

# 久保公式とグリーン関数法の実践的基礎 (その 3)

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 実践的課題として

これまでで久保公式とグリーン関数とを用いた物理量の計算法について, 基本的なところは全て学んだことになる. あとはこれを各問題に対して応用するだけである. そのため, 一般的な教科書ではここまでの内容を扱って終えることがほとんどである. しかし, これから読者が実際に直面する最先端の課題に取り組むためには, やはりもう少し基礎体力を養う必要があるだろう. それには実践的な問題に数多く当たることが一番である. 本誌上セミナーの目的はまさにそこにある.

本稿では, 異常ホール効果を扱う. “通常”ホール効果を扱っていないのに, いきなり“異常”? と不思議に思われるかもしれない. 実は, 久保公式とグリーン関数法の適用という点では, 通常のホール効果より異常ホール効果の方が容易である. 前者は外場として電場と磁場を加えるのに対し, 後者は電場のみだからである. ただし, ハミルトニアンに自由電子のときには現れなかった項—スピン軌道結合—が加わることで, 豊かで深い物理が現れる. 異常ホール効果の計算を通して, ハミルトニアンに新しい項を導入し, それを摂動論に基づいて扱う方法を学ぶこともできる. グリーン関数とファインマン図形に基づく摂動展開の方法は, 物性理論のいたるところで登場する, 重要な理論手法である.

異常ホール効果の鍵となるスピン軌道結合は, 固体物理学においてその重要性が近年改めて再認識されている. 本稿では, 異常ホール効果の計算を通して, スピン軌道結合の対称性についても学ぶ. さらに異常ホール効果は, ベリー位相という概念を通して, 量子ホール効果をはじめとする“トポロジカルな”輸送現象とも繋がる<sup>1)-3)</sup>. そうした深い物理のエッセンスは Karplus と Luttinger (KL) による異常ホール効果の理論に内包されている. 本稿では, KL 理論を久保公式とグリーン関数を用い

て簡潔にまとめ直し, いわゆるベリー曲率を用いた表式との関連性も明らかにする.

## 2 異常ホール効果

異常ホール効果とは, 磁性体中のスピン軌道結合によって, 加えた電場と垂直方向に起電力が生じる現象である. 電場と磁場を加える通常のホール効果はローレンツ力を考慮するだけである程度説明できるのに対し, そうした議論では異常ホール効果は全く説明できないため, その謎が解き明かされるまで, ずいぶんな年月を要した. 特に, それまで輸送現象の標準理論であったボルツマン方程式に基づく理論では, 異常ホール効果を十分記述できないことが問題をより難解にした.

初めて強磁性体でホール効果を Hall が観測したのは 1881 年のことである<sup>4)</sup>. その後, Smith と Sears によって, 強磁性体におけるホール起電力  $E_H$  は二成分に分けられることが明らかとなった<sup>5)</sup>. それらは

$$E_H = R_0 B + R_s M_s \quad (1)$$

と表される. 第一の成分は外部磁場  $B$  に比例するもので, 第二の成分は自発磁化  $M_s$  に比例する. その後 Pugh らによって,  $R_0$  は通常のホール効果と同じものであり, 異常ホール係数とよばれる  $R_s$  は,  $R_0$  よりずっと大きく, 温度にも大きく依存することが示された<sup>6)</sup>. 異常ホール係数の起源を巡って様々な研究が進められたが, 中でも Karplus と Luttinger によるスピン軌道結合を起源とする理論<sup>7)</sup> は, 異常ホール効果研究における金字塔である. Karplus-Luttinger (KL) の理論では, 異常ホール効果の起源を自発磁化と伝導電子が持つスピン軌道結合におく. 伝導を担っている電子と磁化を生んでいる電子は同一起源 (遷移金属の場合 d 電子) とみなす. KL 理論で与えられるホール伝導度  $\sigma_{xy}$  は

不純物散乱に依らず，物質固有の電子状態によって決定される．このことから，KL の機構は内因性 (intrinsic) とよばれる．これに対し，不純物散乱による外因性 (extrinsic) の寄与も現実の物質においては重要となるが，詳しいことは他の解説 1)–3), 8)–10) およびその引用文献に譲ることにし，ここでは触れない．

### 3 久保公式の適用

本連載の (その 2) で既に述べたように，久保公式はハミルトニアン of 具体的内容や近似によらず，線形応答の範囲で厳密に成り立つ一般公式である．換言すると，ハミルトニアンを決めてしまえば，後は機械的に計算を進めて物理量が求まる．したがって，考えたい現象の核心を含むハミルトニアンを見抜くことが非常に重要な作業となる．

Karplus と Luttinger は異常ホール効果の核心を次のハミルトニアンで記述した．

$$H = H_0 + H_{\text{so}} \quad (2)$$

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (3)$$

$$H_{\text{so}} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{M_s} \mathbf{M} \times \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \quad (4)$$

ここで  $H_0$  は結晶ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  中を運動する電子のハミルトニアン， $H_{\text{so}}$  はスピン軌道結合ハミルトニアンである．通常，スピン軌道結合といえば， $(\hbar/4m^2c^2)\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}$  の形で与えられる．今対象としている系では，電子が磁化方向にスピン分極しており，そのスピン磁気モーメントを  $M$ ，電子がすべて同じ方向に揃った時の磁化を  $M_s$  とし， $\boldsymbol{\sigma} \rightarrow M/M_s$  の置き換えを行い，上記  $H_{\text{so}}$  を導入している．

久保公式に基づく計算に必要な温度相関関数は一般に，

$$\Phi(i\omega_\lambda) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda\tau} \langle T_\tau \{ B(\tau) \dot{A}(0) \} \rangle \quad (5)$$

で与えられる．ホール伝導度に対応する温度相関関数も (その 2) と同じようにして求めることができる．ただし今の場合，ハミルトニアンに  $H_{\text{so}}$

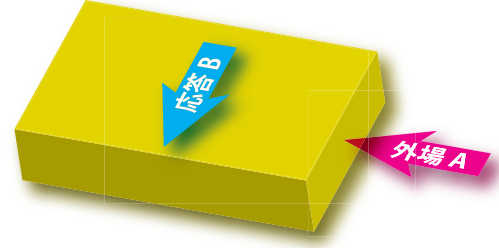


図 1: 線形応答のイメージ．異常ホール効果の場合，外場  $A$  として電場，応答  $B$  として電場に垂直方向の電流を考える．

が加わっていることに気をつけて計算を進める必要がある．

ここで考えている状況を再度整理しておこう (図 1)．物理量を観測することは，対象に外場を加えてその応答を観測することであった．いま考えている物理は異常ホール効果であるが，観測は通常の電気伝導 (ホール伝導) と同じである．すなわち，外場  $A$  として時間変動する電場を考え，観測量  $B$  として電流密度 (単位体積あたりとする) を考える．

$$A = e \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E} \quad (6)$$

であるので，その時間微分  $\dot{A}$  はハイゼンベルグ方程式から

$$\dot{A} = -\frac{i}{\hbar} [A, H] \quad (7)$$

によって与えられることまではこれまでと同じである．ただし，このハミルトニアンが (2) で表現したように， $H_0$  に加えて  $H_{\text{so}}$  を含む点が新しい．その中身を具体的に書き下せば，

$$\begin{aligned} \dot{A} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_i \left[ e \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E}, \frac{p_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \mathbf{a}_{\text{so}}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{p}_i \right] \\ &= \frac{e}{m} \sum_i \{ \mathbf{p}_i + m \mathbf{a}_{\text{so}}(\mathbf{r}_i) \} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (8)$$

となる．ここで

$$\mathbf{a}_{\text{so}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{M_s} \mathbf{M} \times \nabla V(\mathbf{r}) \quad (9)$$

であり,  $[x, p_x] = i\hbar$ ,  $[x, p_x^2] = 2i\hbar p_x$  を用いた. ハミルトニアン (2) に対して全電流は

$$\mathbf{J} = \mathbf{j} + \mathcal{J} \quad (10)$$

$$\mathbf{j} = \frac{e}{m} \sum_i \mathbf{p}_i \quad (11)$$

$$\mathcal{J} = \frac{e}{m} \sum_i \left[ \frac{\hbar}{4mc^2} \frac{1}{M_s} \mathbf{M} \times \nabla V(\mathbf{r}) \right] \quad (12)$$

と与えられる<sup>1</sup>.

ホール伝導度に対応する温度相関関数は,

$$\Phi_{xy}(i\omega_\lambda) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \{ J_x(\tau) J_y(0) \} \rangle \quad (13)$$

となる (その2) でも行ったように, この温度相関関数を一粒子グリーン関数を用いて表せば,

$$\Phi_{xy}(i\omega_\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\ell\ell'} \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) J_x^{\ell\ell'} \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) J_y^{\ell'\ell} \quad (14)$$

である (A.1 参照). ここで  $H_0$  を対角化する表示としてプロット関数を基底にとっており,  $\ell$  はプロットバンドの指標を表し,

$$J_\mu^{\ell\ell'} = \langle \ell | J_\mu | \ell' \rangle \quad (15)$$

である. 今の場合, グリーン関数の波数  $k$  は常に保存しているのでこれを明記しないが, 常に波数の和  $\sum_k$  を伴っているものと理解されたい.

### 3.1 松原振動数の和をとる

KL 理論が扱う内因性の寄与は不純物散乱に依存せず, 不純物散乱のない完全結晶でも有限の値をとり, 発散しない. 完全結晶に対する松原振動数の和は容易に取ることができるので, 先に済ませておく. 完全結晶におけるグリーン関数は

$$\mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_\ell} \quad (16)$$

<sup>1</sup>電流はベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  を用いて  $\mathbf{J} = -\partial H / \partial (\mathbf{A}/c)$  で定義することができる. 電磁場中では  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c$  となるので, 形式的には電磁場のない場合のハミルトニアンを用いて  $\mathbf{J} = e\partial H / \partial \mathbf{p}$  として電流を得ることができる ( $e$  は粒子の電荷).

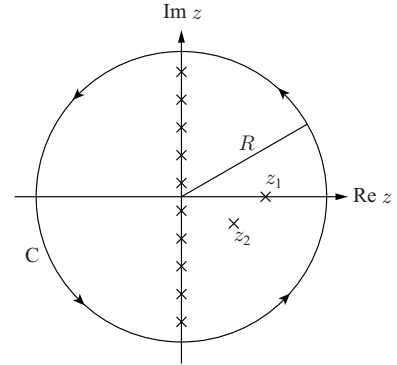


図 2: 積分経路 C とそこに含まれる極.

と与えられる. (14) で松原振動数の関与する項は,

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(2)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \\ &\equiv \frac{1}{\beta} \sum_n F(i\varepsilon_n) \end{aligned} \quad (17)$$

である. ここで (その2) でも取り上げた次の積分を考える.

$$I = - \oint_C \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) F(z) \quad (18)$$

$$n_F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \quad (19)$$

積分経路 C は  $n_F(z)$  と  $F(z)$  の極を全て含む経路とする (図 2). 関数  $F(z)$  は  $z_1 = \xi_\ell$  と  $z_2 = \xi_{\ell'} - i\omega_\lambda$  とともに極を持つ. それぞれの留数は,

$$\text{Res } F(z_1) = - \frac{n_F(\xi_\ell)}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell'}} \quad (20)$$

$$\text{Res } F(z_2) = \frac{n_F(\xi_{\ell'})}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell'}} \quad (21)$$

であるから<sup>2</sup> (その2) (64) の関係と合わせて,

$$I = \frac{1}{\beta} \sum_n F(i\varepsilon_n) - \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell'}} \quad (22)$$

となる ( $n_F(\xi_\ell) \rightarrow n_F^\ell$  と略記した.) ところで, この積分経路 C の半径を無限大に取れば, その周回積

<sup>2</sup> $\omega_\lambda$  はボーズ粒子に対する松原振動数であるので,  $n_F(x + i\omega_\lambda) = n_F(x)$  の関係が成り立つ.

分  $I$  の値はゼロになるはずである．このことから，

$$\boxed{\frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) = \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell'}}}$$
(23)

が導かれる．上の形から，バンド内  $\ell = \ell'$  の寄与は厳密にゼロであることが分かる．したがって以降では， $\ell$  と  $\ell'$  に関する和は  $\ell \neq \ell'$  の場合のみを考える．この公式にさらに解析接続  $i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta$  を施し， $\hbar\omega$  の 1 次を取り出せば，

$$S_1^{(2)}(\omega) = -\hbar\omega \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \quad (24)$$

となる．ここで  $\omega_{\ell\ell'} = \xi_\ell - \xi_{\ell'}$  とした．以上より，

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{i\omega} [\Phi_{xy}(\omega + i\delta) - \Phi_{xy}(0 + i\delta)] \quad (25)$$

で与えられるホール伝導度は

$$\boxed{\sigma_{xy} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} J_x^{\ell\ell'} J_y^{\ell'\ell}}$$
(26)

と表される．この結果は，例えば

$$\sigma_{xy} = e^2 \hbar \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} \left( n_F^\ell - n_F^{\ell'} \right) \text{Im} \frac{\langle \ell | v_x | \ell' \rangle \langle \ell' | v_y | \ell \rangle}{(\xi_\ell - \xi_{\ell'})^2} \quad (27)$$

のように表記されたりもする<sup>3), 10)</sup>．これら是一つの公式と見ることもできるが，このままではスピン軌道結合の重要な情報を含む行列要素  $J_x^{\ell\ell'} J_y^{\ell'\ell}$  の中身が分からず，具体的に計算するには向かない．さらに計算を進め，バンド計算などから異常ホール伝導度を直接求められる形にする．

### 3.2 行列要素の計算

(その 2) では，自由電子に対する電気伝導度を求めたため，特にバンドという概念は登場しなかった．一方，異常ホール効果では，バンドの概念，特に異なるバンド間の行列要素が重要になる．電流演算子は，本来の速度の定義  $v = dx/dt$  に立

ち戻り，さらにハイゼンベルグの運動方程式を用いることによって次のように表すことができる<sup>3)</sup>．

$$\begin{aligned} J_\mu^{\ell\ell'} &= e \langle \ell | v_\mu | \ell' \rangle = \frac{ie}{\hbar} \langle \ell | [\mathcal{H}, x_\mu] | \ell' \rangle \\ &= \frac{ie}{\hbar} \langle \ell | (\mathcal{H} x_\mu - x_\mu \mathcal{H}) | \ell' \rangle = \frac{ie}{\hbar} \omega_{\ell\ell'} \langle \ell | x_\mu | \ell' \rangle \end{aligned} \quad (28)$$

で与えられる．なお，今考えている期待値は  $H_0$  と  $H_{so}$  とを含むハミルトニアン (2) に対する期待値である．

ここで現れた位置演算子の行列要素  $\langle \ell | x | \ell' \rangle$  ( $\ell \neq \ell'$ ) は後々重要な意味を持つ量で，関数

$$A_\mu^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) = i \int_\Omega w_{\ell\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial k_\mu} w_{\ell'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (29)$$

を用いて，

$$\langle \ell | x_\mu | \ell' \rangle = A_\mu^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) \quad (\text{for } \ell \neq \ell') \quad (30)$$

と表すことができる<sup>4)</sup>． $w_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  はブロッホ関数  $\phi_\ell(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} w_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の周期関数部分で， $\phi_\ell(\mathbf{k})$  は結晶全体  $\Omega$  で規格化されているものとする．ここで導入した関数  $A_\mu^{\ell\ell'}(\mathbf{k})$  は，KL 理論では“ $J_\mu^{\ell\ell'}(\mathbf{k})$ ”と表記されているが，電流演算子との混乱を避け

<sup>3)</sup>ここでの  $J_\mu^{\ell\ell'}$  の表し方は，対角成分  $J_\mu^{\ell\ell}$  を表現するに適切とは言えない．しかし異常ホール効果で重要なバンド間の行列要素を扱うに適している．

<sup>4)</sup>この関係式を  $\ell = \ell'$  の場合も含めて一般的に導いておく．

$$\begin{aligned} \langle \ell\mathbf{k} | x_\mu | \ell'\mathbf{k}' \rangle &= \int_\Omega e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} w_{\ell\mathbf{k}}^* x_\mu e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} w_{\ell'\mathbf{k}'} d\mathbf{r} \\ &= \int_\Omega e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} w_{\ell\mathbf{k}}^* \frac{1}{i} \frac{\partial e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\partial k'_\mu} w_{\ell'\mathbf{k}'} d\mathbf{r} \\ &= \int_\Omega e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} w_{\ell\mathbf{k}}^* \frac{1}{i} \left[ \frac{\partial}{\partial k'_\mu} (e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} w_{\ell'\mathbf{k}'}) - e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial w_{\ell'\mathbf{k}'}}{\partial k'_\mu} \right] d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial k'_\mu} \int_\Omega \phi_{\ell\mathbf{k}}^* \phi_{\ell'\mathbf{k}'} d\mathbf{r} + i \int_\Omega e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} w_{\ell\mathbf{k}} \frac{\partial w_{\ell'\mathbf{k}'}}{\partial k'_\mu} d\mathbf{r} \\ &= -i\delta_{\ell\ell'} \frac{\partial}{\partial k_\mu} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + A_\mu^{\ell\ell'}(\mathbf{k}). \end{aligned}$$

二つ目の等号では  $\partial e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} / \partial k_\mu = i x_\mu e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  の関係を，最後の等号ではブロッホ関数の規格直交性を用いた．

最後の式では  $\ell = \ell'$  の可能性も含めた表現になっているが，その取り扱いには非常に注意を要することを付記しておく．例えば，原点の取り方を変えて， $x_\mu \rightarrow x'_\mu + x_0$  としたとする．その場合， $\langle \ell | x'_\mu + x_0 | \ell' \rangle$  を考えることとなるが， $\ell = \ell'$  の場合， $x_0$  の分だけ結果がずれる．もちろん最終結果は原点の取り方に依らないはずで，この寄与を真面目に考えないと不変性が崩れることになる． $\ell \neq \ell'$  の場合は  $\langle \ell | x_0 | \ell' \rangle = 0$  であるので，特に深刻な問題は起こらない．

るため、 $A_\mu^{\ell\ell'}$  とした（定義も係数  $i$  だけ変えてあり、 $A_\mu^{\ell\ell'} = iJ_\mu^{\ell\ell'}$  である。）

この関数  $A_\mu^{\ell\ell'}$  を用いれば、電流演算子の非対角行列要素は

$$J_\mu^{\ell\ell'} = \frac{ie}{\hbar} \omega_{\ell\ell'} A_\mu^{\ell\ell'} \quad (31)$$

となる。

以上をふまえて、ホール伝導度における行列要素部分の計算を進める。松原振動数の和を取り終えた (26) は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} \left( \frac{n_F^\ell}{\omega_{\ell\ell'}^2} J_x^{\ell\ell'} J_y^{\ell'\ell} - \frac{n_F^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} J_x^{\ell\ell'} J_y^{\ell'\ell} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} \left( \frac{n_F^\ell}{\omega_{\ell\ell'}^2} J_x^{\ell\ell'} J_y^{\ell'\ell} - \frac{n_F^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} J_y^{\ell'\ell} J_x^{\ell\ell'} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} \frac{n_F^\ell}{\omega_{\ell\ell'}^2} \left( J_x^{\ell\ell'} J_y^{\ell'\ell} - J_y^{\ell'\ell} J_x^{\ell\ell'} \right) \quad (32) \end{aligned}$$

途中、第二項のみ変数の置き換え ( $\ell \leftrightarrow \ell'$ ) を行なった。さらに (31) の関係を用いれば<sup>5</sup>、

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} n_F^\ell \left( A_x^{\ell\ell'} A_y^{\ell'\ell} - A_y^{\ell\ell'} A_x^{\ell'\ell} \right) \quad (33)$$

<sup>5</sup> $\omega_{\ell\ell'} \omega_{\ell'\ell} = -\omega_{\ell\ell'}^2$  であることに注意。

と表せる。ここで KL 理論で示された次の関係<sup>6</sup>

$$A_x^{\ell\ell'} A_y^{\ell'\ell} - A_y^{\ell\ell'} A_x^{\ell'\ell} = -i \frac{\partial}{\partial k_x} A_y^{\ell\ell'} + i \frac{\partial}{\partial k_y} A_x^{\ell\ell'} \quad (34)$$

を用いて、

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\ell} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_F^\ell}{\partial \xi_\ell} \left( \frac{\partial \xi_\ell}{\partial k_x} A_y^{\ell\ell} - \frac{\partial \xi_\ell}{\partial k_y} A_x^{\ell\ell} \right) \quad (35)$$

となる。途中、部分積分と

$$\frac{\partial n_F(\xi_\ell)}{\partial k_\mu} = \frac{\partial n_F(\xi_\ell)}{\partial \xi_\ell} \frac{\partial \xi_\ell}{\partial k_\mu} \quad (36)$$

の関係を用いている。低温では  $-\partial n_F^\ell / \partial \xi_\ell \sim \delta(\xi_\ell - \mu)$  であり、この因子がバンド  $\ell$  のフェルミ面上の情報抜き出す。 $\partial \xi_\ell / \partial k_\mu$  はバンド  $\ell$  の速度に相当する。

フェルミ海か、フェルミ面か、バンド間か

異常ホール効果に関して、フェルミ面の効果とフェルミ海の効果のどちらであるか、という議論が時々なされるようである。通常は、フェルミ分布関数  $n_F^\ell$  そのものに比例する項がフェルミ海項、

<sup>6</sup> 関係式 (34) は次のようにして示すことができる。

$$\begin{aligned} \sum_{\ell'} A_x^{\ell\ell'} A_y^{\ell'\ell} &= - \sum_{\ell'} \int_{\Omega} w_\ell^*(\mathbf{r}) \frac{\partial w_{\ell'}(\mathbf{r})}{\partial k_x} w_{\ell'}^*(\mathbf{r}') \frac{\partial w_\ell(\mathbf{r}')}{\partial k_y} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial w_\ell^*}{\partial k_x} \left( \sum_{\ell'} w_{\ell'}^* w_{\ell'} \right) \frac{\partial w_\ell}{\partial k_y} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial w_\ell^*}{\partial k_x} \frac{\partial w_\ell}{\partial k_y} d\mathbf{r} \\ &= \frac{\partial}{\partial k_x} \int_{\Omega} w_\ell^* \frac{\partial w_\ell}{\partial k_y} d\mathbf{r} - \int_{\Omega} w_\ell^* \frac{\partial^2 w_\ell}{\partial k_x \partial k_y} d\mathbf{r} \\ &= -i \frac{\partial}{\partial k_x} A_y^{\ell\ell} - \int_{\Omega} w_\ell^* \frac{\partial^2 w_\ell}{\partial k_x \partial k_y} \end{aligned}$$

上の結果のうち、第二項は  $k_x$  と  $k_y$  について対称であり、 $A_y^{\ell\ell'} A_x^{\ell'\ell}$  からくる同様の項と打ち消される。

二つ目の等号では、外に  $\mathbf{k}$  積分があることから、 $k_x$  についての部分積分を行なっている。その際、上の式展開に書いた項の他に、

$$\int_{\Omega} w_\ell^*(\mathbf{r}) w_{\ell'}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial k_x} \left\{ w_{\ell'}^*(\mathbf{r}') \frac{\partial w_\ell(\mathbf{r}')}{\partial k_y} \right\} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

も現れるが、 $\ell \neq \ell'$  の場合、プロッホ関数の直交性よりゼロとなる。

フェルミ分布関数の微分項  $\partial n_F^\ell / \partial \xi_\ell$  に比例する項がフェルミ面項と呼ばれることが多い。しかし、等価な式の異なる表現 (33) と (35) (後述の (40) も) を見比べていただければわかるように、これらは部分積分を通して自由に書き換えることができる。したがって、式の形だけで物理的な意味を判断することは難しい<sup>3), 11)</sup>。なお、異常ホール伝導度がフェルミ海項でもフェルミ面項でも等価に書き表わせることについては、KL 論文で述べられてある。

一方、「異常ホール効果ではバンド間の行列要素が本質」という見解は正しい。ここでいうバンド間行列要素とは、 $J^{\ell\ell'}$  あるいは  $h^{\ell\ell'} \equiv \langle \ell | H_{\text{so}} | \ell' \rangle_0$  ( $\ell \neq \ell'$ ) を指す。後で詳しく見るように、異常ホール効果は  $h^{\ell\ell'}$  に比例する。対称性から  $h^{\ell\ell} = 0$  が示せるので、異常ホール効果はまさにバンド間 ( $\ell \neq \ell'$ ) の行列要素が本質といえる。時折、フェルミ海項は化学ポテンシャル以下全てのバンドの寄与を積分するため、これをバンド間効果と呼んでいる場合があるが、これは正確ではない。フェルミ海・フェルミ面項の議論と、バンド間・バンド内行列要素を議論する際には、それらの違いに注意を払いたい。

### 3.3 ベリー接続，ベリー曲率

KL 理論で導入された  $A_\mu^{\ell\ell'}$  について、同じバンドに対するものは、ベリー接続ともよばれ、ベリー位相

$$\gamma_\ell = \oint_C \mathbf{A}^{\ell\ell} \cdot d\mathbf{k} \quad (37)$$

やベリー曲率

$$\mathbf{B}^\ell(\mathbf{k}) = \nabla \times \mathbf{A}^{\ell\ell} \quad (38)$$

とならび、「トポロジカルな」量子輸送現象を表すのに用いられている<sup>12), 13)</sup>。なお、KL 理論で現れる  $A_\mu^{\ell\ell'}$  は、異なるバンド間  $\ell, \ell'$  も含んでおり、ベリー接続  $A_\mu^{\ell\ell}$  とは一般に異なることに注意が必要である。

KL 理論で示された関係式 (34) は、ベリー曲率

を用いて

$$\begin{aligned} A_x^{\ell\ell'} A_y^{\ell'\ell} - A_y^{\ell\ell'} A_x^{\ell'\ell} &= -i (\nabla \times \mathbf{A}^{\ell\ell})_z \\ &= -i B_z^\ell(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (39)$$

と書くこともできる。これを用いて (33) は

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_\ell \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_F^\ell B_z^\ell(\mathbf{k}) \quad (40)$$

と表すことができる。理想的な二次元絶縁体の場合、

$$C_\ell = -\int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} B_z^\ell(\mathbf{k}) \quad (41)$$

で定義されるチャーン数が、整数値をとることから、ホール伝導度が量子化される<sup>14)</sup>。

ここで見たように、KL 理論によるホール伝導度の表式は、ベリー曲率を用いた表式と等価である。KL 論文の中ではベリー曲率という言葉は(当然)用いられていないが、異常ホール効果の本質が今の言葉で言うベリー曲率にあることがすでに指摘されていたことは正しく認識しておきたい。

また、これまでに得たホール伝導度の公式 (35) や (40) は、異常ホール効果を念頭に置いて導いたものであるが、次節で述べるスピン軌道結合に特有な対称性などを用いたわけではなく、久保公式に基づいて導かれた、ゼロ磁場において幅広く成り立つホール伝導度の公式であることも付記しておく。

### 3.4 スピン軌道結合と対称性

これまでに得たホール伝導度の表式には、スピン軌道結合の効果が厳密に含まれている。しかし厳密であるがゆえに、その働きがわかりにくくもある。そこでスピン軌道結合の働きをより明確なものにするため、まずその一般的な性質について調べておく。本小節で示す性質は、異常ホール効果に限らず、スピン軌道結合に係る種々な興味深い現象の理解にも役立つであろう。

スピン軌道結合を含まないハミルトニアン  $H_0$  は時間と空間に関する反転対称性を満たすとする。考

えている系に時間反転対称性がある場合，ブロッホ関数  $\psi_{\ell\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\ell\mathbf{k}}$  は

$$u_{\ell\mathbf{k}} = u_{\ell, -\mathbf{k}}^* \quad (42)$$

を満たす．さらに空間反転対称性があれば，

$$u_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\ell, -\mathbf{k}}(-\mathbf{r}) \quad (43)$$

も満たす．ここで  $u_{\ell\mathbf{k}}$  は  $H_0$  の固有関数である．スピン軌道結合ハミルトニアン (4) は純虚数であり，また空間反転対称性を持つので，

$$H_{\text{so}}(\mathbf{r}) = -H_{\text{so}}^*(\mathbf{r}) \quad (44)$$

$$H_{\text{so}}(\mathbf{r}) = H_{\text{so}}(-\mathbf{r}) \quad (45)$$

が成り立つ．

$H_{\text{so}}$  に対する行列要素

$$h^{\ell\ell'} = \langle \ell | H_{\text{so}} | \ell' \rangle_0 \quad (46)$$

を考える． $\langle \dots \rangle_0$  は  $H_0$  のもとでの期待値を表す．そこでの波動関数は  $u_{\ell\mathbf{k}}$  であり，それは時間と空間の反転対称性を保っている．(42) と (44) より，

$$\begin{aligned} \langle \ell\mathbf{k} | H_{\text{so}} | \ell'\mathbf{k} \rangle_0 &= \int u_{\ell\mathbf{k}}^* H_{\text{so}} u_{\ell'\mathbf{k}} d\mathbf{r} \\ &= \int (H_{\text{so}} u_{\ell\mathbf{k}})^* u_{\ell'\mathbf{k}} d\mathbf{r} \\ &= - \int (H_{\text{so}} u_{\ell, -\mathbf{k}}) u_{\ell', -\mathbf{k}}^* d\mathbf{r} \\ &= - \int u_{\ell', -\mathbf{k}}^* H_{\text{so}} u_{\ell, -\mathbf{k}} d\mathbf{r} \\ &= - \langle \ell', -\mathbf{k} | H_{\text{so}} | \ell, -\mathbf{k} \rangle_0 \end{aligned} \quad (47)$$

一方，(43) と (45) より，

$$\begin{aligned} \langle \ell\mathbf{k} | H_{\text{so}} | \ell'\mathbf{k} \rangle_0 &= \int u_{\ell\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) H_{\text{so}}(\mathbf{r}) u_{\ell'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \int u_{\ell, -\mathbf{k}}^*(-\mathbf{r}) H_{\text{so}}(-\mathbf{r}) u_{\ell', -\mathbf{k}}(-\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \langle \ell, -\mathbf{k} | H_{\text{so}} | \ell', -\mathbf{k} \rangle_0 \end{aligned} \quad (48)$$

(47) と (48) から最終的に，

$$\langle \ell\mathbf{k} | H_{\text{so}} | \ell'\mathbf{k} \rangle_0 = - \langle \ell'\mathbf{k} | H_{\text{so}} | \ell\mathbf{k} \rangle_0 \quad (49)$$

$$h^{\ell\ell'} = -h^{\ell'\ell} \quad (50)$$

を得る．この関係性から， $h^{\ell\ell'}$  の対角成分は厳密にゼロであることがわかる．さらに，エネルギーに対する  $h^{\ell\ell'}$  の1次の補正はないこともわかる．これらはスピン軌道結合の大きな特徴である．

ブロッホ関数の性質を用いて， $A_{0\mu}^{\ell\ell'}$  に関する以下の性質を導くことができる．ここで  $A_{0\mu}^{\ell\ell'}$  は， $H_{\text{so}}$  を含まないときの  $A_{\mu}^{\ell\ell'}$  にあたり，

$$A_{0\mu}^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) = i \int_{\Omega} u_{\ell\mathbf{k}}^* \frac{\partial u_{\ell'\mathbf{k}}}{\partial k_{\mu}} d\mathbf{r} \quad (51)$$

で定義される．(42) より，( $\ell \neq \ell'$ )

$$\begin{aligned} A_{0\mu}^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) &= i \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial}{\partial k_{\mu}} (u_{\ell\mathbf{k}}^* u_{\ell'\mathbf{k}}) - \frac{\partial u_{\ell\mathbf{k}}^*}{\partial k_{\mu}} u_{\ell'\mathbf{k}} \right] d\mathbf{r} \\ &= i \frac{\partial}{\partial k_{\mu}} \int_{\Omega} u_{\ell\mathbf{k}}^* u_{\ell'\mathbf{k}} d\mathbf{r} - i \int_{\Omega} \frac{\partial u_{\ell\mathbf{k}}^*}{\partial k_{\mu}} u_{\ell'\mathbf{k}} d\mathbf{r} \\ &= -i \int_{\Omega} \frac{\partial u_{\ell, -\mathbf{k}}}{\partial k_{\mu}} u_{\ell', -\mathbf{k}}^* d\mathbf{r} \\ &= i \int_{\Omega} \frac{\partial u_{\ell, -\mathbf{k}}}{\partial(-k_{\mu})} u_{\ell', -\mathbf{k}}^* d\mathbf{r} \\ &= A_{0\mu}^{\ell'\ell}(-\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (52)$$

一方，(43) より，

$$\begin{aligned} A_{0\mu}^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) &= i \int_{\Omega} u_{\ell, -\mathbf{k}}^*(-\mathbf{r}) \frac{\partial u_{\ell', -\mathbf{k}}(-\mathbf{r})}{\partial k_{\mu}} d\mathbf{r} \\ &= -i \int_{\Omega} u_{\ell, -\mathbf{k}}^*(-\mathbf{r}) \frac{\partial u_{\ell', -\mathbf{k}}(-\mathbf{r})}{\partial(-k_{\mu})} d\mathbf{r} \\ &= -A_{0\mu}^{\ell'\ell}(-\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (53)$$

(52) と (53) より最終的に，

$$A_{0\mu}^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) = -A_{0\mu}^{\ell'\ell}(\mathbf{k}) \quad (54)$$

を得る．これも  $h^{\ell\ell'}$  同様に  $A_{0\mu}^{\ell\ell} = 0$  である<sup>7</sup>．

これまでに得た  $h^{\ell\ell'}$  および  $A_{0\mu}^{\ell\ell'}$  の対称性を用いれば，電流演算子の対称性も導くことができる． $H_0$  に対する電流演算子  $j_{\mu}$  は，(31) より，

$$j_{\mu}^{\ell\ell'} = \frac{ie}{\hbar} \omega_{\ell\ell'} A_{0\mu}^{\ell\ell'} \quad (55)$$

である．(54) と合わせれば，

$$j_{\mu}^{\ell\ell'} = j_{\mu}^{\ell'\ell} \quad (56)$$

<sup>7</sup>ここで示した対称性は，時間反転対称性を仮定している．したがって， $H = H_0 + H_{\text{so}}$  に対する波動関数  $w_{\ell\mathbf{k}}$  には適用されず， $A_{\mu}^{\ell\ell'}$  にも適用されない．

が導かれる．一方，(12) で定義された  $\mathcal{J}$  は， $H_{\text{so}}$  に起因する電流演算子であり，その行列要素は，

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_\mu^{\ell\ell'} &= \frac{ie}{\hbar} \langle \ell | (H_{\text{so}} x_\mu - x_\mu H_{\text{so}}) | \ell' \rangle_0 \\ &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{\ell''} \langle \ell | H_{\text{so}} | \ell'' \rangle_0 \langle \ell'' | x_\mu | \ell' \rangle_0 \\ &\quad - \frac{ie}{\hbar} \sum_{\ell''} \langle \ell | x_\mu | \ell'' \rangle_0 \langle \ell'' | H_{\text{so}} | \ell' \rangle_0 \\ &= \sum_{\ell''} \left( \frac{\hbar^{\ell\ell''} j_\mu^{\ell''\ell'}}{\omega_{\ell''\ell'}} - \frac{j_\mu^{\ell\ell''} \hbar^{\ell''\ell'}}{\omega_{\ell\ell''}} \right)\end{aligned}\quad (57)$$

と表せる．

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_\mu^{\ell'\ell} &= \sum_{\ell''} \left( \frac{\hbar^{\ell'\ell''} j_\mu^{\ell''\ell}}{\omega_{\ell''\ell}} - \frac{j_\mu^{\ell'\ell''} \hbar^{\ell''\ell}}{\omega_{\ell'\ell''}} \right) \\ &= \sum_{\ell''} \left( \frac{\hbar^{\ell''\ell'} j_\mu^{\ell\ell''}}{\omega_{\ell\ell''}} - \frac{j_\mu^{\ell''\ell'} \hbar^{\ell\ell''}}{\omega_{\ell''\ell'}} \right) \\ &= - \sum_{\ell''} \left( \frac{\hbar^{\ell\ell''} j_\mu^{\ell''\ell'}}{\omega_{\ell''\ell'}} - \frac{j_\mu^{\ell\ell''} \hbar^{\ell''\ell'}}{\omega_{\ell\ell''}} \right)\end{aligned}\quad (58)$$

より，

$$\mathcal{J}^{\ell\ell'} = -\mathcal{J}^{\ell'\ell}\quad (59)$$

が示せる．

### 3.5 波動関数の展開

異常ホール伝導度に含まれるスピン軌道結合の役割を明らかにするために，ここでは KL 理論に則して波動関数をスピン軌道結合に対して展開する．

波動関数  $w_{\ell\mathbf{k}}$  は，スピン軌道結合を含んだ全ハミルトニアン  $H = H_0 + H_{\text{so}}$  の固有関数である．この波動関数をスピン軌道結合を含まないハミルトニアン  $H_0$  の固有関数  $u_{\ell\mathbf{k}}$  を用いて展開すれば，

$$w_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_{\ell' \neq \ell} u_{\ell'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \frac{\langle \ell' | H_{\text{so}} | \ell \rangle_0}{\xi_\ell - \xi_{\ell'}}\quad (60)$$

となる．関数  $A_\mu^{\ell\ell}$  は  $H_{\text{so}}$  の 1 次項を取り出せば，

$$\begin{aligned}A_\mu^{\ell\ell} &= i \int_\Omega \left\{ u_\ell + u_{\ell'} \frac{\hbar^{\ell'\ell}}{\omega_{\ell\ell'}} \right\}^* \frac{\partial}{\partial k_\mu} \left\{ u_\ell + u_{\ell'} \frac{\hbar^{\ell'\ell}}{\omega_{\ell\ell'}} \right\} d\mathbf{r} \\ &\rightarrow 2A_{0\mu}^{\ell\ell} \frac{\hbar^{\ell'\ell}}{\omega_{\ell\ell'}}\end{aligned}\quad (61)$$

となる（重なるバンドの指標  $\ell'$  については和を取ること約束しておく．）以上のことから，(35) は，

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= \frac{ie}{4\pi^3} \sum_{\ell \neq \ell'} \int d\mathbf{k} \frac{\partial n_{\text{F}}^\ell}{\partial \xi_\ell} \frac{\hbar^{\ell\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \\ &\quad \times \left( \frac{\partial \xi_\ell}{\partial k_x} \langle \ell' | j_y | \ell \rangle_0 - \frac{\partial \xi_{\ell'}}{\partial k_y} \langle \ell' | j_x | \ell \rangle_0 \right)\end{aligned}\quad (62)$$

となる．上の結果は，KL 理論で得られた摂動展開の結果と等価であり，なおかつ  $x$  と  $y$  について対称化された表現となっているため，(62) はプロック関数の位相によらない<sup>9), 15), 16)</sup>．

## 4 摂動展開の一般論

前節では，はじめに  $H_{\text{so}}$  を含む全波動関数  $w_{n\mathbf{k}}$  に基づいたホール伝導度を計算し，その後  $w_{n\mathbf{k}}$  について  $H_{\text{so}}$  に対する 1 次までの展開を行った．他方，具体的な計算を行う前に伝導度について  $H_{\text{so}}$  の 1 次までを展開しておき，そこからホール伝導度を計算することもできる．将来的に直面する多くの問題で後者の摂動展開のアプローチの方が有用な場合もあろう．そこで本節では，松原形式に基づく摂動展開の一般論を述べる．ここで紹介する内容は，ホール伝導度や輸送現象に限らず，一般の物理量に対して適用できるので，摂動展開の技法をこの段階で習得しておくことは，初学者にとって有意義であろう．

$H_0$  を非摂動項， $H'$  を摂動項とし，全体のハミルトニアンを  $H = H_0 + H'$  とおく．ここで  $\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N$  と表記することにして，

$$U(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}_0} e^{-\tau \mathcal{H}}\quad (63)$$

なる演算子を導入する．この演算子  $U(\tau)$  を用いれば，分配関数は，

$$\begin{aligned}e^{-\beta\Omega} &= \text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}}] = \text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}_0} U(\beta)] \\ &= e^{-\beta\Omega_0} \langle U(\beta) \rangle_0\end{aligned}\quad (64)$$

として表すことができる．上式を見れば明らかのように， $\langle U(\beta) \rangle_0$  は摂動のない系の熱平衡状態と摂動が加わった系の熱平衡状態とを繋ぐ役割を持つ． $U(\beta)$  の導入により，摂動が加わった系での問



題は,  $U(\beta)$  の期待値を求める問題に置き換えることができる. ここで  $\langle \dots \rangle_0$  は非摂動ハミルトニアンのもとでの期待値で,

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}_0} \dots]}{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}_0}]} \quad (65)$$

によって定義されている.

$U(\tau)$  を摂動展開するにあたり, その微分を考える.

$$\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}_0} (H_0 - H) e^{-\tau \mathcal{H}} = -e^{\tau \mathcal{H}_0} H' e^{-\tau \mathcal{H}} \quad (66)$$

ここで

$$\hat{H}'(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}_0} H' e^{-\tau \mathcal{H}_0} \quad (67)$$

なる表示を導入する. このように非摂動ハミルトニアンによって演算子の時間依存性を表す表示を相互作用表示とよぶ<sup>8</sup>. ハイゼンベルグ表示と区別するために, 相互作用表示の演算子には  $\hat{\phantom{x}}$  をつけることにしておく. この表示に基づけば, (66) は,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau) = -\hat{H}'(\tau)U(\tau) \quad (68)$$

と表される. この微分方程式を積分形で表せば,

$$U(\tau) = 1 - \int_0^\tau d\tau' \hat{H}'(\tau')U(\tau') \quad (69)$$

となる ( $U(0) = 1$  とした.) この方程式は  $U(\tau)$  について再帰的であるので, 次々に代入していくと,

$$\begin{aligned} U(\tau) &= 1 - \int_0^\tau d\tau_1 \hat{H}'(\tau_1) \\ &\quad + (-1)^2 \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}'(\tau_1) \hat{H}'(\tau_2) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \\ &\quad \times \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}'(\tau_1) \dots \hat{H}'(\tau_n) \end{aligned} \quad (70)$$

<sup>8</sup> (その1) で見たように, 虚時間におけるハイゼンベルグ表示は次のように全体のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  によって定義されたのであった.

$$\psi(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}} \psi e^{-\tau \mathcal{H}}$$

一方, ここで導入した相互作用表示は, 形としてはハイゼンベルグ表示と同じであるが, 非摂動ハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  によって定義されているという点異なる.

となる. これは虚時間についての時間順序積を用いれば<sup>9</sup>, 次のようにもっと簡潔に表記できる<sup>10</sup>:

$$U(\tau) = T_\tau \exp \left[ - \int_0^\tau d\tau' \hat{H}'(\tau') \right] \quad (71)$$

したがって関数  $U(\tau)$  は,

$$S(\tau_1, \tau_2) = T_\tau \exp \left[ - \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau' \hat{H}'(\tau') \right] \quad (72)$$

で定義される  $S$  行列と  $U(\tau) = S(0, \tau)$  の関係にある.  $S$  行列を用いれば無限次までの摂動項を系統的に取り込むことができるが<sup>11</sup>, ここでは詳しく触れず実践的な計算へと進む.

<sup>9</sup>ここで, いま考えている演算子 ( $H'$  など) はフェルミ粒子を偶数個含んでいるため, 順序入れ替えに伴う符号は気にしなくてよい. つまり,  $T_\tau$  積内では可換である. このことを念のため確かめておく. フェルミ粒子を表す演算子  $\psi$  を用いて,  $C(1) = \bar{\psi}(1)\psi(1)$  とする.

$$\begin{aligned} T_\tau \{C(1)C(2)\} &= T_\tau \{ \bar{\psi}(1)\psi(1)\bar{\psi}(2)\psi(2) \} \\ &= \begin{cases} \bar{\psi}(1)\psi(1)\bar{\psi}(2)\psi(2) & \text{for } \tau_1 > \tau_2 \\ \bar{\psi}(2)\psi(2)\bar{\psi}(1)\psi(1) & \text{for } \tau_1 < \tau_2 \end{cases} \\ &= T_\tau \{C(2)C(1)\} \end{aligned}$$

このことより,  $T_\tau$  積内で偶数個のフェルミ粒子からなる演算子は可換であることがわかる.

<sup>10</sup> (その1) でも見たように, 時間順序積は階段関数  $\theta(\tau)$  を用いて次のように表せる.

$$\begin{aligned} T_\tau \{ \hat{H}'(\tau_1) \hat{H}'(\tau_2) \} &= \theta(\tau_1 - \tau_2) \hat{H}'(\tau_1) \hat{H}'(\tau_2) \\ &\quad + \theta(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}'(\tau_2) \hat{H}'(\tau_1) \end{aligned}$$

このことから,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^\tau d\tau_2 T_\tau \{ \hat{H}'(\tau_1) \hat{H}'(\tau_2) \} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}'(\tau_1) \hat{H}'(\tau_2) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \hat{H}'(\tau_2) \hat{H}'(\tau_1) \\ &= \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \hat{H}'(\tau_1) \hat{H}'(\tau_2) \end{aligned}$$

が示せる (最後の等号では,  $\tau_1$  と  $\tau_2$  を入れ替えた.) 同様のことを繰り返せば, (70) は

$$\begin{aligned} U(\tau) &= \sum_0^\infty \frac{(-1)^n}{n!} \\ &\quad \times \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n T_\tau \{ \hat{H}'(\tau_1) \dots \hat{H}'(\tau_n) \} \end{aligned}$$

と表せる. これを  $\exp$  を用いて表記したのが (71) である.

<sup>11</sup> 正確には,  $S$  行列は絶対零度の場の量子論において導入されたものであり, 有限温度の  $S$  行列の定義はそれとは少し異なる.  $S$  行列についての詳しいことは, 例えば AGD,<sup>17)</sup> Mahan,<sup>18)</sup> Ziman,<sup>19)</sup> Schiff<sup>20)</sup>などを参考のこと. 前の二冊は  $T = 0$  のみならず  $T \neq 0$  の  $S$  行列についても解説する. 後の二冊では,  $T = 0$  についてのみであるが,  $S$  行列が導入された経緯について知ることができる.

例として温度相関関数に現れる

$$\langle T_\tau \{j_x(\tau)j_y(0)\} \rangle \quad (73)$$

の摂動展開を考えてみる．ここでの  $j_{x,y}(\tau)$  はハイゼンベルグ表示であり， $\langle \dots \rangle$  は大正準集団に対する期待値であり，すべて  $\mathcal{H}$  によって定義されている．摂動展開するには，これらを相互作用表示によって書き直す必要がある．例えば  $j_x(\tau)$  は

$$j_x(\tau) = e^{\tau\mathcal{H}} j_x e^{-\tau\mathcal{H}} = U^{-1}(\tau) \hat{j}_x(\tau) U(\tau) \quad (74)$$

と表せる．これにより

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau \{j_x(\tau)j_y(0)\} \rangle \\ &= \frac{\text{Tr} \left[ T_\tau \left\{ e^{-\beta\mathcal{H}_0} U(\beta) U^{-1}(\tau) \hat{j}_x(\tau) U(\tau) \hat{j}_y(0) \right\} \right]}{e^{-\beta\Omega_0} \langle U(\beta) \rangle_0} \\ &= \frac{\langle T_\tau \left\{ U(\beta) \hat{j}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \right\} \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \end{aligned} \quad (75)$$

となる．二つ目の等号では， $T_\tau$  積の可換性（脚注9）を用いた．この式中の  $U(\beta)$  に (70) を代入すれば，任意の次数まで摂動項を考慮することができる<sup>12</sup>．

## 5 摂動論による異常ホール伝導度

前節で学んだ摂動展開の一般論を異常ホール効果に適用してみよう．温度相関関数において， $H_{\text{so}}$  を摂動とみなし，その1次までを取り出すと次のようになる（ $H_{\text{so}}$  に因らない項は無視してある）：

$$\Phi_{xy}(i\omega_\lambda) = \Phi_{xy}^{(2)}(i\omega_\lambda) + \Phi_{xy}^{(3)}(i\omega_\lambda) \quad (76)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{xy}^{(2)}(i\omega_\lambda) &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda\tau} \langle T_\tau \{ \hat{j}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \} \rangle_0 \\ &\quad - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda\tau} \langle T_\tau \{ \hat{J}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \} \rangle_0 \end{aligned} \quad (77)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{xy}^{(3)}(i\omega_\lambda) &= \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_\lambda\tau} \\ &\quad \times \langle T_\tau \{ \hat{H}_{\text{so}}(\tau') \hat{j}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \} \rangle_0 \end{aligned} \quad (78)$$

<sup>12</sup>ここで示した  $U(\tau)$ （あるいは  $S$  行列）を用いた摂動論はグリーン関数に対して適用されるものと同じである<sup>17), 18), 21)</sup>．この摂動論に基づき，ウィックの定理やダイソン方程式が導かれ（その1）で述べたファインマン図形の方法が得られる．

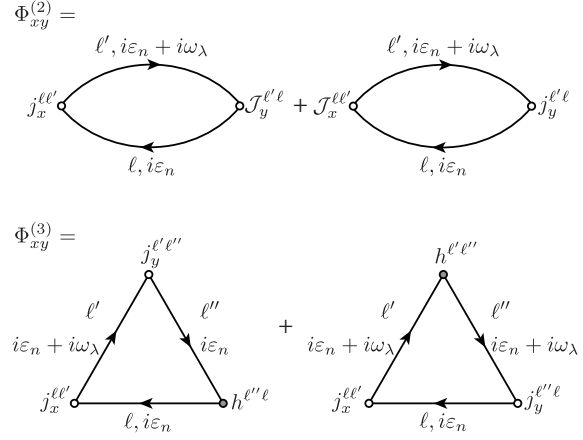


図3: 温度相関関数  $\Phi_{xy}^{(2)}$  と  $\Phi_{xy}^{(3)}$  のファインマン図形．

(13) に  $J = j + \mathcal{J}$  を代入し， $\mathcal{J}$  の1次までを取れば，ただちに  $\Phi_{xy}^{(2)}$  が導かれる．このとき， $\mathcal{J}$  がすでに  $H_{\text{so}}$  の1次となるので，期待値は非摂動ハミルトニアンで取る必要がある．一方， $\Phi_{xy}^{(3)}$  は前節の摂動展開を用いて得られる．(75) 中の  $U(\beta)$  を  $H_{\text{so}}$  の1次まで取れば<sup>13</sup>，

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau \{j_x(\tau)j_y(0)\} \rangle \\ &= \left\langle T_\tau \left\{ \left[ - \int_0^\beta d\tau' \hat{H}_{\text{so}}(\tau') \right] \hat{j}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \right\} \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (79)$$

であることから， $\Phi_{xy}^{(3)}$  が導かれる．

次に温度相関関数をグリーン関数を用いて表す．慣れてくれば先に  $\Phi_{xy}^{(2)}$ ， $\Phi_{xy}^{(3)}$  に対応するファインマン図形（図3）を描き，波数や振動数を割り振ってすぐに (81)，(82) に飛ぶことができる（幾何的導出）．ただ初めのうちはきちんと代数的に導出しておく方がよい．計算に慣れたころでも，新たなハミルトニアンや電流演算子を導入してこれまでにない計算をする場合においては，幾何的導出のみでは思わぬ見落としをする可能性がある．概要をつかむためにまず幾何的導出を行い，正確な計

<sup>13</sup>分母の  $U(\beta)$  を展開した項も現れるが，その場合分子は  $\langle T_\tau \{ \hat{j}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \} \rangle_0$  となる．これはスピン軌道結合を含まないゼロ磁場における横伝導であるため，物理的に考えてゼロとできる．

算を行うために代数的導出を併用すれば、より効率的で正確な計算を進めることができるであろう。

電流演算子や摂動ハミルトニアンは第二量子化表示に基づけば、 $j_\mu \bar{\psi}_\ell \psi_{\ell'}$  や  $H_{so} \bar{\psi}_\ell \psi_{\ell'}$  のようになる。したがって（最も単純な場合においても） $\Phi_{xy}^{(2)}$  は一粒子グリーン関数二つ、 $\Phi_{xy}^{(3)}$  は三つにより構成されることがわかる。最終的に温度相関関数は、一粒子グリーン関数を用いて次のように表される<sup>14</sup>。

$$\begin{aligned} \Phi_{xy}^{(2)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) j_x^{\ell\ell'} \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{J}_y^{\ell'\ell} \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{J}_x^{\ell\ell'} \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) j_y^{\ell'\ell} \end{aligned} \quad (80)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{xy}^{(3)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) j_x^{\ell\ell'} \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \\ &\times j_y^{\ell'\ell''} \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n) h^{\ell''\ell} \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) j_x^{\ell\ell'} \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \\ &\times h^{\ell'\ell''} \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) j_y^{\ell''\ell} \end{aligned} \quad (81)$$

上の結果は、本連載でこれまでに習得してきた技法だけで導出できるので、力試しのためにまず独力で導くことに挑戦してほしい（計算の詳細は補遺 A.1, A.2 に記しておく。）

## 5.1 松原振動数の和をとる

この場合においても、完全結晶であれば松原振動数の和をとることは容易である。 $\Phi_{xy}^{(2)}$  については前述の通りで、 $\Phi_{xy}^{(3)}$  については、部分分数分解を用いることで二つのグリーン関数の積に変える

<sup>14</sup>一粒子グリーン関数は一般には

$$\mathcal{G}_{\ell\ell'}(i\varepsilon_n) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\varepsilon_n \tau} \langle T_\tau \{ \psi_\ell(\tau) \bar{\psi}_{\ell'}(0) \} \rangle$$

のように異なるバンド ( $\ell \neq \ell'$ ) 間の要素も持つ。ただし今は対角的な成分のみ有限な場合を考え、それを  $\mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n)$  として表した。

例えばディラック電子などであれば、たとえ完全結晶の場合でもスピン軌道結合がバンド間の行列要素を有限にするため、グリーン関数の非対角成分が重要な役割を果たす<sup>22)</sup>。

ことができる。

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(3a)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n) \end{aligned} \quad (82)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(3b)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \end{aligned} \quad (83)$$

とおけば、

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(3a)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\xi_\ell - \xi_{\ell''}} \frac{1}{\beta} \sum_n \left[ \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \right. \\ &\left. - \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n) \right] \\ &= \frac{1}{\omega_{\ell\ell''}} \left[ \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell'}} - \frac{n_F^{\ell''} - n_F^\ell}{i\omega_\lambda + \xi_{\ell''} - \xi_\ell} \right] \\ &\rightarrow - \frac{\hbar\omega}{\omega_{\ell\ell''}} \left[ \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} - \frac{n_F^{\ell''} - n_F^\ell}{\omega_{\ell''\ell'}^2} \right] \end{aligned} \quad (84)$$

全く同様にして、

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(3b)}(i\omega_\lambda) &= \frac{1}{\omega_{\ell'\ell''}} \left[ \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell'}} - \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell''}}{i\omega_\lambda + \xi_\ell - \xi_{\ell''}} \right] \\ &\rightarrow - \frac{\hbar\omega}{\omega_{\ell'\ell''}} \left[ \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} - \frac{n_F^\ell - n_F^{\ell''}}{\omega_{\ell\ell''}^2} \right] \end{aligned} \quad (85)$$

以上より，ホール伝導度は

$$\sigma_{xy}^{(2)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \left[ j_x^{\ell\ell'} \mathcal{J}_y^{\ell'\ell} + \mathcal{J}_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell} \right] \quad (86)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(3a)} &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{1}{\omega_{\ell\ell''}} \left[ \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} - \frac{n_{\text{F}}^{\ell''} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell''\ell'}^2} \right] \\ &\quad \times j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \frac{1}{\omega_{\ell\ell''}} \\ &\quad \times \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} \right) \quad (87) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(3b)} &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{1}{\omega_{\ell'\ell''}} \left[ \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} - \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell''}}{\omega_{\ell\ell''}^2} \right] \\ &\quad \times j_x^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_y^{\ell''\ell} \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \frac{1}{\omega_{\ell'\ell''}} \\ &\quad \times \left( j_x^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_y^{\ell''\ell} - j_y^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_x^{\ell''\ell} \right) \quad (88) \end{aligned}$$

で与えられる。(ここで (50) と (56) の対称性を用いた。) 久保公式とグリーン関数を用いた計算，という意味では，ここまでに一通り終えたことになる。あとは電流演算子や  $H_{\text{so}}$  の対称性を用いて少し整理する。

すでに示した (57) を用いれば， $\sigma_{xy}^{(2)}$  は改めて  $h^{\ell\ell'}$  の 1 次項として次のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(2)}(\omega) &= \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \\ &\quad \times \left[ j_x^{\ell\ell'} \left( \frac{h^{\ell'\ell''} j_y^{\ell''\ell}}{\omega_{\ell\ell''}} - \frac{j_y^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell}}{\omega_{\ell'\ell''}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{h^{\ell\ell''} j_x^{\ell''\ell'}}{\omega_{\ell\ell''}} - \frac{j_x^{\ell\ell''} h^{\ell''\ell'}}{\omega_{\ell\ell''}} \right) j_y^{\ell'\ell} \right] \\ &= -\frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \\ &\quad \times \left[ \frac{1}{\omega_{\ell'\ell''}} \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\omega_{\ell\ell''}} \left( j_x^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_y^{\ell''\ell} - j_y^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_x^{\ell''\ell} \right) \right] \quad (89) \end{aligned}$$

二つ目の等号でも (50) と (56) の関係を用いた。これまで  $\sigma_{xy}^{(2)}$  と  $\sigma_{xy}^{(3)}$  はグリーン関数を 2 つと 3 つ持つ項として区別してきたが，電流演算子の行列要素を描き下せば，結局両者はほぼ同じ構造を持つことがわかった。これらを整理すれば，次のようにより簡潔な式を導くことができる (A.3 参照)

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= 2 \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell}}{\omega_{\ell\ell'} \omega_{\ell'\ell''} \omega_{\ell''\ell}} \\ &\quad \times \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} \right) h^{\ell''\ell} \quad (90) \end{aligned}$$

以降の変形は 3.2 節とほぼ同様の計算 (ただし波動関数は  $H_{\text{so}}$  を含まないときの固有関数  $u_{\ell}$ ) である。最終的に，

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \sum_{\ell \neq \ell'} \int d\mathbf{k} \frac{\partial n_{\text{F}}^{\ell}}{\partial \xi_{\ell}} \frac{h^{\ell\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}} \\ &\quad \times \left( \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_x} A_{0y}^{\ell'\ell} - \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_y} A_{0x}^{\ell'\ell} \right) \quad (91) \end{aligned}$$

あるいは，

$$\sigma_{xy} = \frac{ie}{4\pi^3} \sum_{\ell \neq \ell'} \int d\mathbf{k} \frac{\partial n_{\text{F}}^{\ell}}{\partial \xi_{\ell}} \frac{h^{\ell\ell'}}{\omega_{\ell\ell'}^2} \left( \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_x} j_y^{\ell'\ell} - \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_y} j_x^{\ell'\ell} \right) \quad (92)$$

となる (A.4 参照) 期待通り，KL 理論 (62) 及び Irkhin-Shavrov<sup>15)</sup>, Leribaux,<sup>16)</sup> Fukuyama<sup>9)</sup> の結果を得た。

このように，波動関数を摂動展開する KL 理論のアプローチでも，摂動論の一般形式に従ったアプローチでも，全く同じ結果にたどり着ける。取り組む問題の性質によって，それにふさわしいアプローチを採用すれば良い。例えば異常ホール効果については，本稿では扱わなかったが，外因性の寄与も重要となる。その際，不純物散乱を扱うには，摂動論のアプローチ (グリーン関数とファインマン図形) が系統的な計算を可能にする。それについては，例えば文献 9) が，異常ホール効果に対する不純物散乱の効果を摂動論のアプローチにより初めて議論した論文として，参考になる。

## A 補遺：計算の詳細

### A.1 $\Phi_{xy}^{(2)}$ の温度グリーン関数による表式

二つのグリーン関数からなる  $\Phi_{xy}^{(2)}$  について，詳しい計算を記しておく．

$$\begin{aligned}
\Phi_{xy}^{(2a)}(i\omega\lambda) &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\lambda\tau} \langle T_\tau \{ \hat{j}_x(\tau) \hat{J}_y(0) \} \rangle_0 \\
&= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\lambda\tau} \\
&\times \langle j_x^{\ell_1\ell_2} \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau) \psi_{\ell_2}(\tau) \mathcal{J}_y^{\ell_3\ell_4} \bar{\psi}_{\ell_3}(0) \psi_{\ell_4}(0) \rangle_0 \\
&\simeq - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\lambda\tau} j_x^{\ell_1\ell_2} \mathcal{J}_y^{\ell_3\ell_4} \\
&\times \langle \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau) \psi_{\ell_4}(0) \rangle_0 \langle \psi_{\ell_2}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_3}(0) \rangle_0 \\
&= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\lambda\tau} j_x^{\ell_1\ell_2} \mathcal{J}_y^{\ell_3\ell_4} \\
&\times \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_4}(0) \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau) \} \rangle_0 \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_2}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_3}(0) \} \rangle_0 \\
&= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\lambda\tau} j_x^{\ell_1\ell_2} \mathcal{J}_y^{\ell_3\ell_4} \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(-\tau) \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(\tau) \quad (93)
\end{aligned}$$

温度グリーン関数のフーリエ展開

$$\mathcal{G}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\varepsilon_n\tau} \mathcal{G}(i\varepsilon_n) \quad (94)$$

を代入すれば，

$$\begin{aligned}
\Phi_{xy}^{(2a)}(i\omega\lambda) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega\lambda\tau} j_x^{\ell_1\ell_2} \mathcal{J}_y^{\ell_3\ell_4} \\
&\times \frac{1}{\beta^2} \sum_{n,n'} e^{i(\varepsilon'_n - \varepsilon_n)\tau} \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(i\varepsilon'_n) \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(i\varepsilon_n) \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_n j_x^{\ell_1\ell_2} \mathcal{J}_y^{\ell_3\ell_4} \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \quad (95)
\end{aligned}$$

となる．上の二つ目の等号では，先に  $n$  に対する和を取り，その後  $\varepsilon'_n \rightarrow \varepsilon_n$  と書き換えた．グリーン関数の引数の現れ方が (その2) (59) 式で得た  $\mathcal{G}(i\varepsilon_n - i\omega\lambda) \mathcal{G}(i\varepsilon_n)$  と異なるように導いたが，もちろん最終的には同じ結果を与える．両方ともよく見かける形で，それらの関係を知ってもらうために異なる形を導いた．

グリーン関数が対角成分のみを持つ場合， $\ell = \ell_1 = \ell_4$ ， $\ell' = \ell_2 = \ell_3$  を用いて，

$$\Phi_{xy}^{(2a)}(i\omega\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_n j_x^{\ell\ell'} \mathcal{J}_y^{\ell'\ell} \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \quad (96)$$

と表せる．

### A.2 $\Phi_{xy}^{(3)}$ のグリーン関数による表式

$\Phi_{xy}^{(3)}$  の詳しい計算を記しておく．

$$\begin{aligned}
\Phi_{xy}^{(3)}(i\omega\lambda) &= \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega\lambda\tau} \langle T_\tau \{ \hat{H}_{\text{so}}(\tau') \hat{j}_x(\tau) \hat{j}_y(0) \} \rangle_0 \\
&= \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega\lambda\tau} \langle T_\tau \{ h^{\ell_1\ell_2} \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \psi_{\ell_2}(\tau') \\
&\times j_x^{\ell_3\ell_4} \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \psi_{\ell_4}(\tau) j_y^{\ell_5\ell_6} \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \psi_{\ell_6}(0) \} \rangle_0 \quad (97)
\end{aligned}$$

$\tau$  と  $\tau'$  の大小関係によって，積分範囲を (i)  $\int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau'$  ( $\tau > \tau'$ ) と (ii)  $\int_0^\beta d\tau \int_\tau^\beta d\tau'$  ( $\tau < \tau'$ ) に分割する．

$$\begin{aligned}
\text{(i)} &= \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' e^{i\omega\lambda\tau} h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\
&\times \langle \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \psi_{\ell_4}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \psi_{\ell_2}(\tau') \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \psi_{\ell_6}(0) \rangle_0 \quad (98)
\end{aligned}$$

この三粒子グリーン関数において  $\psi\bar{\psi}$  の対を作って3つの一粒子グリーン関数の組み合わせとするが，その対の作り方に二通りある．

$$\begin{aligned}
&\langle \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \psi_{\ell_4}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \psi_{\ell_2}(\tau') \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \psi_{\ell_6}(0) \rangle_0 \\
&\simeq - \langle \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \psi_{\ell_2}(\tau') \rangle_0 \langle \psi_{\ell_4}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \rangle_0 \langle \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \psi_{\ell_6}(0) \rangle_0 \\
&+ \langle \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \psi_{\ell_6}(0) \rangle_0 \langle \psi_{\ell_4}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \rangle_0 \langle \psi_{\ell_2}(\tau') \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \rangle_0 \\
&= - \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_2}(\tau') \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \} \rangle_0 \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_4}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \} \rangle_0 \\
&\times \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_6}(0) \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \} \rangle_0 \\
&- \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_6}(0) \bar{\psi}_{\ell_3}(\tau) \} \rangle_0 \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_4}(\tau) \bar{\psi}_{\ell_1}(\tau') \} \rangle_0 \\
&\times \langle T_\tau \{ \psi_{\ell_2}(\tau') \bar{\psi}_{\ell_5}(0) \} \rangle_0 \\
&= \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(\tau' - \tau) \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(-\tau') \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(\tau) \\
&+ \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(\tau - \tau') \mathcal{G}_{\ell_2\ell_5}(\tau') \mathcal{G}_{\ell_6\ell_3}(-\tau) \quad (99)
\end{aligned}$$

これより，

$$(i) = \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' e^{i\omega\lambda\tau} h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\ \times [\mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(\tau' - \tau) \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(-\tau') \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(\tau) \\ + \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(\tau - \tau') \mathcal{G}_{\ell_2\ell_5}(\tau') \mathcal{G}_{\ell_6\ell_3}(-\tau)] \quad (100)$$

$\tau < \tau'$  についても同様に，

$$(ii) = \int_0^\beta d\tau \int_\tau^\beta d\tau' e^{i\omega\lambda\tau} h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\ \times [\mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(\tau' - \tau) \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(-\tau') \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(\tau) \\ + \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(\tau - \tau') \mathcal{G}_{\ell_2\ell_5}(\tau') \mathcal{G}_{\ell_6\ell_3}(-\tau)] \quad (101)$$

となるので，結局積分区間を一つにまとめることができ，

$$\Phi_{xy}^{(3)}(i\omega\lambda) = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega\lambda\tau} h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\ \times [\mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(\tau' - \tau) \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(-\tau') \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(\tau) \\ + \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(\tau - \tau') \mathcal{G}_{\ell_2\ell_5}(\tau') \mathcal{G}_{\ell_6\ell_3}(-\tau)] \quad (102)$$

が得られる．フーリエ変換は代入法によって

$$\Phi_{xy}^{(3a)}(i\omega\lambda) \\ = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} e^{i\omega\lambda\tau} \\ \times \frac{1}{\beta^3} \sum_{n,n',n''} e^{-i\varepsilon_n''(\tau' - \tau)} \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(i\varepsilon_n'') \\ \times e^{i\varepsilon_n'\tau'} \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(i\varepsilon_n') e^{-i\varepsilon_n\tau} \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(i\varepsilon_n) \\ = \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\ \times \frac{1}{\beta^3} \sum_{n,n',n''} e^{i(\omega\lambda + \varepsilon_n'' - \varepsilon_n)\tau} e^{i(\varepsilon_n' - \varepsilon_n'')\tau'} \\ \times \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(i\varepsilon_n'') \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(i\varepsilon_n') \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(i\varepsilon_n) \\ = \frac{1}{\beta} \sum_n h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\ \times \mathcal{G}_{\ell_2\ell_3}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell_6\ell_1}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell_4\ell_5}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \quad (103)$$

同様にして，

$$\Phi_{xy}^{(3b)}(i\omega\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_n h^{\ell_1\ell_2} j_x^{\ell_3\ell_4} j_y^{\ell_5\ell_6} \\ \times \mathcal{G}_{\ell_4\ell_1}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \mathcal{G}_{\ell_2\ell_5}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \mathcal{G}_{\ell_6\ell_3}(i\varepsilon_n) \quad (104)$$

となる．グリーン関数が対角的であるとして，

$$\Phi_{xy}^{(3)}(i\omega\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_n h^{\ell'\ell} j_x^{\ell''\ell'} j_y^{\ell''\ell'} \\ \times \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \\ + \frac{1}{\beta} \sum_n h^{\ell\ell'} j_x^{\ell''\ell} j_y^{\ell''\ell'} \\ \times \mathcal{G}_\ell(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega\lambda) \mathcal{G}_{\ell''}(i\varepsilon_n) \quad (105)$$

を得る．

### A.3 (91) の導出

(91) は次のようにして導出できる．(90), (88), (89) の寄与を合わせて，

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^{(a)} + \sigma_{xy}^{(b)} \quad (106)$$

$$\sigma_{xy}^{(a)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell'} - n_{\text{F}}^{\ell''}}{\omega_{\ell'\ell''}^2} \left( \frac{1}{\omega_{\ell\ell''}} - \frac{1}{\omega_{\ell'\ell''}} \right) \\ \times \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} h^{\ell''\ell} \right) \\ = \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell'} - n_{\text{F}}^{\ell''}}{\omega_{\ell\ell'} \omega_{\ell'\ell''} \omega_{\ell''\ell}} \\ \times \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} \right) h^{\ell''\ell} \quad (107)$$

$$\sigma_{xy}^{(b)} = -\frac{\hbar}{i} \sum_{\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell'} - n_{\text{F}}^{\ell''}}{\omega_{\ell\ell''}^2} \left( \frac{1}{\omega_{\ell\ell''}} - \frac{1}{\omega_{\ell'\ell''}} \right) \\ \times \left( j_x^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_y^{\ell''\ell} - j_y^{\ell\ell'} h^{\ell'\ell''} j_x^{\ell''\ell} \right) \\ = \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell'} - n_{\text{F}}^{\ell''}}{\omega_{\ell\ell'} \omega_{\ell'\ell''} \omega_{\ell''\ell}} \\ \times \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} \right) h^{\ell''\ell} \quad (108)$$

$\sigma_{xy}^{(b)}$  においては， $\ell \rightarrow \ell'$ ， $\ell' \rightarrow \ell''$ ， $\ell'' \rightarrow \ell$  の書き換えを行なった．これにより (a) と (b) の寄与を統合して，

$$\sigma_{xy} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell'} - n_{\text{F}}^{\ell''}}{\omega_{\ell\ell'} \omega_{\ell'\ell''} \omega_{\ell''\ell}} \\ \times \left( j_x^{\ell\ell'} j_y^{\ell'\ell''} - j_y^{\ell\ell'} j_x^{\ell'\ell''} \right) h^{\ell''\ell} \quad (109)$$

上式 (...) 内第二項の寄与は，変数置換  $\ell \leftrightarrow \ell''$  と (50), (56) を用いれば，第一項の寄与と等しくなる．以上をまとめて，(91) を得る．

#### A.4 (92) の導出

(92) の導出も念のため記しておく .

$$j_{\mu}^{\ell\ell'} = \frac{ie}{\hbar} \omega_{\ell\ell'} A_{0\mu}^{\ell\ell'} = -\frac{e}{\hbar} \omega_{\ell\ell'} \int_{\Omega} u_{\ell}^* \frac{\partial u_{\ell'}}{\partial k_{\mu}} d\mathbf{r} \quad (110)$$

を用いて ,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -2 \frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\ell\ell'\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} \hbar^{\ell''\ell}}{\omega_{\ell\ell''}} \left( A_{0x}^{\ell\ell'} A_{0y}^{\ell'\ell''} - A_{0y}^{\ell\ell'} A_{0x}^{\ell'\ell''} \right) \\ &= 2 \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\ell\ell''} \frac{n_{\text{F}}^{\ell} \hbar^{\ell\ell''}}{\omega_{\ell\ell''}} \left( \frac{\partial A_{0y}^{\ell\ell''}}{\partial k_x} - \frac{\partial A_{0x}^{\ell\ell''}}{\partial k_y} \right) \quad (111) \end{aligned}$$

ここで脚注 6 と同様の公式

$$\sum_{\ell'} \left( A_{0x}^{\ell\ell'} A_{0y}^{\ell'\ell''} - A_{0y}^{\ell\ell'} A_{0x}^{\ell'\ell''} \right) = -i \frac{\partial A_{0y}^{\ell\ell''}}{\partial k_x} + i \frac{\partial A_{0x}^{\ell\ell''}}{\partial k_y} \quad (112)$$

を用いた . 部分積分と  $\partial n_{\text{F}}^{\ell} / \partial k_{\mu} = (\partial n_{\text{F}}^{\ell} / \partial \xi_{\ell}) (\partial \xi_{\ell} / \partial k_{\mu})$  とを用いて , (92) を得る .

#### (その 3) のまとめ

**松原振動数の和** 自己エネルギー補正を考慮しない場合 , グリーン関数二つの積に対する松原振動数の和は容易に取ることができる .

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}_{\ell}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}_{\ell'}(i\varepsilon_n + i\omega_{\lambda}) = \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{i\omega_{\lambda} + \xi_{\ell} - \xi_{\ell'}} \quad (113)$$

ここで , 一粒子グリーン関数は

$$\mathcal{G} = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\ell}} \quad (114)$$

としており ,  $\xi_{\ell}$  はバンド  $\ell$  のエネルギー分散である . (114) の形より , バンド内  $\ell = \ell'$  の寄与はゼロであることがわかる . このことから内因性異常ホール効果についてはバンド間の寄与が本質であるといえる . 以降 ,  $\ell'$  に関する和については  $\ell' \neq \ell$  のみを考える .

解析接続  $i\omega_{\lambda} \rightarrow \hbar\omega + i\delta$  を施し ,  $\hbar\omega$  の 1 次寄与を取り出せば , 上の和はさらに

$$-\hbar\omega \frac{n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'}}{(\xi_{\ell} - \xi_{\ell'})^2} \quad (115)$$

となる .

**ホール伝導度の様々な表し方** ホール伝導度に対する久保公式から出発し , 上記松原振動数の和を取れば ,

$$\sigma_{xy} = \frac{\hbar}{i} \sum_{\mathbf{k}, \ell \neq \ell'} \left( n_{\text{F}}^{\ell} - n_{\text{F}}^{\ell'} \right) \frac{\langle \ell | J_x | \ell' \rangle \langle \ell' | J_y | \ell \rangle}{(\xi_{\ell} - \xi_{\ell'})^2} \quad (116)$$

となる . 上記結果は , 自己エネルギー補正を考慮しない完全結晶の場合にのみ正しく , 異常ホール効果の場合 , 不純物に依存しない内因性異常ホール効果の寄与のみを表す . 以下に続く表式についても同様である .

ここで

$$A_{\mu}^{\ell\ell'}(\mathbf{k}) = i \int_{\Omega} w_{\ell\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial k_{\mu}} w_{\ell'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (117)$$

なる関数を導入すれば , これは電流演算子の行列要素と

$$J_{\mu}^{\ell\ell'} = \frac{ie}{\hbar} (\xi_{\ell} - \xi_{\ell'}) A_{\mu}^{\ell\ell'} \quad \text{for } (\ell \neq \ell') \quad (118)$$

の関係にあることから ,

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\ell \neq \ell'} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_{\text{F}}^{\ell} \left( A_x^{\ell\ell'} A_y^{\ell'\ell} - A_y^{\ell\ell'} A_x^{\ell'\ell} \right) \quad (119)$$

を得る . (120) は部分積分を行うことで ,

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\ell \neq \ell'} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_{\text{F}}^{\ell}}{\partial \xi_{\ell}} \left( \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_x} A_y^{\ell\ell} - \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_y} A_x^{\ell\ell} \right) \quad (120)$$

と表すこともできる . (120) はフェルミ海項として , (121) はフェルミ面項として表現されているが , それらは等価である .

同じバンドに対する関数  $A_{\mu}^{\ell\ell}$  を用いて ,

$$B^{\ell} = \nabla \times A^{\ell\ell} \quad (121)$$

で定義されるベリー曲率を導入すると , ホール伝導度は

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_{\ell} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} n_{\text{F}}^{\ell} B_z^{\ell}(\mathbf{k}) \quad (122)$$

とも表すことができる．当然この表式も，部分積分を行えば，フェルミ面項に書き換えることができ，(121) と等価になる．

以上はスピン軌道結合を厳密に含むが，その役割が明確でない．そこでスピン軌道結合の行列要素  $h^{\ell\ell'} = \langle \ell | H_{\text{so}} | \ell' \rangle$  に対する 1 次項までを取り出せば，

$$\sigma_{xy} = \frac{ie}{4\pi^3} \sum_{\ell \neq \ell'} \int d\mathbf{k} \frac{n_{\text{F}}^{\ell}}{\partial \xi_{\ell}} \frac{h^{\ell\ell'}}{\omega_{\ell}^2} \times \left( \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_x} \langle \ell' | j_y | \ell \rangle_0 - \frac{\partial \xi_{\ell}}{\partial k_y} \langle \ell' | j_x | \ell \rangle_0 \right) \quad (123)$$

となる．ここで  $\langle \dots \rangle_0$  は  $H_0$  に対する期待値であり， $j_{\mu}$  は  $H_0$  に対する電流演算子である．上の結果は KL 理論流に波動関数を摂動展開しても (3.5 節)，摂動展開の一般論に従って導いても (5 節) 同じように得られる．

**摂動展開の一般論** 考えたいハミルトニアン  $H$  を厳密に解ける非摂動項  $H_0$  と摂動項  $H'$  に分けて考える． $H_0$  と  $H = H_0 + H'$  を関連づける演算子として，

$$U(\tau) = e^{\tau H_0} e^{-\tau H} \quad (124)$$

を導入する ( $\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N$ ) この演算子は，いわゆる  $S$  行列と  $U(\tau) = S(0, \tau)$  の関係にある．

この演算子  $U(\tau)$  についての微分方程式を解けば，

$$U(\tau) = 1 - \int_0^{\tau} d\tau' \hat{H}'(\tau') U(\tau') \quad (125)$$

を得る．これは  $U(\tau)$  について再帰的であり，右辺は  $\hat{H}'$  の級数和によって表現できる．この性質を用いて，より簡潔に

$$U(\tau) = T_{\tau} \exp \left[ - \int_0^{\tau} d\tau' \hat{H}'(\tau') \right] \quad (126)$$

と書き表すこともできる．上式で， $\hat{H}'(\tau)$  について望む次数までの展開を考えれば良い．

ここで  $\hat{X}(\tau)$  と表記したのは，演算子  $X$  を相互作用表示したもので，ハイゼンベルグ表示を  $H_0$  で書き直した

$$\hat{X}(\tau) = e^{\tau H_0} X e^{-\tau H_0} \quad (127)$$

を意味する．ハイゼンベルグ表示で書かれた  $X(\tau)$  は相互作用表示では，

$$X(\tau) = U^{-1}(\tau) \hat{X}(\tau) U(\tau) \quad (128)$$

となる．したがって，考えたい演算子を相互作用表示で表し，そこで現れた  $U(\tau)$  を求めたい次数まで展開すれば，機械的に摂動展開が行える．

久保公式における温度相関関数は，

$$\Phi(\tau) = -\langle T_{\tau} \{ B(\tau) \dot{A}(0) \} \rangle = -\frac{\langle T_{\tau} \{ U(\beta) \hat{B}(\tau) \dot{A}_{\nu}(0) \} \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \quad (129)$$

となる．

**スピン軌道結合の対称性** スピン軌道結合ハミルトニアン  $H_{\text{so}}$  は純虚数であり，空間反転対称性を満たす．

$$H_{\text{so}}(\mathbf{r}) = -H_{\text{so}}^* \quad (130)$$

$$H_{\text{so}}(\mathbf{r}) = H_{\text{so}}(-\mathbf{r}) \quad (131)$$

その行列要素は

$$h^{\ell\ell'} = \langle \ell | H_{\text{so}} | \ell' \rangle_0 = -\langle \ell' | H_{\text{so}} | \ell \rangle_0 = -h^{\ell'\ell} \quad (132)$$

の対称性を持つ．この反対称性から，スピン軌道結合は同じバンド間の行列要素を持たないことがわかる．つまり，スピン軌道結合由来の現象は，本質的にバンド間の行列要素によるものである．

$H_0$  に対する電流演算子  $j_{\mu}$  は

$$j_{\mu}^{\ell\ell'} = j_{\mu}^{\ell'\ell} \quad (133)$$

なのに対し， $H_{\text{so}}$  に対する電流演算子  $\mathcal{J}_{\mu}$  は

$$\mathcal{J}_{\mu}^{\ell\ell'} = -\mathcal{J}_{\mu}^{\ell'\ell} \quad (134)$$

の対称性を持つ．これもスピン軌道結合ハミルトニアン  $H_{\text{so}}$  の反対称性に由来する．

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) (その 2)」において，これ



までに分かっている誤記・誤植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] N. Nagaosa: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 042001.
- [2] N. A. Sinitsyn: Journal of Physics: Condensed Matter **20** (2008) 023201.
- [3] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong: Rev. Mod. Phys. **82** (2010) 1539.
- [4] E. H. Hall: Philo. Mag. **12** (1881) 157.
- [5] A. W. Smith and R. W. Sears: Phys. Rev. **34** (1929) 1466.
- [6] E. M. Pugh, N. Rostoker, and A. Schindler: Phys. Rev. **80** (1950) 688.
- [7] R. Karplus and J. M. Luttinger: Phys. Rev. **95** (1954) 1154.
- [8] E. M. Pugh and N. Rostoker: Rev. Mod. Phys. **25** (1953) 151.
- [9] H. Fukuyama: Dr. Thesis, University of Tokyo (1970).
- [10] J. Sinova, T. Jungwirth, and J. Cerne: Int. J. Mod. Phys. B **18** (2004) 1083.
- [11] F. D. M. Haldane: Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 206602.
- [12] M. V. Berry: Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **392** (1984) 45.
- [13] Y. Ando: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 102001.
- [14] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs: Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 405.
- [15] Y. P. Irkhin and V. G. Shavrov: Sov. Phys. JETP **15** (1962) 854.
- [16] H. R. Leribaux: Phys. Rev. **150** (1966) 384.
- [17] A. Abrikosov, L. Gorkov, and I. Dzyaloshinskii: *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 1975), Dover Books on Physics Series.
- [18] G. Mahan: *Many-Particle Physics* (Physics of Solids and Liquids. Springer, 2000), Physics of Solids and Liquids.
- [19] J. M. ザイマン: 現代量子論の基礎 (丸善プラネット, 2008).
- [20] L. I. シッフ: 新版 量子力学 (吉岡書店, 2008).
- [21] A. Fetter and J. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Books on Physics. Dover Publications, 2012), Dover Books on Physics.
- [22] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 012001.