chi$  は  $\mathbf{k}$  と  $\mathbf{k}'$  の間の角度）．散乱角が小さい場合（前方散乱）は  $\cos \chi \sim 1$  であるので， $1/\tau_{tr}$  に寄与しない．一方，散乱角が大きい場合（後方散乱）は  $\cos \chi \sim -1$  で  $1/\tau_{tr}$  に対して最大の重みを与える．換言すれば，前方散乱は電気伝導を妨げず，後方散乱は伝導を妨げることになる．

強調したいことは，このような緩和時間における散乱角依存性は，パーテックス補正を考慮して初めて現れたという点である．自己エネルギーに対して不純物散乱の寄与を考える限りでは，緩和時間に散乱角依存性は現れなかった．これは，どのような方向に散乱されようとも散乱されたことに変わりはなく，その時点で準粒子の寿命は尽きていることで理解されよう（図 9）．これに対し電気伝導では，伝導方向に散乱されればそのまま伝導を担うことができるが，反対方向に散乱されれば伝導に寄与しない（抵抗になる）ことは直感的にも頷ける．そのような散乱角によって異なる寄与については物理量に対応する相関関数全体を考えて（パーテックス補正を考慮して）初めて捉えることができるのである．

このように，一言で緩和時間といっても，見て

<sup>41</sup>この因子自体はボルツマン方程式に基づいて半古典的に導くこともできる．ただしここではその因子を，取り込んだ散乱過程も明確にした上で，完全に量子論的に導き出した

いる物理量によって異なる意味合いを持つ．複数の実験を見比べる場合，緩和時間の意味の違いに注意する必要がある．

## （その 2）のまとめ

**久保公式** 久保公式は，まず密度行列  $\rho$  の運動方程式からその時間変化  $\rho(t)$  を求め，

$$\langle B(t) \rangle = \text{Tr} [\rho'(t)B] \quad (119)$$

の関係を用いて観測量  $B$  の集団平均の時間変化を求める．ここで  $\rho'$  は外場  $A$  の一次に限ることで線形応答を得る．観測量の時間依存性を

$$\langle B(t) \rangle = B(\omega)e^{-i\omega t} \quad (120)$$

とすれば，その係数  $B(\omega)$  は相関関数  $\Phi^R(\omega)$  を用いて

$$B(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi^R(\omega) - \Phi^R(0)] \quad (121)$$

となる．このとき相関関数は，外場と観測量に対する演算子  $A$  と  $B$  を用いて，

$$\Phi^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle B(t) \dot{A}(0) - \dot{A}(0) B(t) \rangle \quad (122)$$

で与えられる．一連の結果はハミルトニアンや近似によらない厳密なもので，これらを総称して久保公式とよぶ．

**相関関数とグリーン関数**  $A$  と  $B$  はそれぞれ生成消滅演算子の対  $\bar{\psi}\psi$  を含む．したがって相関関数は， $\langle \bar{\psi}(\tau)\psi(\tau)\bar{\psi}(0)\psi(0) \rangle$  の形を持つことから，二粒子グリーン関数に相当する．二粒子グリーン関数を二つの一粒子グリーン関数で表す近似の範囲内では，電気伝導度に対する温度相関関数を

$$\begin{aligned} \Phi_{xx}(i\omega_\lambda) &= \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2 \mathcal{V}} \\ &\times \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, n} k_x^2 \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \end{aligned} \quad (123)$$

とすることができる．

**松原振動数の和と解析接続** ある関数  $F(i\varepsilon_n)$  について松原振動数の和をとるには、フェルミ分布関数の極が松原振動数  $i\varepsilon_n$  と一致することを利用した、

$$\frac{1}{\beta} \sum_n F(i\varepsilon_n) = - \oint_C \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) F(z) \quad (124)$$

の関係をを用いれば良い。

輸送現象の場合、 $\mathcal{G}(i\varepsilon_n)\mathcal{G}(i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)$  に対する松原振動数の和が頻繁に現れる。グリーン関数の解析性の違いから、最終的に四つの経路  $C_1 \sim C_4$  に沿った  $-\infty$  から  $\infty$  に至る実数積分へと解析接続される (図 3(b))。

以上の手順はフェルミ粒子の解析接続  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon$  である。そして最後に外部振動数 (ボーズ粒子) の解析接続  $i\omega_\lambda \rightarrow \omega + i\delta$  を行う。この二段階の解析接続の順序を決して変えてはいけない。

上の手順により、

$$\mathcal{K}(i\omega_\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \quad (125)$$

は

$$\begin{aligned} K(\omega) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i} n_F(\varepsilon) \\ &\times \left[ G^R(\varepsilon + \hbar\omega) G^R(\varepsilon) - G^R(\varepsilon + \hbar\omega) G^A(\varepsilon) \right. \\ &\left. + G^R(\varepsilon) G^A(\varepsilon - \hbar\omega) - G^A(\varepsilon) G^A(\varepsilon - \hbar\omega) \right] \end{aligned} \quad (126)$$

へと解析接続される。

**電気伝導度** 電気伝導度は

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\hbar e^2}{\pi \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k_x^2}{m^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left( - \frac{dn_F(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \\ &\times \left[ G^R(\mathbf{k}, x) G^A(\mathbf{k}, x) - \text{Re} \{ G^R(\mathbf{k}, x) \}^2 \right] \end{aligned} \quad (127)$$

で与えられる。 $G^R G^A$  は  $C_2 + C_3$ ,  $\text{Re} \{ [G^R(\mathbf{k}, x)]^2 \}$  は  $C_1 + C_4$  からの寄与である。前者は散逸的 (dissipative) であり、後者は分散的 (dispersive) である。

遅延グリーン関数の一般形として

$$G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{a^{-1}\varepsilon - b^{-1}\xi_{\mathbf{k}} + i\Sigma''} \quad (128)$$

を考えると、 $C_2 + C_3$  と  $C_1 + C_4$  からの寄与はそれぞれ

$$G^R G^A \propto \frac{1}{\Sigma''} \quad (129)$$

$$\text{Re} \{ [G^R(\mathbf{k}, 0)]^2 \} \sim 0 \quad (130)$$

であることが示せる。 $k$  積分を実行して最終的に、

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2 \tau_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_0}{m \rho_0} \quad (131)$$

を得る (状態密度の自己エネルギーによるくりこみ  $\tilde{\rho}_0 = b\rho_0$  を反映してある。) ここで準粒子寿命  $\tau_{\mathbf{k}}$  を

$$\tau_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2\Sigma''} \quad (132)$$

で定義している。

**不純物散乱と自己エネルギー** 不純物散乱を考慮すると自己エネルギーは

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = - \frac{\hbar}{2\tau_{\mathbf{k}}} \frac{i\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|} \quad (133)$$

となることが導かれる。このとき準粒子寿命  $\tau_{\mathbf{k}}$  は不純物数を  $N_i$  とすれば

$$\frac{\hbar}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{2} N_i \rho_0 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \quad (134)$$

で与えられる。

これにより不純物散乱を考慮した温度グリーン関数と遅延グリーン関数はそれぞれ、

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{k}} + i \text{sgn}(\varepsilon_n) \hbar / 2\tau_{\mathbf{k}}} \quad (135)$$

$$G^R(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i\hbar / 2\tau_{\mathbf{k}}} \quad (136)$$

で与えられる。

**不純物散乱とパーテックス補正** 輸送係数は二粒子グリーン関数で与えられる。輸送現象では、それら二粒子間の相関が重要な役割を果たす。それを考慮するのがパーテックス補正である。

パーテックス補正を考慮すると緩和時間は

$$\frac{\hbar}{\tau_{\text{tr}}} = \frac{1}{2} N_i \rho_0 \int d\Omega_{\mathbf{k}'} |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \left(1 - \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2}\right) \quad (137)$$

に修正される．この  $\tau_{\text{tr}}$  を輸送緩和時間とよぶ．自己エネルギー，パーテックス補正双方を考慮した結果として，最終的に電気伝導度は

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2 \tau_{\text{tr}} \tilde{\rho}_0}{m \rho_0} \quad (138)$$

と修正される．

パーテックス補正により，輸送緩和時間には散乱角依存性  $(1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'/k^2)$  が含まれる．これから，前方散乱は伝導に寄与するが，後方散乱は伝導に寄与しないことがわかる．このことは散乱角依存性のない準粒子寿命  $\tau_k$  と対照的である．

## 補遺：久保公式に関するいくつかの注意

本稿では，久保公式とグリーン関数法に基づく物理量の具体的な計算に関する全行程を見た．その他の物理量を計算するにあたっては本質は同じである．あとはさまざまな具体例を見ることで，この本質をしっかりと定着させることが本セミナーの残りの目的である．

その前に，久保公式に関するいくつかの注意を述べておく．

### どれが“久保公式”か

久保公式を用いて計算をしてみようとしたとき，いったいどの式が久保公式なのか，探すのに苦労した経験をもつ読者もおられよう．また，ある教科書にはこれが久保公式と書いてあるのに，別の教科書にはまた少し違った式を久保公式と呼んでおり<sup>42</sup>，どれを用いれば良いのか戸惑ってしまう

<sup>42</sup>久保公式を Green-Kubo 公式とよぶ文献もしばしば見かけるが，久保の分類によると Green の理論は近似論であって，模型や近似に依存しない久保公式とは区別されるべきものと考えられる．

かもしれない<sup>43</sup>．もちろんどの公式もその本質は同じなのであるが，適用する対象やその後の計算に便利のように書き換えられているので，さまざまな表現を持つに至っている．

本文でも繰り返し述べたように，久保による「非平衡の量子統計力学」は，線形応答理論の枠組みを規定するもので，厳密である．枠の中に入れるべき具体的な計算は模型や近似に依存し，久保理論の範囲には含まれない．こうした事情を鑑み，本稿では，久保理論に本質的な厳密性を保ちつつも簡潔な表現である，(24), (30), (33) を久保公式と呼んでいる．

### 注意を要する表式

いくつかある“久保公式”の表現の中でも，次のような形を「公式」と捉え，具体的な計算を行おうとする場合は，その使用に十分な注意を要する．

$$\Phi(\omega) = \frac{2\hbar^2 e^2}{m^2 V} \sum_{m,n} |\langle m | k_x | n \rangle|^2 \frac{n_F(E_m) - n_F(E_n)}{E_m - E_n + \hbar\omega + i\delta} \quad (139)$$

ここで  $\delta$  は正の無限小量で，最終的に  $\delta \rightarrow 0$  とすべきものであり，その場合においてこの式自体は間違っていない．しかしこの表式では不純物散乱などを特に考慮したわけではなく，電気伝導度をこのまま計算してしまえば，金属では  $\sigma \rightarrow \infty$  となってしまう．そこでこの発散の回避策として， $\delta$  を不純物散乱による緩和時間の逆数のようにみなし， $\delta > 0$  としてしまうと，これは間違いである．§5 で見たように，準粒子寿命は一つのグリーン関

<sup>43</sup>参考までに手元にある幾つかの教科書が“久保公式”と呼んでいる式を列挙してみよう．

$$B(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega\tau} \text{Tr}(e^{-i\mathcal{H}\tau/\hbar} [A, \rho] e^{i\mathcal{H}\tau/\hbar} B) d\tau \quad (\text{阿部})$$

$$\delta\langle M \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_0^t \text{Tr} \left\{ \rho_0 [\mathcal{H}'(t'), \hat{M}(t)] \right\} dt' \quad (\text{Rickayzen})$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega V} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega(t-t')} \langle \psi | [j_\alpha^\dagger(\mathbf{q}, t), j_\beta(\mathbf{q}, t')] | \psi \rangle + i \frac{n_0 e^2}{m\omega} \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{Mahan})$$

$$\Delta A(t) = - \int_{-\infty}^\infty dt' f(t') \langle \langle A(t) B(t') \rangle \rangle^R \quad (\text{Zagoskin})$$

数の中に  $1/(\varepsilon - \xi + i\hbar/2\tau_k)$  の形で含まれるのであって、二つのグリーン関数をまとめて  $1/(E_m - E_n + \hbar\omega + i\hbar/2\tau_\times)$  のようには決してならない。そもそもこうしてしまうと、そこでの  $\tau_\times$  は準粒子 (エネルギー  $E_{m,n}$ ) の寿命なのか、パーテックス補正による緩和時間なのかも明確でない。

(139) をそのまま使うのであれば、 $\delta \rightarrow 0$  としても発散せず有限になる量 (絶縁体における伝導度など) でしか安心して使えない。

### お詫びと訂正

既掲、誌上セミナー「久保公式とグリーン関数法の実践的基礎 (その1)」において、誤記・誤植がありました。お詫びするとともに、訂正いたします。これまでに分かっている点を修正した最新版は <http://www.kookai.pc.uec.ac.jp/kotaibutsuri.html> にてご確認いただけます。

### 参考文献

- [1] R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
- [2] R. Kubo and K. Tomita: J. Phys. Soc. Jpn. **9** (1954) 888.
- [3] 中野藤生: 物性論研究 **84** (1955) 25.
- [4] 中野藤生: 物性論研究 **88** (1955) 53.
- [5] H. Nakano: Prog. Theor. Phys. **15** (1956) 77.
- [6] 中嶋貞雄: 物性論研究 **88** (1955) 45.
- [7] 久保亮五: 物性論研究 **89** (1955) 72.
- [8] 久保亮五: 物性論研究 **89** (1955) 79.
- [9] 久保亮五: 物性論研究 **89** (1955) 99.
- [10] J. v. Neumann: Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. Kl. (1927) 245.
- [11] H. Fukuyama, H. Ebisawa, and Y. Wada: Prog. Theor. Phys. **42** (1969) 494.
- [12] H. Fukuyama: Prog. Theor. Phys. **42** (1969) 1284.
- [13] S. Nakajima and M. Watabe: Prog. Theor. Phys. **29** (1963) 341.
- [14] J. C. Swihart, D. J. Scalapino, and Y. Wada: Phys. Rev. Lett. **14** (1965) 106.