

## 久保公式とグリーン関数法の実践的基礎 (その 4)

伏屋雄紀<sup>1</sup>, 福山秀敏<sup>2</sup><sup>1</sup> 電通大 基盤理工, <sup>2</sup> 東京理科大

## 1 弱磁場ホール効果の量子論

本稿ではいよいよ弱磁場領域におけるホール効果を扱う。1879 年, ホールが金箔でその効果を発見して以来<sup>1)</sup>, 前項で扱った磁性体における異常ホール効果も含め, さまざまな物質で測定された。単純な実験で正確にキャリアの符号およびその密度が決定できるホール効果は, その後の半導体研究の爆発的な進展において極めて重要な役割を果たした。同時に, そこから派生した量子ホール効果やスピンホール効果など, 魅惑的かつ奥深い物理現象を今なお提供し続けている。

ホール効果の基本原理解はローレンツ力によって生じる横電圧として, 自由電子に対しては古典的に理解することができ, 実際ほとんどの固体物理学の教科書にはそのように解説されている。ただし自然はもっと多様で奥が深い。例えば金, 銀, 銅といったごく身近な金属のホール電圧を測定しても, 単純に期待されるような温度依存性を示さない<sup>2)</sup>。そうした半古典的描像で理解できない現象の背景には多体効果や不純物効果, フォノンなどの影響があり, それらの量子効果を系統的に取り扱うためには, 半古典論を超える理論手法の構築が求められていた。

量子論に基づく完全なホール効果の理論の構築には, その重要性にもかかわらず意外にも時間を要し, 1969 年によくその完成を見た<sup>3), 4)</sup><sup>1</sup>。ホール効果の発見より 90 年, 久保公式からも 12 年以上経ってからの理論構築であることに, 読者は驚かれるかもしれない。理論構築に至るまでの経緯

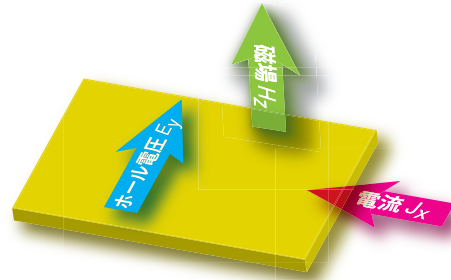


図 1: ホール効果の実験状況。

は, それほどホール効果の量子論的取り扱いが困難であったことを物語っている<sup>2)</sup>。

はじめに, ホール効果について簡単に整理しておこう (図 1)。定常電流の方向を  $x$  方向にとり, その電流密度を  $j_x$  と表す。加える一様磁場  $H_z$  は  $z$  方向にとり,  $y$  方向には電流が流れないという状況を考える。そのとき  $y$  方向に起電力が発生し, 電場  $E_y$  が生じる。ホール係数はこれら 3 つを組み合わせると,

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H_z} \quad (1)$$

と定義される。粒子数密度  $n$ , キャリアの電荷  $q$  を用いて,  $R_H$  は古典論の範囲では

$$R_H = \frac{1}{nqc} \quad (2)$$

となる<sup>3)</sup>。この関係を用いて, ホール係数測定からキャリア数および電荷の符号を決定することがで

<sup>1</sup>量子論に基づいてホール効果の理論を構築しようとする試みは, もちろんそれまでにもあった。例えば久保はウィグナー表示に用いて“古典的”寄与と“量子的”寄与に分けてホール効果を論じようとしたが<sup>5)</sup>, 多体効果などを議論する際にはそれほど便利な形式ではないと後になって認識されるに至った。Springer<sup>6)</sup> や Evans<sup>7)</sup> とも量子論に基づいたホール効果の理論を構築しようとしたが, 彼らの結果はベクトルポテンシャルに対するゲージの選び方に強く依存し, 多体効果の系統的取り扱いには不向き (少なくとも, 相当な理論的困難をともなう) であった。

<sup>2</sup>かの「AGD」ですら, ホール効果については一切触れていない<sup>8)</sup>。

<sup>3</sup>古典的には質量  $m$ , 電荷  $q$  を持つ粒子の電場  $E_x$ , 磁場  $H_z$  のもとでの運動方程式は, 摩擦による緩和時間を  $\tau$  として

$$m\dot{\mathbf{v}} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) - m \frac{\mathbf{v}}{\tau}$$

と書ける。定常状態を仮定すると  $\dot{\mathbf{v}} = 0$  となり, 上式の右辺

きる．一方ミクロには次の伝導度テンソル  $\sigma_{\mu\nu}$

$$j_\mu = \sum_\nu \sigma_{\mu\nu} E_\nu \quad (3)$$

を導入すると，ホール係数は

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}}{(\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2) H_z} \quad (4)$$

と表すことができる<sup>4</sup>．ここで，例外的な場合を除いて成立する関係式  $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$  を用いている．磁場が十分小さい場合はさらに  $R_H = \sigma_{xy}/(\sigma_{xx}\sigma_{yy}H_z)$  とすることができる．この形から弱磁場ホール係数は  $\sigma_{xy}$  において磁場に対する 1 次の係数で決まることがわかる．したがって，本稿の主題は，磁場に対して 1 次のホール伝導度を久保公式に則して  $x, y$  成分について書くと，

$$\begin{aligned} q \left( E_x + \frac{1}{c} v_y H_z \right) - m \frac{v_x}{\tau} &= 0 \\ q \left( E_y - \frac{1}{c} v_x H_z \right) - m \frac{v_y}{\tau} &= 0 \end{aligned}$$

$y$  方向の電流 = 0 とすると  $v_y = 0$  となり， $E_y = v_x H_z / c$ ．したがって，

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H_z} = \frac{v_x H_z}{nq v_x c H_z} = \frac{1}{nqc}$$

となる．

<sup>4</sup>伝導度テンソルの定義 (3) より，

$$\begin{aligned} j_x &= \sigma_{xx} E_x + \sigma_{xy} E_y \\ j_y &= \sigma_{yx} E_x + \sigma_{yy} E_y \end{aligned}$$

今考えている状況では  $j_y = 0$  なので， $E_x = -(\sigma_{yy}/\sigma_{yx}) E_y$ ．これを用いれば

$$j_x = \left( -\frac{\sigma_{xx}\sigma_{yy}}{\sigma_{yx}} + \sigma_{xy} \right) E_y$$

ホール係数の定義 (1) に代入して，

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}}{(-\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}\sigma_{yx}) H}$$

を得る．

なお，抵抗率テンソル  $\rho_{\mu\nu}$  は  $E_\mu = \sum_\nu \rho_{\mu\nu} j_\nu$  として定義され， $j_y = 0$  より， $\rho_{yx} = E_y/j_x$  である．すなわち，ホール係数はホール抵抗を用いて

$$R_H = \frac{\rho_{yx}}{H}$$

と定義することもできる．抵抗率は伝導度の逆行列

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}} \begin{pmatrix} \sigma_{yy} & -\sigma_{xy} \\ -\sigma_{yx} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}$$

であるので，直ちに

$$R_H = \frac{-\sigma_{yx}}{(\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}) H}$$

を示すこともできる．

て求めることである．なお，ボルツマン方程式に基づいてホール伝導度を求めると，次の結果が得られる<sup>4),9)</sup>．

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\frac{2e^3 H \tau_k^2}{c \hbar^4} \sum_{\mathbf{k}} \left( -\frac{dn_{\mathbf{F}}(\xi_{\mathbf{k}})}{d\xi_{\mathbf{k}}} \right) \\ &\times \left[ \left( \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right] \quad (5) \end{aligned}$$

(ここでは素電荷  $e > 0$  を用いた．) この表式に基づけば，フェルミ準位近傍のエネルギー分散  $\xi_{\mathbf{k}}$  の曲率，つまり，伝導を担うキャリアが正孔か電子的かに応じて，ホール伝導度の符号が変わることがわかる．

弱磁場ホール伝導度もこれまで見てきた伝導度計算の流れと全く同じく，久保公式とグリーン関数を用いて求めることができる．初めに温度グリーン関数を用いて相関関数を記述し，その後解析接続によって遅延・先進グリーン関数に書き換える．最後に  $\omega \rightarrow 0$  の極限を取って静的ホール伝導度の表式を得る．ただし，これまでの計算と決定的に異なるのは，磁場の効果を量子論的に正しく取り扱う必要がある点である．この取り扱いの難しさこそがホール伝導度の量子的計算を困難にしていた．ただし，全てが確立された今となっては，いくつかの点に注意さえ払えばさほど難しいものでもない．ベクトルポテンシャルを  $A(\mathbf{r}) = A_q e^{iq \cdot \mathbf{r}}$  のように一旦フーリエ展開し，この  $A_q$  を用いて計算を進め，最後に  $q \rightarrow 0$  と取る ( $q$  の一次項を取りだす) ことでこの困難を回避し，ゲージ不変な結果を手にするすることができる．

久保公式に基づく一般的なホール伝導度の表式を導いた後，3つの具体的な計算を取り上げる．第一にほとんど自由な電子を考える．ここでは，パーテックス補正も考慮し，パーテックス補正を扱うための計算技法も紹介する．このパーテックス補正の寄与を輸送緩和時間  $\tau_{\text{tr}}$  に含んでしまえば，最終的に得られた結果は

$$\sigma_{xy} = -\frac{ne^2}{m} \omega_c \tau_{\text{tr}}^2$$

となり，半古典近似による結果と一致する．

第二にプロッホ電子を扱う．「磁場中のプロッホ電子をいかに記述するか」という問題は，一見簡

単そうに見える命題とは裏腹に、非常に奥が深い。結晶の周期的なポテンシャルと磁場の空間的に一様なポテンシャルを同時に扱わなくてはならないところに、その難しさがある。ここではまず、その磁場中のプロッホ電子を理論的に扱う一つの強力な手法として *Luttinger-Kohn* 表示を導入し、具体的な物理量の計算が可能になることを見る。理論は一般に多数のバンドを考慮した形で進める。得られた結果から、1つのバンドのみを取り上げて計算を行えば、ボルツマン方程式から導かれた結果 (5) に一致する。

最後に、より現代的な実践例として、質量のないディラック電子 (ワイル電子) を取り上げる。これは多バンド系に対する「バンド間磁場効果」も考慮した計算の最も簡単な例と見ることにもできる。最終的に得られた結果では、バンド間の効果が顕著に現れ、従来の半古典論では到達できなかった領域に足を踏み入れることができる。

## 2 ベクトルポテンシャルの取り扱い

磁場の軌道効果を含んだハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \int d\mathbf{r} \frac{1}{2m} \left[ \left( i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \right] \cdot \left[ \left( -i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi(\mathbf{r}) \right] \quad (6)$$

で与えられる。一方、電磁場中の電流演算子は、

$$\mathbf{J}_{\text{tot}} = \frac{ie\hbar}{2m} \left\{ \psi^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - \nabla \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right\} - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (7)$$

となる<sup>5</sup>。ホール効果の理論における困難な点の一つは、ここで現れるベクトルポテンシャルの取り扱いにある。加える磁場が空間的に一様な場合、ベクトルポテンシャルは無限遠方で発散する形になり<sup>6</sup>、その扱いに細心の注意を要する<sup>7</sup>。この困

<sup>5</sup>この導出に関しては、例えばシッフ「量子力学」の第 XIV 章などを参考のこと<sup>10)</sup>。

<sup>6</sup>例えばランダウゲージであれば、 $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$ 、対称ゲージであれば  $\mathbf{A} = (-Hy/2, Hx/2, 0)$  のように。

<sup>7</sup>実空間における座標の取り扱い注意については (その 3) 脚注 4 も参考のこと。

難は、あるアイデアによってうまく解消することができる<sup>3)</sup>。まず初めにベクトルポテンシャルを平面波の形

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_q e^{iq \cdot \mathbf{r}} \quad (8)$$

で表す。こうすれば、無限遠方からの非物理的な寄与を避けることができ、また長波長極限 ( $q \rightarrow 0$ ) をとることで、一様な磁場を扱うこともできる。つまり、有限の  $q$  を用いて計算を進め、 $q$  の 1 次項を取り出せば良い。

電流演算子 (7) 第一項のフーリエ展開は

$$\mathbf{j}_\mathbf{k} = \frac{ie\hbar}{2m} \int d\mathbf{r} e^{-ik \cdot \mathbf{r}} \times \left\{ \psi^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - \nabla \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right\} \quad (9)$$

であり、第二項は (8) の形を代入して、

$$\mathcal{J}_\mathbf{k} = -\frac{e^2}{mc} \rho(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \mathbf{A}_q \quad (10)$$

$$\rho_\mathbf{k} = \int d\mathbf{r} e^{-ik \cdot \mathbf{r}} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (11)$$

となる。本稿の目的は磁場に対して 1 次の範囲まで (弱磁場領域) を調べることであり、その場合には  $\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_H$  として、

$$\mathcal{H}_0 = -\int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \quad \mathcal{H}_H = -\frac{1}{c} \mathbf{j}_{-\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}_q \quad (12)$$

までを考えれば十分である。

もう一つ、ベクトルポテンシャルの取り扱いで注意を要するのは、ゲージの依存性についてである。磁場中の計算では、ゲージの取り方によって結果が変わってしまうことがしばしば起こる。しかしもちろん最終的な物理量はゲージ不変であるべきで、理論としてはゲージ不変な結果を得て初めてその正当性を確信することができる。今のように  $q$  展開を行う場合、求める物理量の表式で

$$q_x A_{qy} - q_y A_{qx}$$

の形に整理することができれば、それは  $-iH$  と置き換えることができる<sup>8</sup>。つまり、具体的なゲージ

<sup>8</sup>ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  と磁束密度  $\mathbf{B}$  の関係は

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

を仮定することなく、ゲージ不変な結果を得ることができる。非常に簡明なアイデアであるが、これがゲージ不変なホール効果の理論構築への突破口となる<sup>3),4)</sup>、コロンブスの卵であった。

### 3 久保公式とグリーン関数による計算

先に計算の全体像を見ておく。ホール効果では電場と磁場双方を加えるが、「縦方向 ( $x$  方向) の電場に対する横方向 ( $y$  方向) の電流応答」と考える点では、電気伝導度と同じである (図 1)。そこにさらに磁場の項がハミルトニアンに加わる。弱磁場極限のホール伝導度に関心がある場合、磁場について 1 次の範囲までを考えればよく、それについては (その 3) の異常ホール効果における、スピン軌道結合ハミルトニアンと同様に取り扱えば良い。

#### 3.1 久保公式によるホール伝導度

久保公式に基づき、磁場の 1 次まで摂動展開を行なった結果は、次のようにまとめることができる<sup>9</sup>。伝導度の非対角成分を

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{i\omega} [K_{\mu\nu}^{\alpha, R}(\mathbf{q}, \omega) - K_{\mu\nu}^{\alpha, R}(\mathbf{q}, 0)] A_{q\alpha} \quad (13)$$

である。磁束密度  $B$  と磁場の強さ  $H$  は磁化  $M$  を用いて  $B = H + 4\pi M$  の関係にある。通常の金属では  $M$  の寄与を無視でき、 $B \sim H$  となるので、本稿では  $B$  と  $H$  の区別をしない。いま、 $H = (0, 0, H)$  の磁場を考え、(8) の定義を代入すれば、

$$H = \nabla_x A_y - \nabla_y A_x = i(q_x A_{qy} - q_y A_{qx})$$

が導かれる。より一般的には、

$$\mathbf{H} = i\mathbf{q} \times \mathbf{A}_q$$

の形に整理すれば良い。

<sup>9</sup>異常ホール伝導度で見たように、電流演算子  $\mathcal{J}_q$  を展開して得られる項  $\Phi_{\mu\nu}^{(2)}$  と、期待値  $\langle \dots \rangle$  部分を展開して得られる項  $\Phi_{\mu\nu}^{(3)}$  に分けて考える。まず  $\Phi_{\mu\nu}^{(2)}$  に対して、

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau \{ \mathcal{J}_{q\mu}(\tau) j_{0\nu}(0) \} \rangle_0 + \langle T_\tau \{ j_{q\mu}(\tau) \mathcal{J}_{0\nu}(0) \} \rangle_0 \\ &= -\frac{e^2}{mc} \langle T_\tau \{ \rho_0(\tau) A_{q\mu} j_{0\nu}(0) \} \rangle_0 \\ & - \frac{e^2}{mc} \langle T_\tau \{ j_{q\mu}(\tau) \rho_{-q}(0) A_{q\nu} \} \rangle_0 \end{aligned}$$

のように書き表せば、

$$K_{\mu\nu}^\alpha(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = \frac{e^2}{mc} K_\mu^{\alpha(2)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) + \frac{1}{c} K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) \quad (14)$$

$$K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = \delta_{\nu\alpha} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \{ j_{q\mu}(\tau) \rho_{-q}(0) \} \rangle_0 \quad (15)$$

$$\begin{aligned} K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) &= - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_\lambda \tau} \\ & \times \langle T_\tau \{ j_{q\mu}(\tau) j_{-q\alpha}(\tau') j_{0\nu}(0) \} \rangle_0 \end{aligned} \quad (16)$$

となる。ここで、式中に共通する指標が現れた時は、その和を取ることを約束しておく。ここまでの計算は、線形応答の範囲内では厳密である。

今考えている電流演算子は波数  $q$  の変化を伴うので、パーテックス補正がない場合は、

$$\mathbf{j}_q = -\frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}-\frac{1}{2}\mathbf{q}}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{q}} \quad (17)$$

である<sup>10</sup>。ここで、 $\mathbf{k}^\pm = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$ 、 $\varepsilon_{n-} = \varepsilon_n - \omega_\lambda$  とした。しかし異常ホール効果とは異なり、通常ホール効果は不純物散乱やフォノン散乱による自己となるが、 $\rho_0$  は定義より定数であり、第 1 項目は  $\langle j_{0\nu}(0) \rangle_0 = 0$  より寄与しない。一方  $\Phi_{\mu\nu}^{(3)}$  に対しては、

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau \{ j_\mu(\mathbf{q}, \tau) j_\nu(0, 0) \} \rangle \\ &= \left\langle T_\tau \left\{ \left[ - \int_0^\beta d\tau' \mathcal{H}_H(\tau') \right] j_{q\mu}(\tau) j_{0\nu}(0) \right\} \right\rangle_0 \end{aligned}$$

を得る。

<sup>10</sup>電流演算子のフーリエ展開について、 $q$  が有限の場合を念のため確認しておこう。

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \psi^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'}^\dagger e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \end{aligned}$$

として、電流演算子の定義 (9) に従えば、

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_q &= -\frac{e\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} (\mathbf{k} + \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}} \\ &= -\frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}} \left( \mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

となる。このままでも構わないが、対称化するために  $\bar{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{q}/2$  を導入すれば、

$$\mathbf{j}_q = -\frac{e\hbar}{m} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \bar{\mathbf{k}} c_{\bar{\mathbf{k}}-\frac{1}{2}\mathbf{q}}^\dagger c_{\bar{\mathbf{k}}+\frac{1}{2}\mathbf{q}}$$

を得る。

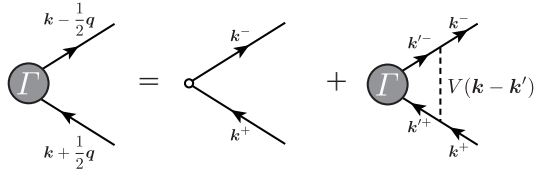


図 2: パーテックス補正に対する無限級数和 . パーテックスから外へと  $q$  の波数が運び出されていると見なすことができる .

エネルギーの寄与を無視することができない (無視すると発散してしまう .) そこで一体のグリーン関数として ,

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)} \quad (18)$$

を考える . 自己エネルギーは一般に

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}', n'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathcal{G}(\mathbf{k}', i\varepsilon_{n'}) \quad (19)$$

の形をとるものとする<sup>11</sup> . このとき , 電流演算子  $j_q$  に対するパーテックス補正は ( その 2 ) §6 を参考にすれば ,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) &= -\frac{e\hbar}{m} \mathbf{k} + \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) \mathbf{J}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n; \mathbf{k}'^-, i\varepsilon_{n-}) \mathcal{G}(\mathbf{k}'^-, i\varepsilon_{n-}) \end{aligned} \quad (20)$$

とすることができる . これをファインマン図形を用いて表したものが図 2 である .

このパーテックス補正も考慮した上で ,  $K_{\mu\nu}^{\alpha}$  部分を一体グリーン関数によって表せば次のようになる .

$$\begin{aligned} K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) &= -\delta_{\nu\alpha} \frac{1}{\beta} \sum_{n, \mathbf{k}} \mathcal{G}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) \\ &\times J_\mu(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) \mathcal{G}(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) \end{aligned} \quad (21)$$

<sup>11</sup>例えば ( その 2 ) で見た不純物散乱であれば ,  $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = N_i |u(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2$  の対応がある . なお , ここでは松原振動数に依存しない静的散乱ポテンシャルを考えるが , より一般に動的散乱ポテンシャルまで含む場合は ,  $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\varepsilon_n - i\varepsilon_{n'})$  とする必要がある .

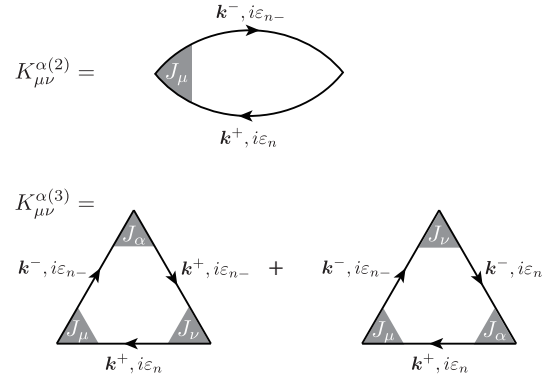


図 3: パーテックス補正も考慮した  $K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  と  $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  のファインマン図形 .

$$\begin{aligned} K_{\mu\nu}^{\alpha(3a)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) &= -\frac{1}{\beta} \sum_{n, \mathbf{k}} \mathcal{G}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) J_\mu(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) J_\alpha(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}; \mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) J_\nu(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) \quad (22) \\ K_{\mu\nu}^{\alpha(3b)}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) &= -\frac{1}{\beta} \sum_{n, \mathbf{k}} \mathcal{G}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) J_\mu(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}) J_\nu(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_{n-}; \mathbf{k}^-, i\varepsilon_n) \\ &\times \mathcal{G}(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_n) J_\alpha(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) \quad (23) \end{aligned}$$

以上をファインマン図形で表したのが図 3 である . ここで現れるパーテックスは , 磁場と結合する  $J_\alpha$  , 電場と結合する  $J_\nu$  , 電流として観測される  $J_\mu$  に分類され , それぞれ構造が少しずつ異なる .  $J_\alpha$  では便宜上空間変調する磁場を考えているので , 波数が  $k^- \rightarrow k^+$  と変化する . これは磁場から波数  $q$  を受け取っているとも解釈できる . ただし静的な磁場を考えているため , 振動数は変化しない . 一方 , 電場は空間的に一様であるが , 時間変調するため ,  $J_\nu$  では振動数のみが  $i\varepsilon_{n-} \rightarrow i\varepsilon_n$  と変化する . ここでも , 電場から振動数  $i\omega_\lambda$  を受け取っていると解釈できる . これら二種類の電磁場の影響を受けて生成される電流  $J_\mu$  では , 波数も振動数も変化する . ここでは , 受け取った波数  $q$  と振動数  $i\omega_\lambda$  とを外へ放出していると考えることができる . ファインマン図形から直接代数式を導く際に

は，こうした点に注意してそれぞれの波数・振動数依存性を決めれば良い．

## 3.2 $q$ 展開

### 3.2.1 グリーン関数に対する展開

$q$  に対する展開は，グリーン関数部分の展開と，パーテックス部分のものに分けられる．まず前者を考える．結論を先に言うと， $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  からの寄与は全て打ち消し合い， $K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  からの寄与のみが残る．

$K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  を  $q$  展開すると，(14) の係数  $e^2/mc$  も考慮して，

$$-\frac{e^2}{mc} \frac{q_\eta}{2} \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \delta_{\nu\alpha} \quad (a)$$

$$+\frac{e^2}{mc} \frac{q_\eta}{2} \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- \delta_{\nu\alpha} \quad (b)$$

である．ここで， $\mathcal{G}_+ = \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$ ， $\mathcal{G}_- = \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_{n-})$  を表している．また， $\partial_\eta = \partial/\partial k_\eta$  であり，直後の関数のみに作用している．パーテックスの振動数依存性については，明記しなくても区別することができる<sup>12</sup>．全体に共通する  $\frac{1}{\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \sum_\eta$  は省略してある．

この寄与を図示したものが，図 6 (a), (b) である．微分操作  $\partial_\mu$  については  $\times$  をつけて表してある．

$K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  を  $q$  展開すると，(3a), (3b) の寄与をあわせて，

$$\frac{q_\eta}{2} [\partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- J_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu - \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ J_\alpha] \quad (24)$$

となる<sup>13</sup>．ここで，次の一般化されたワード恒等

<sup>12</sup>パーテックスの振動数依存性は，前後の  $\mathcal{G}$  の振動数依存性を見ても確認することができる．たとえば，

$$\mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \Rightarrow \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) J_\mu(\mathbf{k}, i\varepsilon_n; \mathbf{k}, i\varepsilon_{n-}) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_{n-})$$

のように．

<sup>13</sup> $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  からの寄与を愚直に書き出せば，

$$(3a) \Rightarrow \frac{q_\eta}{2} \left[ \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- J_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu - \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- J_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu + \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- J_\alpha \partial_\eta \mathcal{G}_- J_\nu \right]$$

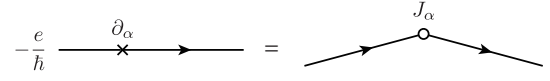


図 4: 一般化されたワード恒等式に基づく微分操作．

式を取り上げる<sup>14</sup>．

$$\begin{aligned} & \sum_\alpha \hbar q_\alpha J_\alpha(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_n; \mathbf{k}^+, i\varepsilon_n) \\ & = -e [\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}^-, i\varepsilon_n) - \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}^+, i\varepsilon_n)] \quad (25) \end{aligned}$$

これを用いれば， $q \rightarrow 0$  のとき，

$$J_\alpha(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{e}{\hbar} \partial_\alpha \{ \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \} \quad (26)$$

であることから，

$$J_\alpha(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}^2(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = -\frac{e}{\hbar} \partial_\alpha \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \quad (27)$$

が導かれる．これは，微分操作を施すことは，そこでグリーン関数を分断し，パーテックスを新たに付け加える操作に置き換えられることを意味している(図 4)<sup>15</sup>．この恒等式を用いれば，(24) は，

$$-\frac{e}{\hbar} \frac{q_\eta}{2} [\partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu - \partial_\alpha \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- J_\nu] \quad (28)$$

となるが，これは系が等方的な場合は，打ち消しあうことになる．結局， $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  の寄与は全て消える．

### 3.2.2 パーテックスに対する展開

次にパーテックス部分の  $q$  展開を考える．三種のパーテックスは，それぞれわずかに構造(引数)が異なることはすでに述べた．それぞれに応じて  $q$  展開も異なってくる．

磁場と結合する  $J_\alpha$  については，振動数は変化しないので，(20) で  $\omega_\lambda = 0$  とした方程式に従う．そ

$$(3b) \Rightarrow \frac{q_\eta}{2} \left[ \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ J_\alpha - \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ J_\alpha - \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- J_\nu \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\alpha \right]$$

となるが，(3a) では第 2 項と第 3 項が，(3b) では第 1 項と第 3 項が打ち消しあう．

<sup>14</sup>一般化されたワード恒等式の導出については，例えば文献<sup>11</sup>の 8-5 節を参照のこと．

<sup>15</sup>このことは一般に成り立つことであり，グリーン関数を用いた計算でしばしば現れる．

の方程式は明らかに  $q \leftrightarrow -q$  の入れ替え ( $k^+ \leftrightarrow k^-$  の入れ替え) に対して対称である．ということとは，

$$J_\alpha(k^-, i\varepsilon_n; k^+, i\varepsilon_n) = J_\alpha(k, i\varepsilon_n; k, i\varepsilon_n) + \mathcal{O}(q^2) \quad (29)$$

であることがわかる．つまり， $J_\alpha$  から  $q$  の1次項は現れない．

電場と結合する  $J_\nu$  について， $J_\nu(k^+, i\varepsilon_n; k^+, i\varepsilon_n)$  は単に  $J_\nu(k, i\varepsilon_n; k, i\varepsilon_n)$  の  $k$  を  $\frac{1}{2}q$  だけずらしたものである．したがって，

$$\begin{aligned} J_\nu(k^+, i\varepsilon_n; k^+, i\varepsilon_n) \\ = J_\nu(k, i\varepsilon_n; k, i\varepsilon_n) + \frac{1}{2}q\eta\partial_\eta J_\nu(k, i\varepsilon_n; k, i\varepsilon_n) \end{aligned} \quad (30)$$

とすることができる．

最後に，観測される電流  $J_\mu$  だが，これは波数も振動数も変化するので，少し複雑である．以下で紹介する論理形式は，一般の場合にも適用できるので，是非参考にしていただきたい．まず次のように  $J'_\mu$  を定義する．

$$\begin{aligned} J_\mu(k^+, i\varepsilon_n; k^-, i\varepsilon_n) \\ = J_\mu(k, i\varepsilon_n; k, i\varepsilon_n) + J'_\mu(k^+, i\varepsilon_n; k^-, i\varepsilon_n) \end{aligned} \quad (31)$$

これを (20) 代入し， $q$  について1次の量だけを抜き出せば，次の  $J'_\mu$  に対する積分方程式を得る．

$$\begin{aligned} J'_\mu(k^+, i\varepsilon_n; k^-, i\varepsilon_n) \\ = \sum_{k'} V(k - k') \\ \times \mathcal{G}(k', i\varepsilon_n) J'_\mu(k'^+, i\varepsilon_n; k'^-, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(k', i\varepsilon_n) \\ + \frac{q\eta}{2} \sum_{k'} V(k - k') \\ \times \left[ \partial_\eta \mathcal{G}(k', i\varepsilon_n) J_\mu(k', i\varepsilon_n; k', i\varepsilon_n) \mathcal{G}(k', i\varepsilon_n) \right. \\ \left. - \mathcal{G}(k', i\varepsilon_n) J_\mu(k', i\varepsilon_n; k', i\varepsilon_n) \partial_\eta \mathcal{G}(k', i\varepsilon_n) \right] \end{aligned} \quad (32)$$

これをファインマン図形で表したのが，図5である．ここで  $J_\mu$  は  $\circ$ ， $J'_\mu$  は  $\square$  で表してある． $K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$

$$J'_\mu \square = J'_\mu \square + \frac{q\eta}{2} \left[ J_\mu \circ - J_\mu \circ \right]$$

図 5:  $J'_\mu$  に対する積分方程式．

$$-\frac{e^2 q\eta}{mc^2} \left[ \text{(a)} - \text{(b)} \right]$$

$$-\frac{e^2}{mc} J'_\mu \square \delta_{\nu\alpha} \quad \text{(c)}$$

$$\frac{e}{ch} \left[ \text{(d)} + \text{(e)} \right]$$

$$\frac{e q\eta}{ch^2} \left[ \text{(f)} - \text{(g)} \right]$$

図 6:  $q$  展開を施した後の  $K_{\mu\nu}^\alpha$  への寄与．この中では色をつけた (f), (g) が最終的に残る．

のバーテックス部分を  $q$  展開すれば，

$$-\frac{e^2}{mc} \delta_{\nu\alpha} \mathcal{G}_+ J'_\mu \mathcal{G}_- \quad (c)$$

であり，これを図示したものが図 6(c) である． $K_{\mu\nu}^{\alpha(3a)}$  からの寄与は，(27) を用いて，

$$\frac{1}{c} \left[ -\mathcal{G}_+ J'_\mu \mathcal{G}_- J_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu - \frac{q\eta}{2} \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- J_\alpha \mathcal{G}_- \partial_\eta J_\nu \right]$$

$$= \frac{e}{ch} \left[ \mathcal{G}_+ J'_\mu \partial_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu + \frac{q\eta}{2} \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\alpha \mathcal{G}_- \partial_\eta J_\nu \right] \quad (d)$$

であり，それぞれ図 6(d), (f) となる． $K_{\mu\nu}^{\alpha(3b)}$  から



$$\frac{e}{c\hbar} \left[ \begin{array}{c} \frac{q\eta}{2} \left[ \begin{array}{c} \text{(h)} \\ \text{(i)} \end{array} \right] \\ \text{(j)} \\ \frac{e}{c\hbar} \left[ \begin{array}{c} \text{(k)} \\ \text{(l)} \end{array} \right] \\ \text{(m)} \end{array} \right]$$

図 7: (d) と (e) の  $J'_\mu$  を (32) を用いて展開 .

の寄与も同様にして ,

$$\frac{e}{c\hbar} \left[ J'_\mu \mathcal{G}_- J_\nu \partial_\alpha \mathcal{G}_+ \right] \quad (\text{e})$$

$$- \frac{q\eta}{2} J_\mu \mathcal{G}_- \partial_\eta J_\nu \partial_\alpha \mathcal{G}_+ \quad (\text{g})$$

および図 6(e), (g) となる .

### 3.3 ゲージ不変な形を導く

ここからさらにゲージ不変な形を導くため , それぞれの寄与を整理する . 目標は , §2 で述べた通り ,  $q$  展開した後の式から  $q_\mu A_{q\nu} - q_\nu A_{q\mu}$  の形を引き出すことである .

(d) の寄与は (32) を用いれば ,

$$\frac{e}{c\hbar} \left[ \begin{array}{l} \frac{q\eta}{2} \partial_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \partial_{\eta'} \mathcal{G}_{+'} J_\mu \mathcal{G}_{-'}\} \quad (\text{h}) \\ - \frac{q\eta}{2} \partial_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{+'} J_\mu \partial_{\eta'} \mathcal{G}_{-'}\} \quad (\text{i}) \\ + \partial_\alpha \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{+'} J'_\mu \mathcal{G}_{-'}\} \quad (\text{j}) \end{array} \right]$$

となる (図 7) . 引数は下付き文字とし ,  $\{\dots\}$  内は  $\sum_{\mathbf{k}'}$  の和を取るものとする . 同様に , (e) の寄与は

$$\frac{e}{c\hbar} \left[ \begin{array}{l} \frac{q\eta}{2} \mathcal{G}_- J_\nu \partial_\alpha \mathcal{G}_+ \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \partial_{\eta'} \mathcal{G}_{+'} J_\mu \mathcal{G}_{-'}\} \quad (\text{k}) \\ - \frac{q\eta}{2} \mathcal{G}_- J_\nu \partial_\alpha \mathcal{G}_+ \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{+'} J_\mu \partial_{\eta'} \mathcal{G}_{-'}\} \quad (\text{l}) \\ + \mathcal{G}_- J_\nu \partial_\alpha \mathcal{G}_+ \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{+'} J'_\mu \mathcal{G}_{-'}\} \quad (\text{m}) \end{array} \right]$$

となる . ここで (h) と (k) をあわせて

$$\frac{e}{c\hbar} \frac{q\eta}{2} \left[ \partial_\alpha (\mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+) - \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu \mathcal{G}_+ \right] \times \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \partial_{\eta'} \mathcal{G}_{+'} J_\mu \mathcal{G}_{-'}\} \quad (33)$$

となるが , このうち第 1 項は  $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'$  の置き換えを行なって ,

$$\frac{e}{c\hbar} \frac{q\eta}{2} \partial_{\eta'} \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \partial_{\alpha'} (\mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'})\}$$

$$= \frac{e}{c\hbar} \frac{q\eta}{2} \partial_{\eta'} \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \partial_\alpha \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'}\} \quad (34)$$

とすることができる . ここで次の関係

$$\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \partial_{\alpha'} (\mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'})$$

$$= \partial_\alpha \left( \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'} \right) \quad (35)$$

を用いた<sup>16</sup> .

ところで ,  $J_\nu$  に関する積分方程式 (20) の両辺を  $k_\alpha$  で微分すると ,

$$\partial_\alpha J_\nu = -\frac{e\hbar}{m} \delta_{\nu\alpha} + \partial_\alpha \{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'}\} \quad (36)$$

<sup>16</sup>ここで用いた関係を補足しておく .

$$\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \partial_{\alpha'} (\mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'})$$

を  $k'_\alpha$  について部分積分を行えば ,

$$- \sum_{\mathbf{k}'} (\partial_{\alpha'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) \mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'}$$

を得るが ,

$$\partial_{\alpha'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = -\partial_\alpha V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$$

の関係を用いて ,

$$\sum_{\mathbf{k}'} (\partial_\alpha V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}) \mathcal{G}_{-'} J_\nu \mathcal{G}_{+'}$$

とすることができる . この  $\partial_\alpha$  は ,  $\mathbf{k}'$  には作用しないので ,  $\sum_{\mathbf{k}'}$  の前に出しても差し支えない . 斯くして (35) を得る .



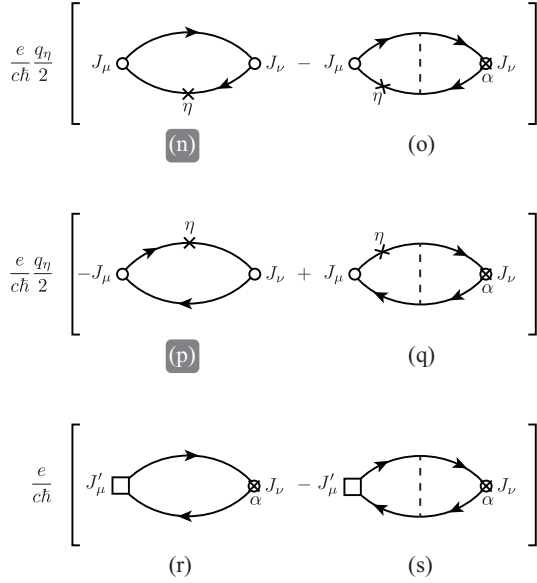


図 8: (a), (h), (k) を合わせて (n), (o) を得る . 同様に , (b), (i), (l) から (p), (q) を , (c), (j), (m) から (r), (s) を得る . さらに (o), (q), (s) は (32) の関係から (r) と打ち消しあう . この中では色をつけた (n), (p) が最終的に残る .

となるので , (a) の寄与は

$$\frac{e}{c\hbar} \frac{q_\eta}{2} \left[ \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu - \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \partial_\alpha \{ V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_- J_\nu \mathcal{G}_+ \} \right] \quad (37)$$

と書き換えることができる . このうち第 2 項は (34) と打ち消しあう . 結局 , (a), (h), (k) を合わせて ,

$$\frac{e}{c\hbar} \frac{q_\eta}{2} \left[ \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu - \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu \mathcal{G}_+ \right] \quad (n)$$

となる ( 図 8 ) . 全く同様にして , (b), (i), (l) は

$$\frac{e}{c\hbar} \frac{q_\eta}{2} \left[ -\mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu + \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu \mathcal{G}_+ \right] \quad (p)$$

(c), (j), (m) は

$$\frac{e}{c\hbar} \left[ \mathcal{G}_+ J'_\mu \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu - \mathcal{G}_+ J'_\mu \mathcal{G}_- V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu \mathcal{G}_+ \right] \quad (r)$$

$$\quad (s)$$

となる . さらに (o), (q), (s) を足し合わせて (32) を合わせ使うと ,

$$\begin{aligned} & -\frac{e}{c\hbar} \left[ \frac{q_\eta}{2} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \{ \partial_\eta \mathcal{G}_+ J_\mu \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\eta \mathcal{G}_- \} \right. \\ & \quad \left. + V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \mathcal{G}_+ J'_\mu \mathcal{G}_- \right] \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu \mathcal{G}_+ \\ & = -\frac{e}{c\hbar} J'_\mu \mathcal{G}_- \partial_\alpha J_\nu \mathcal{G}_+ \end{aligned} \quad (38)$$

となるが , これは (r) と打ち消しあって消える .

最終的に残る寄与は , 図 6, 8 において色をつけた (f), (g), (n), (p) だけとなる . このうち , (f), (p) は ,

$$f_{\alpha\eta}^{\mu\nu} \equiv \frac{e}{2c\hbar} \mathcal{G}_+ J_\mu \partial_\alpha \mathcal{G}_- \partial_\eta J_\nu \quad (39)$$

を用いて ,

$$(f)+(p) = q_\eta (f_{\alpha\eta}^{\mu\nu} - f_{\eta\alpha}^{\mu\nu}) \quad (40)$$

という形になるが , これは

$$(q_\mu \delta_{\nu\alpha} - q_\nu \delta_{\mu\alpha}) (f_{\mu\nu}^{\mu\nu} - f_{\mu\nu}^{\mu\nu}) \quad (41)$$

と置き換えることができる<sup>17</sup> . 全く同様の関係が (g), (n) に対しても成り立つ . 今考えている  $K_{\mu\nu}^\alpha$  の外に  $A_{q,\alpha}$  がかかっていることを考慮すると ,  $q_x \delta_{y\alpha} - q_y \delta_{x\alpha}$  の部分は

$$q_x A_{qy} - q_y A_{qx} = -iH \quad (42)$$

となる . すなわち ,  $A_q$  のゲージに依存することなく , 全体が磁場  $H$  に比例する形で得られる . これ が 求めていた ゲージ不変性を保証する .

<sup>17</sup>この関係を詳しく導いておく .

$$\begin{aligned} \sum_\eta q_\eta (f_{\alpha\eta}^{xy} - f_{\eta\alpha}^{xy}) &= q_x (f_{\alpha x}^{xy} - f_{x\alpha}^{xy}) + q_y (f_{\alpha y}^{xy} - f_{y\alpha}^{xy}) \\ &\quad + q_z (f_{\alpha z}^{xy} - f_{z\alpha}^{xy}) \end{aligned}$$

ここで  $f_{\alpha\eta}$  は , 例えば

$$f_{\alpha\eta}^{xy} \propto k_x k_y k_\alpha k_\eta$$

のように ,  $k_x, k_y, k_\alpha, k_\eta$  全てについて奇関数であり ,  $\mathbf{k}$  についての積分を考えると , 偶関数の項のみが残り ,

$$\begin{aligned} \sum_\eta q_\eta (f_{\alpha\eta}^{xy} - f_{\eta\alpha}^{xy}) &= q_x \delta_{y\alpha} (f_{yx}^{xy} - f_{xy}^{xy}) + q_y \delta_{x\alpha} (f_{xy}^{xy} - f_{yx}^{xy}) \\ &= (q_x \delta_{y\alpha} - q_y \delta_{x\alpha}) (f_{yx}^{xy} - f_{xy}^{xy}) \end{aligned}$$

となる .

以上をまとめて，ゲージ不変なホール伝導度の公式として，

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{eH}{c\hbar\omega} \frac{1}{\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \left[ J_\mu \partial_\nu J_\nu (\mathcal{G}_+ \partial_\mu \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_- \partial_\mu \mathcal{G}_+) - J_\mu \partial_\mu J_\nu (\mathcal{G}_+ \partial_\nu \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_- \partial_\nu \mathcal{G}_+) \right] \quad (43)$$

を得る．ここで，スピンの和を考慮して係数を2倍した．

等方的な場合，パーテックス補正を考慮した  $J$  もやはり  $-(e\hbar/m)\mathbf{k}$  に比例するはずなので，補正分を  $\chi(\mathbf{p}, i\varepsilon_n, i\omega_\lambda)$  で表せば，

$$\mathbf{J}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n, i\varepsilon_{n-}) = -\frac{e\hbar}{m} \mathbf{k} \chi(\mathbf{k}, i\varepsilon_n, i\varepsilon_{n-}) \quad (44)$$

とすることができる．このことを考慮すれば最終的に，

$$\sigma_{xy}(\omega) = -e^2 \frac{\omega_c}{\omega} \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \chi^2(\mathbf{k}, i\varepsilon_n, i\varepsilon_{n-}) \frac{\hbar k_x}{m} \times [\mathcal{G}_+ \partial_x \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_- \partial_x \mathcal{G}_+]_{i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta} \quad (45)$$

を得る<sup>18</sup>．ここで，サイクロトロン振動数を

$$\omega_c = \frac{eH}{mc} \quad (46)$$

と定義している．

## 4 具体的な計算 — ほとんど自由な電子

長い計算を経たが，前節でようやくホール伝導度の一般式を得た．早速その式を用いて具体的な計算を行ってみよう．復習も兼ねて，縦伝導度  $\sigma_{xx}$  も並行して計算する（その2）で求めたように，

$$\Phi_{xx}(i\omega_\lambda) = 2e^2 \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\hbar k_x}{m} \right)^2 \times \chi(\mathbf{k}, i\varepsilon_n, i\varepsilon_{n-}) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) \quad (47)$$

<sup>18</sup>途中， $\partial_y J_y, \partial_x J_x$  の部分から，

$k_x k_y \chi [\partial_y \chi (\mathcal{G}_+ \partial_x \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_- \partial_x \mathcal{G}_+) - \partial_y \chi (\mathcal{G}_+ \partial_x \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_- \partial_x \mathcal{G}_+)]$  の形が現れるが， $x$  と  $y$  が対称な場合，この寄与は消える．

であった．ここでもスピンの和を考慮して係数2をつけ，さらにパーテックス補正に伴う  $\chi(\mathbf{p}, i\varepsilon, i\omega_\lambda)$  も加えてある．このグリーン関数部分に対し， $i\varepsilon_n$  についての解析接続を行い，次いで  $i\omega_\lambda$  の解析接続を行うことで， $\omega$  の1次項を取り出す．(45) も(47) も振動数依存性については同じ構造を持っており，それを  $F(i\varepsilon, i\varepsilon - i\omega_\lambda)$  と表す（その2）(64)より，

$$\frac{1}{\beta} \sum_n F(i\varepsilon_n, i\varepsilon_n - i\omega) = - \oint_C \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) F(z, z - i\omega_\lambda) \quad (48)$$

である． $\chi(\mathbf{p}, i\varepsilon, i\varepsilon_{n-})$  においても解析性が変わるのグリーン関数と同じく， $\text{Im} z = 0$  と  $\text{Im} z = i\omega_\lambda$  であるので，積分径路  $C$  は（その2）図3と同じ  $C_1 + C_2 + C_3 + C_4$  に分けられる．寄与の小さい  $C_1 + C_4$  を無視すれば，(48) はさらに

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx n_F(x) \left[ F(x + i\delta, x - i\omega_\lambda) - F(x + i\omega_\lambda, x - i\delta) \right] \quad (49)$$

となる．最後に  $i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta$  の解析接続を行なって，

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx n_F(x) \left[ F(x + i\delta, x - \hbar\omega - i\delta) - F(x + \hbar\omega + i\delta, x - i\delta) \right] \quad (50)$$

を得る．第1項に対して  $x \rightarrow x + \hbar\omega$  の変数変換を行い， $n_F(x + \hbar\omega)$  についてテイラー展開を行えば，

$$\frac{1}{\beta} \sum_n F(i\varepsilon_n, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) = \frac{\hbar\omega}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) F(x + i\delta, x - i\delta) \quad (51)$$

以上のことから，絶対零度の  $\sigma_{xx}$  ,  $\sigma_{xy}$  に対しては，次式を得る．

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \hbar}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\hbar k_x}{m} \right)^2 \chi(\mathbf{k}) G^R(\mathbf{k}, 0) G^A(\mathbf{k}, 0) \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & -e^2 \frac{\hbar \omega_c}{2\pi i} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\hbar k_x}{m} \right) \chi^2(\mathbf{k}) \\ & \times [G^R(\mathbf{k}, 0) \partial_x G^A(\mathbf{k}, 0) - G^A(\mathbf{k}, 0) \partial_x G^R(\mathbf{k}, 0)] \end{aligned} \quad (53)$$

ここからさらに (その2) でも導入したグリーン関数の一般形

$$G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{a^{-1}\varepsilon - b^{-1}\xi_{\mathbf{k}} + i\Sigma''} \quad (54)$$

を用いると，

$$\begin{aligned} & G^R(\mathbf{k}, 0) \partial_x G^A(\mathbf{k}, 0) - G^A(\mathbf{k}, 0) \partial_x G^R(\mathbf{k}, 0) \\ & = \frac{\pi i}{\Sigma''^2} \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \delta(\xi_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (55)$$

であるから<sup>19</sup>，

$$\sigma_{xy} = -e^2 \frac{\hbar^2 \omega_c}{2m \Sigma''^2} \int_0^\infty \frac{dk}{6\pi^2} \frac{k^4}{k_F} \chi^2(\mathbf{k}) \delta(k - k_F) \quad (56)$$

を得る (キャリア密度に  $n = k_F^3/3\pi^2$  , エネルギーの波数微分に  $d\xi_{\mathbf{k}}/dk = \hbar^2 k/m$  を用いた.) ここで改めて，パーテックス補正  $\chi(k_F)$  を含んだ輸送緩和時間を

$$\tau_{\text{tr}} = \frac{\hbar \chi(k_F)}{2\Sigma''} \quad (57)$$

と定義すれば，最終的に

$$\sigma_{xy} = -\frac{ne^2}{m} \omega_c \tau_{\text{tr}}^2 \quad (58)$$

<sup>19</sup>ここでデルタ関数の2乗のような形が現れるが，それについては次の関係を用いている．

$$\frac{a^3}{(x^2 + a^2)^2} \rightarrow \frac{\pi}{2} \delta(x)$$

これは留数定理を用いて容易に証明できる次の関係に基づいている．

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{a^3}{(x^2 + a^2)^2} = \frac{\pi}{2}$$

を得る．縦伝導度については (その2) で求めたように，状態密度のくりこみ  $\tilde{\rho}_0 = b\rho_0$  を用いて，

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2 \tau_{\text{tr}} \tilde{\rho}_0}{m \rho_0} \quad (59)$$

である．ここで気がつくことは， $\sigma_{xx}$  は状態密度のくりこみが影響するのに対し， $\sigma_{xy}$  ではそれが現れないことである．これは磁場と結合するパーテックス  $J_\alpha$  が他のパーテックス  $J_\mu, J_\nu$  と異なり，一般化されたワード恒等式にしたがって，グリーン関数の微分に関係付けられたことに起因する．

以上の計算に基づいてホール係数を計算すると，

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 H} = -\frac{1}{nec} \left( \frac{\rho_0}{\tilde{\rho}_0} \right)^2 \quad (60)$$

となる．電子比熱などに影響をあたえる質量のくりこみ  $a$  はホール係数には影響しないことがわかる．また上の結果は，もし電子-格子相互作用のように自己エネルギーに波数依存性をもたらさない場合， $b$  が現れないことから，ドルーデ理論や半古典的なボルツマン方程式による結果と一致する．

## 5 プロッホ電子のホール伝導度

ここまでは簡単のため，結晶の周期ポテンシャルの影響は大きくないとし，ほとんど自由な電子についてのホール効果を見てきた．しかし物質によってはそうした近似は十分ではなく，周期ポテンシャルがホール効果に重要な影響を及ぼす場合も多いにあり得る．ここでは，結晶の周期性を取り入れた上でホール効果を議論する．

### 5.1 磁場中のプロッホ電子<sup>12)</sup>

言うまでもなく，磁場中の固体電子の運動を知ること，物性物理において最重要課題の一つである．半古典的には，ローレンツ力を考慮した議論で比較的容易に理解することができる．しかし，ひとたび量子的に議論しようとした場合，直ちに大きな問題に直面する．空間的に周期を持つ結晶ポテンシャルと，空間的に一様な磁場の効果を両

立することが数学的に困難だからである。つまり、プロッホ電子と磁場の相性が非常に悪いのである。

磁場中では一般に、 $\hbar\mathbf{k} \rightarrow -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}/c$ の置き換えを行ってから計算を進めれば良い。プロッホ関数は

$$\psi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (61)$$

で与えられる。(  $\ell$  はバンドの指標を表している ) 周期関数部分  $u_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{k})$  は完全系を成しており、それゆえ全ての周期関数がプロッホ関数によって表現される。ここで先ほどの置換を行おうとすると、周期関数部分  $u_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  におけるベクトルポテンシャルの依存性が不明であるため、たちまち計算が行き詰まってしまう。

この深刻な問題に対して、ラッティンジャーとコーンは画期的な方法を考案した<sup>13)</sup>。彼らは次の“modified”プロッホ関数を導入した。

$$\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\ell 0}(\mathbf{r}) \quad (62)$$

プロッホ関数との違いは、 $u_{\ell 0}$  であり、これはプロッホ関数に含まれる  $u_{\ell\mathbf{k}}$  の中の  $\mathbf{k}$  をある波数  $\mathbf{k}_0$  に固定したものである。これはいわゆる  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  理論に対応している。周期関数部分の波数を固定したことで一般性を失い、近似が導入されたように勘違いしやすいが、それは誤りである。 $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  も完全系をなしており、全ての周期関数は  $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を用いて厳密に展開することができる。また、 $\psi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  と  $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  とは

$$u_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell'} b_{\ell\ell'}(\mathbf{k})u_{\ell 0}(\mathbf{r}) \quad (63)$$

を通して厳密に変換される。

この関数  $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を用いて波動関数は次のように展開される：

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell\mathbf{k}} \chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})a_{\ell\mathbf{k}} \quad (64)$$

このように  $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を基底に取る表示をラッティンジャー・コーン表示 (LK 表示) と呼ぶ<sup>20)</sup> ( $a_{\ell\mathbf{k}}$  は、

<sup>20)</sup>形式的には、いわゆる  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  理論と同じであるが、 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  理論は有効質量近似のみを意味して用いられることが多い。一方、ラッティンジャーとコーンが証明したように、 $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を用いれば、不純物ポテンシャル、磁場、スピン軌道結合などがあつた場合にも厳密な理論を展開できる<sup>13)</sup>。一般的にもラッティンジャー・コーン表示という語が用いられるが<sup>14)</sup>、ここではこうした点を強調して、 $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  に基づいた表示をラッティンジャー・コーン表示と呼んでいる。

$\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  に対応する消滅演算子である。)

$\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  は元のプロッホ関数とほとんど形が同じであるが、ベクトルポテンシャルが位相部分にしかなれないことから、厳密性を保ったまま計算が著しく単純化される。その代わりに、ハミルトニアンはバンド指標  $\ell$  に対して非対角成分を持つ行列で表され、常に行列の演算を必要とする。

LK 表示に基づくハミルトニアンの行列要素は次の直交関係

$$\int_{\text{crystal}} d\mathbf{r} \chi_{\ell\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\chi_{\ell'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\ell\ell'}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \quad (65)$$

を考慮して<sup>13)</sup>、

$$\begin{aligned} \langle \ell\mathbf{k} | \mathcal{H} | \ell'\mathbf{k}' \rangle \\ = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \left[ \left( \epsilon_{\ell 0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{\ell\ell'} + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{\ell\ell'}}{m} \right] \end{aligned} \quad (66)$$

で与えられる。ここで  $\epsilon_{\ell 0}$  は  $\mathbf{k}_0$  におけるエネルギー極値である。運動量の行列要素は

$$\mathbf{p}_{\ell\ell'} \equiv \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\ell 0}(\mathbf{r})(-i\hbar\nabla)u_{\ell' 0}(\mathbf{r}) \quad (67)$$

とし、 $\int_{\text{cell}}$  は単位胞内での積分、 $\Omega$  は単位胞の体積を表す。したがって、固有値方程式として次式を得る。

$$\begin{aligned} \sum_{\ell'} \left[ \left( \epsilon_{\ell 0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{\ell\ell'} + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}_{\ell\ell'}}{m} \right] c_{\ell'}(\mathbf{k}) \\ = \epsilon c_{\ell}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (68)$$

今、 $\mathbf{k}_0$  はエネルギー極値を取る波数と仮定しているので、運動量の行列要素は  $\mathbf{p}_{nn}/m = 0$  を満たす。

## 5.2 ラッティンジャー・コーン表示に基づくホール伝導度

LK 表示の下では，電流演算子は次のように与えられる<sup>21</sup>．

$$j_q = -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell, \ell'} (\hbar \mathbf{k} \delta_{\ell \ell'} + \mathbf{p}_{\ell \ell'}) a_{\ell' \mathbf{k}^-}^\dagger a_{\ell \mathbf{k}^+} \quad (69)$$

ここでの  $\mathbf{k}^+$  および  $\mathbf{k}^-$  は，どちらもブリルアンゾーン内のものに限る．一粒子温度グリーン関数は

$$\mathcal{G}_{\ell \ell'}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = -\int_0^\beta d\tau e^{i\varepsilon_n \tau} \langle T_\tau \{ a_{\ell \mathbf{k}}(\tau) a_{\ell' \mathbf{k}}^\dagger \} \rangle \quad (70)$$

で定義され，その形を一般に

$$\mathcal{G}_{\ell \ell'}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = [i\varepsilon_n - \mathcal{H}(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)]_{\ell \ell'}^{-1} \quad (71)$$

と表すことにする．ここで  $\mathcal{H}(\mathbf{k})$  は LK 表示で表したハミルトニアンで，一般に非対角成分（バンド間行列要素）をもつ．これに伴い， $\Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  および  $\mathcal{G}_{\ell \ell'}$  も行列で表されている． $N$  本のプロックバンドを基底にとる場合，それらは  $N \times N$  行列となる（スピンも含めば， $2N \times 2N$ ）．

## 5.3 ファインマン図形を援用した計算

グリーン関数が行列で与えられることを除き，基本的な計算は §3 と全く同じである．ただしここで

<sup>21</sup>ここで現れる電流演算子についても，(9) から導いておく．

$$\begin{aligned} j_q &= -\frac{e\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\ell, \ell'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \\ &\quad \times (\mathbf{k} + \mathbf{k}') u_{\ell'0}^* u_{\ell 0} a_{\ell'0}^\dagger a_{\ell 0} \\ &\quad + \frac{ie\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\ell, \ell'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \\ &\quad \times [u_{\ell'0}^*(\mathbf{r}) \nabla u_{\ell 0}(\mathbf{r}) - \nabla u_{\ell'0}^*(\mathbf{r}) u_{\ell 0}(\mathbf{r})] a_{\ell' \mathbf{k}'}^\dagger a_{\ell \mathbf{k}} \\ &= -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell, \ell'} \left[ \hbar \left( \mathbf{k} - \frac{1}{2} \mathbf{q} \right) \delta_{\ell \ell'} + \mathbf{p}_{\ell \ell'} \right] a_{\ell' \mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\ell \mathbf{k}} \\ &= -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell, \ell'} (\hbar \tilde{\mathbf{k}} \delta_{\ell \ell'} + \mathbf{p}_{\ell \ell'}) a_{\ell' \tilde{\mathbf{k}}}^\dagger a_{\ell \tilde{\mathbf{k}}} \end{aligned}$$

ここで次の部分積分を用いた．

$$-\int d\mathbf{r} \nabla u_{\ell'0}^*(\mathbf{r}) u_{\ell 0}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} u_{\ell'0}^*(\mathbf{r}) \nabla u_{\ell 0}(\mathbf{r})$$

$$K_{\mu\nu}^{\alpha(2)} = \text{(i)} - \text{(ii)}$$

図 9:  $q$  展開を施した後の  $K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  への寄与．

は，具体的な物質への適用を想定し，等方性を仮定せず，異方的な場合をも含むより一般的な公式を導く．また，簡単のため，電流演算子に対するパーテックス補正が結果に影響を及ぼさない場合のみを議論することにする（具体的には，たとえば (19) で  $V(q)$  に  $q$  依存性がない場合など）．

以下で §3 と同様の計算を進めるが，そこでの計算は様々な寄与が現れて，結果を集約するのが多少骨折りでもあった．そういう場合，ファインマン図形を用いて全体像を直感的に把握することは結果の整理の上で大変有用である．ここでは，以前の代数計算を繰り返す代わりに，ファインマン図形を援用して計算を進めることにする．

$K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  および  $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  に対するファインマン図形は，図 3 で示した通りである．これらに対する寄与を  $q$  について展開する．図形的には， $\mathcal{G}$  線あるいはパーテックスの  $\circ$  に  $\times$  印をつける操作に対応する．また，全ての図形を統一的に扱うため， $\partial_\alpha \mathcal{G}_+$  が現れた場合，(27) を用いて微分記号をなくすように整理する．図形的には，図 4 の左から右に書き換える操作に対応する．そうすれば，全ての寄与が  $\mathcal{G} j \mathcal{G} j \mathcal{G}$  あるいは  $\mathcal{G} j \mathcal{G} j \mathcal{G} j$  の形に統一される．

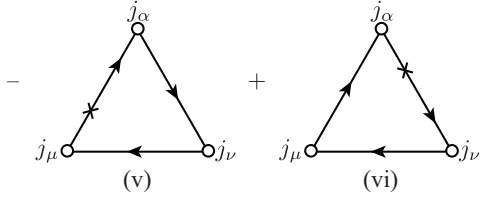
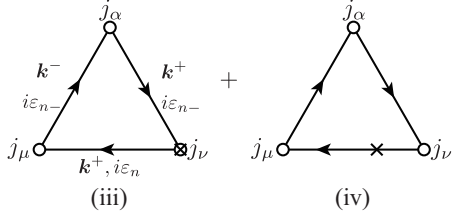
$K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  の寄与については，いずれか一方の  $\mathcal{G}$  線に  $\times$  印をつける．ただしこの時， $\mathcal{G}(\mathbf{k}^-)$  については負符号をつけることに注意すること．対応する式は

$$\frac{e\hbar}{mc} \frac{q_\mu}{2} \delta_{\nu\alpha} \text{Tr} [\mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- \quad (i)$$

$$- \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_-] \quad (ii)$$

である（図 9）．ここで  $\eta \neq \mu$  の場合， $\partial_\eta \mathcal{G}_\mu$  は  $\eta$  についても  $\mu$  についても奇関数であるため，最終的な積分を行った際に消えることを想定し， $\eta = \mu$  のみを残した．

$$K_{\mu\nu}^{\alpha(3a)} =$$



$$K_{\mu\nu}^{\alpha(3b)} =$$

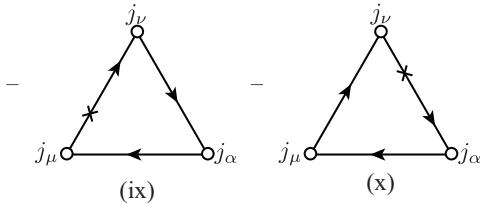
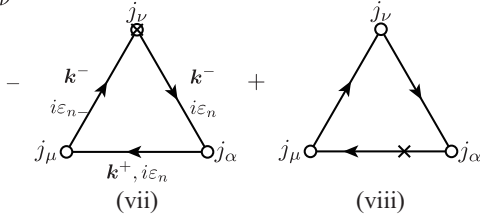


図 10:  $q$  展開を施した後の  $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  への寄与 .

次に  $K_{\mu\nu}^{\alpha(3a,3b)}$  の寄与を考える .  $j_\nu$  に対する微分 , および 3 本の  $\mathcal{G}$  線に対する微分の 4 つの項がそれぞれに現れる . (69) より  $\partial_\eta j_\nu = -\delta_{\eta\nu} e\hbar/m$  となることを考慮して , 対応する式は次で与えられ

る ( 図 10 ) .

$$(3a) \Rightarrow \frac{e\hbar}{mc} \frac{q_\nu}{2} \delta_{\mu\alpha} \text{Tr} [\mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_-] \quad (\text{iii})$$

$$+ \frac{\hbar}{ec} \frac{q_\eta}{2} \text{Tr} [\mathcal{G}_+ j_\eta \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\alpha \mathcal{G}_- j_\nu] \quad (\text{iv})$$

$$- \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\eta \mathcal{G}_- j_\alpha \mathcal{G}_- j_\nu \quad (\text{v})$$

$$+ \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\alpha \mathcal{G}_- j_\eta \mathcal{G}_- j_\nu] \quad (\text{vi})$$

$$(3b) \Rightarrow \frac{e\hbar}{mc} \frac{q_\nu}{2} \delta_{\mu\alpha} \text{Tr} [-\mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- \mathcal{G}_+ j_\mu] \quad (\text{vii})$$

$$+ \frac{\hbar}{ec} \frac{q_\eta}{2} \text{Tr} [\mathcal{G}_+ j_\eta \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\alpha] \quad (\text{viii})$$

$$- \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\eta \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\alpha \quad (\text{ix})$$

$$- \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\eta \mathcal{G}_+ j_\alpha] \quad (\text{x})$$

(i), (ii), (iii), (vii) の寄与は一つにまとめることができ

$$\frac{e\hbar}{mc} (q_\mu \delta_{\nu\alpha} - q_\nu \delta_{\mu\alpha}) \times \text{Tr} [\mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_-] \quad (72)$$

となる . (iv) と (ix) を合わせると , §3.3 と同じようにゲージ不変な形に整理することができ ,

$$\frac{\hbar}{2ec} (q_\mu \delta_{\nu\alpha} - q_\nu \delta_{\mu\alpha}) \text{Tr} [\mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu - \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu] \quad (73)$$

となる . 同様に , (v) と (vi) の寄与は

$$\frac{\hbar}{2ec} (q_\mu \delta_{\nu\alpha} - q_\nu \delta_{\mu\alpha}) \text{Tr} [\mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu - \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu] \quad (74)$$

(viii) と (x) の寄与は

$$\frac{\hbar}{2ec} (q_\mu \delta_{\nu\alpha} - q_\nu \delta_{\mu\alpha}) \text{Tr} [\mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu] \quad (75)$$

と , 全てをゲージ不変な形にすることができる . 以上をまとめて , ついに周期ポテンシャル中ホール伝導度の一般式を得ることができた :

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{H}{\omega} \frac{2}{\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \left[ \sigma_{\mu\nu}^{(1)} + \sigma_{\mu\nu}^{(2)} \right]_{i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta} \quad (76)$$

$$\sigma_{\mu\nu}^{(1)} = \frac{e\hbar}{mc} \text{Tr} \left[ \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- \right] \quad (77)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}^{(2)} = \frac{\hbar}{2ec} \text{Tr} & \left[ \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \right. \\ & - \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & + \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & + \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & \left. - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \right] \quad (78) \end{aligned}$$

項数は多いが、 $\mathcal{G}_-$ を含む個数によって整理されていることがわかる。上の結果もスピンの和を考慮して係数2をつけてある。

#### 5.4 プロットホ関数を用いるには

これまでに導いた表式はすべてLK表示に基づくものである。しかし最終表式において、通常のプロットホ表示に戻すことができる。プロットホ関数とLKの $\chi_{\ell k}(\mathbf{r})$ はユニタリー変換(63)に基づいて互いに交換することができる。電流演算子やグリーン関数についても同様で、

$$\bar{\mathcal{G}}_{\ell\ell'} = b_{\ell\ell_1} \mathcal{G}_{\ell_1\ell_2} b_{\ell_2\ell'} \quad (79)$$

$$\bar{\mathbf{j}}_{\ell\ell'} = b_{\ell\ell_1} \mathbf{j}_{\ell_1\ell_2} b_{\ell_2\ell'} \quad (80)$$

と変換すれば、 $\bar{\mathcal{G}}$ と $\bar{\mathbf{j}}$ はプロットホ関数に基づく通常のプロットホ表示におけるグリーン関数と電流演算子となる。(77)と(78)はすべての $\mathcal{G}$ と $j$ が対角和 $\text{Tr}[\dots]$ の中に入っている(Trは表示によらない: trace invariance), 結局(77), (78)において,

$$\mathcal{G} \rightarrow \bar{\mathcal{G}} \quad (81)$$

$$\mathbf{j} \rightarrow \bar{\mathbf{j}} \quad (82)$$

とすることで求めるプロットホ表示の結果を得ることができる。

では最初からプロットホ表示を用いればよいのではないかと疑問を持たれるかもしれない。しかし前に述べたように、プロットホ関数に磁場の効果をいきなり取り込むには大変な困難が伴う。LK表示で簡明かつ厳密に磁場の効果を取り入れ、ゲージ不変な表式を導き、磁場に対する線形項をくり出すことができれば、(77), (78)のように、 $\text{Tr}[\dots]$ の中はゼロ磁場の $\mathcal{G}$ と $j$ のみに還元されるので、そこで初めてプロットホ関数へのユニタリー変換が許される。少し遠回りに見えるかもしれないが、こうすることで初めて磁場中のプロットホ電子をゲージ不変な形で正確に扱うことができる。

## 6 具体的な計算 — 単バンド近似

前節まででホール伝導度の一般式を導いた。ここでは、ある1本のプロットホバンドのみがフェルミエネルギーにかかり、他のバンドはエネルギー的に離れた場合、つまり、単バンド近似が妥当な場合を考える。多バンド系に対してこの近似を適用すると、「バンド間磁場効果<sup>22</sup>」を無視した近似と捉えることができる。単バンド近似では、 $\mathcal{G}$ や $j$ はスカラーとして扱うことができるので、 $\sigma_{\mu\nu}^{(2)}$ の寄与が全て互いに打ち消しあうことは容易にわかる。また、電流は

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \quad (83)$$

で与えられるので、

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu} &= \frac{H}{\omega c} \left( \frac{e}{\hbar} \right)^3 \\ &\times \frac{1}{\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \left[ (\partial_\mu \xi_{\mathbf{k}})^2 \partial_\nu^2 \xi_{\mathbf{k}} - \partial_\mu \xi_{\mathbf{k}} \partial_\nu \xi_{\mathbf{k}} \partial_{\mu\nu} \xi_{\mathbf{k}} \right] \\ &\times \left[ \mathcal{G}^2(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_{n-}) - \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}^2(\mathbf{k}, i\varepsilon_{n-}) \right] \quad (84) \end{aligned}$$

を得る<sup>23</sup>。

<sup>22</sup>バンド間磁場効果は、反磁性理論においてその重要性が初めて認識された。輸送現象においても、後に示すワイル電子やディラック電子系などでは、バンド間磁場効果は無視できない役割を果たす。

<sup>23</sup>ここでプロットホバンドに対する電流の表式 $\mathbf{j} = -(e/\hbar)(\partial \xi_{\mathbf{k}}/\partial \mathbf{k})$ を用いるために、少し別の形でホール伝導度の公式を導く。(iii), (iv)を導く際、 $\partial_\eta j_\nu \rightarrow -\delta_{\eta\nu} e\hbar/m$ と



松原振動数については，ここでもやはり (48) の形が現れる． $C_2 + C_3$  の寄与は，

$$\frac{\hbar\omega}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) \times \left[ \{G^R(x)\}^2 G^A(x) - G^R(x) \{G^A(x)\}^2 \right] \quad (85)$$

である．§3 では寄与が小さいとして無視した  $C_1 + C_4$  を改めて考えると，(48) は，

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx n_F(x) \left[ F(x + \hbar\omega + i\delta, x + i\delta) - F(x - i\delta, x - \hbar\omega - i\delta) \right] \quad (86)$$

と解析接続されるので，(84) の  $F(i\varepsilon_n, i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)$  部分は，

$$\{G^R(x + \hbar\omega)\}^2 G^R(x) - \{G^A(x)\}^2 G^A(x - \hbar\omega) - G^R(x + \hbar\omega) \{G^R(x)\}^2 + G^A(x) \{G^A(x - \hbar\omega)\}^2 \quad (87)$$

へと解析接続される． $G^{R,A}(x \pm \hbar\omega) = G^{R,A}(x) \pm \hbar\omega \partial_x G^{R,A}(x)$  より，上の  $\omega^1$  次項は  $\{G^{R,A}\}^2 \partial_x G^{R,A} = (1/3) \partial_x \{G^{R,A}\}^3$  を用いることで，

$$\hbar\omega \left[ \{G^R(x)\}^2 \partial_x G^R(x) - \{G^A(x)\}^2 \partial_x G^A(x) \right] = \frac{\hbar\omega}{3} \partial_x \left[ \{G^R(x)\}^3 - \{G^A(x)\}^3 \right] \quad (88)$$

したが，これをこのまま  $\partial_{\eta j\nu}$  の形で残しておく．すなわち，

$$-\frac{1}{c} \frac{q\eta}{2} \text{Tr} [\mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-j\alpha} \mathcal{G}_{-\partial_{\eta j\nu}} - \mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-\partial_{\eta j\nu}} \mathcal{G}_{+j\alpha}] \quad (\text{iii}') \quad (89)$$

一方の (i), (ii) に対しては逆に  $-\delta_{\eta\nu} e\hbar/m \rightarrow \partial_{\eta j\nu}$  として，

$$\frac{e}{ch} \frac{q\eta}{2} \text{Tr} [\partial_{\eta} \mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-\partial_{\alpha j\nu}}] \quad (\text{i}')$$

$$-\mathcal{G}_{+j\mu} \partial_{\eta} \mathcal{G}_{-\partial_{\alpha j\nu}}] \quad (\text{ii}')$$

となる．これらの寄与は一つにまとめることができ，

$$-\frac{1}{2c} (q_\mu \delta_{\nu\alpha} - q_\nu \delta_{\mu\alpha}) \times \text{Tr} [\mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-\partial_{\nu j\nu}} - \mathcal{G}_{+j\nu} \mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-\partial_{\mu j\nu}} - (\mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-j\mu} \mathcal{G}_{-\partial_{\nu j\nu}} - \mathcal{G}_{+j\mu} \mathcal{G}_{-j\nu} \mathcal{G}_{-\partial_{\nu j\mu}})]$$

となる．

となる．さらに部分積分することで， $C_1 + C_4$  の寄与として，

$$-\frac{\hbar\omega}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) \times \frac{1}{3} \left[ \{G^R(x)\}^3 - \{G^A(x)\}^3 \right] \quad (89)$$

が得られる．最終的に  $C_1 \sim C_4$  全ての寄与を合わせて，

$$\frac{1}{\beta} \sum_n [\mathcal{G}^2(i\varepsilon_n) \mathcal{G}(i\varepsilon_{n-}) - \mathcal{G}(i\varepsilon_n) \mathcal{G}^2(i\varepsilon_{n-})] = \frac{\hbar\omega}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) \times \text{Im} \left[ \{G^R(x)\}^2 G^A(x) - \frac{1}{3} \{G^R(x)\}^3 \right] \quad (90)$$

このように，単バンド近似に基づいた結果，全ての表式は  $dn_F/dx$  に比例する形，すなわちフェルミ面項として記述された．ただしこの結果はパーテックス補正を考慮していないからであって，パーテックス補正を考慮した場合は当てはまらない．

ここでもグリーン関数の一般形 (54) を採用すると， $\text{Im}[\dots]$  部分は，

$$-\frac{4}{3} \frac{\Sigma'^3}{\{(a^{-1}x - b^{-1}\xi_k)^2 + \Sigma'^2\}^3} \rightarrow -\frac{\pi}{2\Sigma'^2} \delta(a^{-1}x - b^{-1}\xi_k) \quad (91)$$

とできることから，最終的な表式として次式を得る．

$$\sigma_{xy} = -\frac{2e^2}{\hbar^4} m\omega_c \tau_k^2 \sum_{\mathbf{k}} \left( -\frac{dn_F(\xi_{\mathbf{k}})}{d\xi_{\mathbf{k}}} \right) \times \left( \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right) \left[ \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right] \quad (92)$$

これは通常のボルツマン方程式から導かれる結果と一致する<sup>3)</sup>．(92) の結果の具体的な応用例として，例えば二元合金系への適用がある<sup>9)</sup>．そこでは，不純物帯でのホール係数は不純物帯の占有度によらず一定であることなど，興味深い結果が得られる．

## 7 質量のないディラック電子(ワイル電子)のホール効果

本稿の最後に、実戦的な課題の一つとして、質量のないディラック電子(ワイル電子)のホール効果を考えてみよう<sup>15)</sup>。ワイル電子は相対論的量子力学におけるディラック方程式(4×4行列)において、その質量をゼロとし、2つの2×2行列に分離した方程式に従う電子を指す。しかし近年、グラフェン<sup>16)</sup>や有機導体<sup>17)</sup>( $\alpha$ -ET<sub>2</sub>I<sub>3</sub>)など、2次元のワイル電子として記述できる固体中の電子について、その物性が大いに研究されてきている。さらに最近では、固体電子の“トポロジカル”な特性に注目が集まっており、その中でも3次元ワイル電子は中心的課題の一つである。

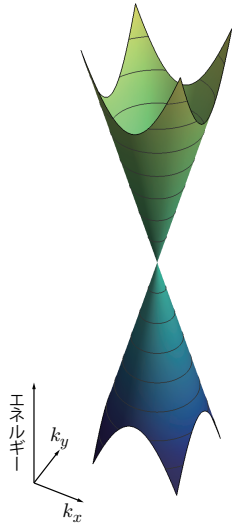


図 11: 2次元ワイル電子のエネルギー分散。

ここで考える2次元ワイル電子の有効ハミルトニアンは次で与えられる:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma(k_x - ik_y) \\ \gamma(k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix} = \gamma(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) \quad (93)$$

$\gamma$ は電子の速度に相当し、 $\sigma_{x,y,z}$ はパウリ行列である。このハミルトニアンは、例えばグラフェンの強束縛近似において、 $K$ 点近傍に対して $k \cdot p$ 理論

を適用することで得られる<sup>18)</sup>(したがって、このままでLK表示になっている。)すぐに確かめられるように、エネルギー固有値は、 $\xi_k = \pm\gamma|k|$ である(図11)。エネルギーの原点は、ちょうど二つのバンドの接点(交点)にとっている。

このハミルトニアンに対するホール伝導度を求める。電流演算子は、 $j = -(e/\hbar)\partial\mathcal{H}/\partial\mathbf{k}$ より、

$$j_{x,y} = -\frac{e\gamma}{\hbar}\sigma_{x,y} \quad (94)$$

与えられる。このように、ワイル電子はエネルギー分散が波数に対して線形であるため、その電流演算子は波数に依存しないことが大きな特徴である<sup>24)</sup>。

グリーン関数は(71)より、

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = [i\varepsilon_n - \mathcal{H}(\mathbf{k})]^{-1} = \frac{i\varepsilon_n + \gamma(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y)}{(i\varepsilon_n)^2 - \gamma^2 k^2} \quad (95)$$

となる<sup>25)</sup>。ここで自己エネルギーはエネルギーに依存しないものとし、

$$i\tilde{\varepsilon}_n = i\varepsilon_n + i\Gamma \text{sgn}(\varepsilon_n) \quad (96)$$

とした<sup>26)</sup>。

計算は公式を起点に、行列計算をこなせば良い。ほとんど自由な電子、および単バンド近似の際ホー

<sup>24)</sup>この特徴は、より一般に(有限ギャップが開いている)ディラック電子系全体に共通するものである。

<sup>25)</sup>このグリーン関数はハミルトニアンと同じく2×2行列であり、 $[\dots]^{-1}$ は正確には逆行列として求めなければならない。しかし今の場合、次のようにして簡単に“有理化”することができる(行列であることを明示するのに $\hat{\cdot}$ を用いた)グリーン関数の定義を

$$[i\tilde{\varepsilon}_n - \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})]\hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\tilde{\varepsilon}_n) = 1$$

と置き直し、両辺に左から $[i\tilde{\varepsilon}_n + \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})]$ をかけると、

$$[i\tilde{\varepsilon}_n + \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})][i\tilde{\varepsilon}_n - \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})] = (i\tilde{\varepsilon}_n)^2 - \{\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})\}^2 = (i\tilde{\varepsilon}_n)^2 - \gamma^2 k^2$$

のように左辺をスカラー化することができる。この最後の結果は厳密に言えば2×2行列ではあるが、対角成分のみ値を持つので、スカラーとして扱うことができる。このことより、

$$\hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\tilde{\varepsilon}_n) = \frac{i\tilde{\varepsilon}_n + \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})}{(i\tilde{\varepsilon}_n)^2 - \gamma^2 k^2}$$

とできる。

<sup>26)</sup>エネルギー依存性のある場合についての計算として、例えば文献19)がある。

ル伝導を担うのは  $\sigma_{xy}^{(1)}$  であったが，脚注 23 より，(77) は  $\partial_\alpha j_\nu$  を含んでおり，これは今の場合ゼロとなる．一方，単バンド近似では全て打ち消しあった  $\sigma_{xy}^{(2)}$  が，ワイル電子の場合は  $\mathcal{G}$  と  $j$  が行列であるため打ち消しが起こらず，有限のホール伝導を生じる．

行列計算は少し大変ではあるが，肅々とこなせば良い．その結果は，

$$\sigma_{xy} = \frac{H}{\omega} \frac{4e^3 \gamma^4}{c \hbar^3} \times \frac{1}{\beta} \sum_{n, \mathbf{k}} [\mathcal{F}_2(i\varepsilon_n) \mathcal{F}_1(i\varepsilon_{n-}) - \mathcal{F}_1(i\varepsilon_n) \mathcal{F}_2(i\varepsilon_{n-})] \quad (97)$$

$$\mathcal{F}_\ell(i\varepsilon_n) = \frac{i\tilde{\varepsilon}_n}{\{(i\tilde{\varepsilon}_n)^2 - \gamma^2 k^2\}^\ell} \quad (98)$$

とまとめることができる<sup>27</sup>．(97) の被積分関数 ([...] 内) は (84) と同じ形をしている． $C_2 + C_3$  の寄与は

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar\omega}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F}{dx} \right) \\ & \times [\mathcal{F}_2(x+i\Gamma) \mathcal{F}_1(x-i\Gamma) - \mathcal{F}_1(x+i\Gamma) \mathcal{F}_2(x-i\Gamma)] \\ & = \frac{\hbar\omega}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F}{dx} \right) \\ & \times \left[ \frac{x+i\Gamma}{[(x+i\Gamma)^2 - \gamma^2 k^2]^2} \frac{x-i\Gamma}{(x-i\Gamma)^2 - \gamma^2 k^2} - \text{c.c.} \right] \quad (99) \end{aligned}$$

となる．一方  $C_1 + C_4$  の寄与は

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx n_F(x) \\ & \times [\mathcal{F}_2(x+\hbar\omega+i\Gamma) \mathcal{F}_1(x+i\Gamma) \\ & - \mathcal{F}_2(x-i\Gamma) \mathcal{F}_1(x-\hbar\omega-i\Gamma) \\ & - \mathcal{F}_1(x+\hbar\omega+i\Gamma) \mathcal{F}_2(x+i\Gamma) \\ & + \mathcal{F}_1(x-i\Gamma) \mathcal{F}_2(x-\hbar\omega-i\Gamma)] \\ & = \frac{\hbar\omega}{\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx n_F(x) \\ & \times \left[ \frac{(x+i\Gamma)^3}{[(x+i\Gamma)^2 - \gamma^2 k^2]^4} - \text{c.c.} \right] \quad (100) \end{aligned}$$

であるので，これらを合わせて

$$\sigma_{xy} = -\frac{4e^3 \gamma^4 H}{\pi i c \hbar^2} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[ \frac{n'_F}{2} S^{(2,3)}(\varepsilon) - n_F S^{(1,4)}(\varepsilon) \right] \quad (101)$$

$$S^{(2,3)}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon+i\Gamma}{[(\varepsilon+i\Gamma)^2 - \gamma^2 k^2]^2} \frac{\varepsilon-i\Gamma}{(\varepsilon-i\Gamma)^2 - \gamma^2 k^2} - \text{c.c.} \quad (102)$$

$$S^{(1,4)}(\varepsilon) = \frac{(\varepsilon+i\Gamma)^3}{[(\varepsilon+i\Gamma)^2 - \gamma^2 k^2]^4} - \text{c.c.} \quad (103)$$

<sup>27</sup>ここで次の関係を用いている．

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_2(i\varepsilon_{n-}) \mathcal{F}_1(i\varepsilon_n) - \mathcal{F}_1(i\varepsilon_{n-}) \mathcal{F}_2(i\varepsilon_n) \\ & = \frac{i\varepsilon_n i\omega_\lambda (i\varepsilon_n - i\omega_\lambda) (2i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)}{\{(i\varepsilon_n)^2 - \gamma^2 k^2\}^2 \{(i\varepsilon_n - i\omega_\lambda)^2 - \gamma^2 k^2\}^2} \end{aligned}$$

が導かれる． $\varepsilon, k$  に対する積分を実行して<sup>28</sup>，

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy0} \left[ K_{xy}^{(2,3)}(X) + K_{xy}^{(1,4)}(X) \right] \quad (104)$$

$$K_{xy}^{(2,3)}(X) = \frac{1}{X} \left[ \frac{1-X^2}{1+X^2} - \frac{1+X^2}{2|X|} \Phi(X) \right] \quad (105)$$

$$K_{xy}^{(1,4)}(X) = -\frac{8}{3} \frac{X}{(1+X^2)^2} \quad (106)$$

を得る．ここで

$$X \equiv \frac{\mu}{\Gamma} \quad (107)$$

$$\Phi(X) \equiv \frac{\pi}{2} - \text{atan} \frac{1-X^2}{2|X|} \quad (108)$$

$$\sigma_{xy0} \equiv \frac{e^3 \gamma^2 H}{4\pi^2 c \hbar^2 \Gamma^2} \quad (109)$$

とした． $\sigma_{xy}$  の  $\mu$  依存性を図 12(b) に示した．十分良い金属  $|\mu|/\Gamma \gg 1$  のとき， $\sigma_{xy}$  は一定値  $\sigma_{xy}/\sigma_{xy0} = \pi/2$  に近づく．このとき， $K_{xy}^{(2,3)}$  が主に寄与している．多くの場合そうであるように， $|\mu|/\Gamma \gg 1$  のとき， $K_{xy}^{(1,4)}$  はほぼゼロであるが， $|\mu|/\Gamma \lesssim 1$  になると， $K_{xy}^{(2,3)}$  と同程度の値をとる．

<sup>28</sup> $S^{(2,3)}(\varepsilon)$  の項に対しては，低温で  $-\partial n_{\text{F}}/\partial \varepsilon = \delta(\varepsilon - \mu)$  とできることから，

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} \frac{4i\mu\Gamma(\mu^2 + \Gamma^2)}{\{(\mu^2 - \gamma^2 k^2 - \Gamma^2)^2 + 4\mu^2 \Gamma^2\}^2} \\ &= \frac{i}{2\pi\gamma^2 \Gamma^2} \int_0^\infty d\xi \frac{X(1+X^2)}{\{\xi - (X+i)^2\}^2 \{\xi - (X-i)^2\}^2} \\ &= \frac{1}{16\pi\gamma^2 \Gamma^2} \frac{1}{X} \left[ -\frac{1-X^2}{1+X^2} \right. \\ & \left. + \frac{1+X^2}{2|X|} \left( \frac{\pi}{2} - \text{atan} \frac{1-X^2}{2|X|} \right) \right] \end{aligned}$$

途中， $\xi = \gamma^2 k^2 / \Gamma^2$  とした．また，積分公式

$$\begin{aligned} \int \frac{dx}{x^2 + bx + c} &= \frac{b+2x}{(4c-b^2)(x^2 + bx + c)} \\ &+ \frac{4}{(4c-b^2)^{3/2}} \text{atan} \frac{b+2x}{\sqrt{4c-b^2}} \end{aligned}$$

を用いた． $S^{(1,4)}(\varepsilon)$  の項に対しては，先に  $k$  積分を消させる．

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{4\pi\gamma^2} \int_{-\infty}^X d\tilde{\varepsilon} \int_0^\infty d\xi \left[ \frac{(\tilde{\varepsilon} + i)^3}{\{(\tilde{\varepsilon} + i)^2 - \xi\}^4} - \text{c.c.} \right] \\ &= -\frac{i}{6\pi\gamma^2 \Gamma^2} \int_{-\infty}^X d\tilde{\varepsilon} \frac{3\tilde{\varepsilon}^2 - 1}{(\tilde{\varepsilon}^2 + 1)^3} \\ &= \frac{i}{6\pi\gamma^2 \Gamma^2} \frac{X}{(1+X^2)^2} \end{aligned}$$

途中， $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/\Gamma$  とした．

全体の  $\sigma_{xy}$  における角のような構造は  $K_{xy}^{(1,4)}$  に起因する．なお，この  $K_{xy}^{(1,4)}$  は 2次元ワイル電子のデルタ関数的な反磁性電流（散逸を生じない）と密接に関係している<sup>15), 20)</sup>．

$\sigma_{xx}$  についても同様の計算を進めることで，

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx0} K_{xx}(X) \quad (110)$$

$$K_{xx}(X) = 1 + \frac{1+X^2}{2|X|} \Phi(X) \quad (111)$$

$$\sigma_{xx0} = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \quad (112)$$

が得られる．その  $\mu$  依存性は図 12(a) のようになる． $\mu = 0$  のとき（理想的なグラフェンの場合），

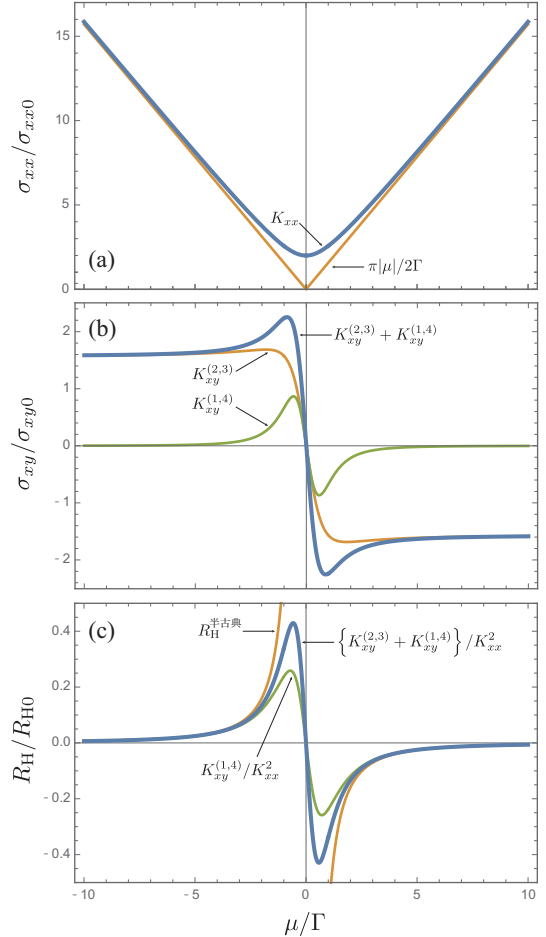


図 12: 2次元ワイル電子の (a) 電気伝導度，(b) ホール伝導度，(c) ホール係数．

伝導度は  $\sigma_{xx} = e^2/\pi^2 \hbar$  で与えられる． $\mu/\Gamma \gg 1$

の場合は,  $\sigma_{xx} = (e^2/4\pi\hbar)|\mu|/\Gamma$  となる.

以上の結果より, ホール係数は

$$R_H(X) = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 H} = R_0 \frac{K_{xy}^{(2,3)}(X) + K_{xy}^{(1,4)}(X)}{[K_{xx}(X)]^2} \quad (113)$$

$$R_0 \equiv \frac{1}{ec} \left( \frac{\pi\gamma}{\Gamma} \right)^2 \quad (114)$$

で与えられる (図 12(c)). ここで注目したいのは,  $\mu \rightarrow 0$  で  $R_H \rightarrow 0$  となっている点である. これは一見, 従来の知識と相容れない. というのも,  $\mu \rightarrow 0$  でキャリア数はゼロになるので, よく知られたホール係数の関係式  $R_H = -1/nec$  に従えば,  $R_H$  は  $\mu \rightarrow 0$  で発散すると予想されるからである. 具体的には, 2次元電子系のキャリア数  $n = \mu^2/2\pi\gamma^2$  を用いて<sup>29</sup>,

$$R_H^{\text{半古典}} = -\frac{1}{nec} = -\frac{1}{ec} \frac{2\pi\gamma^2}{\mu^2} \text{sgn}(\mu) \quad (115)$$

となり,  $R_H^{\text{半古典}} \propto 1/\mu^2$  が得られる. こうした久保公式による結果と半古典近似に基づく結果の違いの原因はどこにあるのだろうか. これには半古典近似に含まれている仮定を思い出すと良い. 半古典近似では, 良い金属  $\mu/\Gamma \gg 1$  ( $\mu\tau \gg 1$ ) であることが前提となっている. 今のようなワイル電子の  $\mu \lesssim \Gamma$  では, “良い”金属としては扱えず, 半古典近似の適用可能範囲を超えてしまい, (115) のような正しくない結果を与えることとなる. 一方の久保公式では, そのような適用限界はなく, 金属から絶縁体まで等しく扱うことができる. このように, ワイル電子系のような少数キャリアの特殊な場合には, ボルツマン方程式に基づく半古典

<sup>29</sup> 1 スピン, 単位体積あたりの状態密度は

$$N(\varepsilon) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \delta(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}})$$

で与えられる.  $d$  は系の次元を表す. 2次元ワイル電子の場合,

$$\xi_{\mathbf{k}} = \pm\gamma|k|$$

であるので,

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi\gamma^2} \int d\xi_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}) \xi_{\mathbf{k}} = \frac{|\varepsilon|}{2\pi\gamma^2}$$

キャリア数は, スピンの自由度を考慮して,

$$n(\mu) = 2 \int d\varepsilon N(\varepsilon) = \frac{\mu^2}{2\pi\gamma^2}$$

近似と久保公式に基づく量子的な計算の間に顕著な差が現れる. このことは, 有限のギャップを持つディラック電子系でも同じである<sup>20), 21)</sup>.

## (その4) のまとめ

**ベクトルポテンシャルとゲージ不変性** ベクトルポテンシャルの取り扱いに際し, いくつかの注意すべき点がある. 一様な磁場  $H$  を考える場合, ベクトルポテンシャルの定義より, ベクトルポテンシャルは座標の1次に比例し, 無限遠で発散する. この問題については,

$$A(\mathbf{r}) = A_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (116)$$

のようにベクトルポテンシャルを平面波の形で表せば, 無限遠における非物理的な寄与を回避できる. この  $A_q$  を用いて計算を進め, 最後に  $q \rightarrow 0$  の極限を取れば ( $q$  の1次を取る), 一様磁場に対する結果を得る.

$q$  の1次を取るにあたり,

$$q_x A_{qy} - q_y A_{qx} \quad (117)$$

の形でくり出すことができれば, ベクトルポテンシャルの定義より  $q_x A_{qy} - q_y A_{qx} \rightarrow -iH$  とすることができる. この手順により, 具体的なゲージを仮定することなく, 磁場の1次項を正しく得ることができる. すなわち, ゲージ不変な結果が得られる.

**ホール伝導度計算の要点** ホール伝導度の計算も, 基本的にはこれまでと同じ流れで計算することができる. 久保公式から出発し, ベクトルポテンシャルの1次までを摂動展開する. さらに1粒子グリーン関数  $\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  を用いて表せば, 2つの  $\mathcal{G}$  からなる  $K_{\mu\nu}^{\alpha(2)}$  と, 3つからなる  $K_{\mu\nu}^{\alpha(3)}$  を得る.  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon$  の解析接続を行ったのち,  $i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta$  の解析接続を施し,  $\omega$  について1次の項を取り出せば良い.

これまでと異なるのは, 途中で  $q$  展開を行う点である.  $q$  依存性はグリーン関数にもバーテックスにも現れるので, 両者にたいして  $q$  展開, すな

わち  $k$  微分を行う必要がある．その際，一般化されたワード恒等式から得られる関係式

$$J_\alpha(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \mathcal{G}^2(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = -\frac{e}{\hbar} \partial_\alpha \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \quad (118)$$

を用いるとうまく整理することができる．ここで  $J_\alpha$  は磁場と結合するバーテックスで， $\alpha$  はベクトルポテンシャルの成分を表す．この関係式を図形的に考えれば，グリーン関数に対して  $k$  微分を行うことは，そのグリーン関数を分断し，そこに新たなバーテックスを加えることに対応していることがわかる．

バーテックス補正を

$$\mathbf{J}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n, i\varepsilon_{n-}) = -\frac{e\hbar}{m} \mathbf{k} \chi(\mathbf{k}, i\varepsilon_n, i\varepsilon_{n-}) \quad (119)$$

で表し，遅延グリーン関数の一般形として

$$G^R(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{a^{-1}\varepsilon - b^{-1}\xi_{\mathbf{k}} + i\Sigma''} \quad (120)$$

を考えると，ほとんど自由な電子に対するホール伝導度として，

$$\sigma_{xy} = -\frac{ne^2}{m} \omega_c \tau_{\text{tr}}^2 \quad (121)$$

が導かれる．ここで輸送緩和時間

$$\tau_{\text{tr}} = \frac{\hbar \chi(k_F)}{2\Sigma''} \quad (122)$$

はバーテックス補正も考慮して定義されている．得られた結果は，電子比熱などに影響を与える質量のくりこみ  $a$  や状態密度のくりこみ  $b$  に全く影響を受けず，半古典論による結果と一致する．

**磁場中のプロッホ電子** プロッホ関数に基づいて磁場中の計算を行うには，大変な困難が伴う．この理論的困難を回避するために導入されたのが，次の “modified” プロッホ関数である．

$$\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\ell 0}(\mathbf{r}) \quad (123)$$

この関数も完全系をなし，すべての周期関数を厳密に展開することができる．また，プロッホ関数と  $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  はユニタリー変換によって厳密に関係付けられる．

この  $\chi_{\ell\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  を基底に取る表示をラッティンジャー・コーン表示 (LK 表示) とよぶ．LK 表示に

基づけば，磁場中の計算を厳密に行うことができる．本稿で扱うような弱磁場極限の物理量に対しては，LK 表示に基づいて計算を行い，磁場  $H$  の 1 次項を取り出す．その  $H$  の係数にあたる部分はもはや磁場に依存しないので，改めてユニタリー変換を用いて LK 表示からプロッホ関数を基底に取る表示に変換することができる．

LK 表示における電流演算子は，運動量の行列要素

$$\mathbf{p}_{\ell'\ell} \equiv \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} u_{\ell'0}(\mathbf{r}) (-i\hbar\nabla) u_{\ell 0}(\mathbf{r}) \quad (124)$$

を用いて，次の形で与えられる．

$$\mathbf{j}_q = -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\ell, \ell'} (\hbar \mathbf{k} \delta_{\ell\ell'} + \mathbf{p}_{\ell\ell'}) a_{\ell'\mathbf{k}}^\dagger - a_{\ell\mathbf{k}+} \quad (125)$$

( $\ell$  はバンドの指標を表している．)

**プロッホ電子のホール伝導度** プロッホ電子のホール伝導度は，多バンドの効果も含む LK 表示の下で一般に，

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{H}{\omega} \frac{2}{\beta} \sum_{n, \mathbf{k}} \left[ \sigma_{\mu\nu}^{(1)} + \sigma_{\mu\nu}^{(2)} \right]_{i\omega_\lambda \rightarrow \hbar\omega + i\delta} \quad (126)$$

$$\sigma_{\mu\nu}^{(1)} = \frac{e\hbar}{mc} \text{Tr} \left[ \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_- - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- \right] \quad (127)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu}^{(2)} = \frac{\hbar}{2ec} \text{Tr} & \left[ \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \right. \\ & - \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & + \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & + \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \\ & \left. - \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_+ j_\nu \mathcal{G}_+ j_\mu \mathcal{G}_- j_\nu \right] \quad (128) \end{aligned}$$

で与えられる．上の結果では，スピンの自由度を考慮した係数 2 を含んでいる．

上の公式を単バンドのみに適用した場合， $\mathcal{G}$  も  $j_\mu$  もスカラーとなることから， $\sigma_{\mu\nu}^{(2)}$  は互いに打ち消しあってその寄与がなくなる．解析接続を手順通り行えば，単バンド近似 (バンド間効果を無視)

におけるホール伝導度の公式として，

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{H e^3}{\pi c \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( -\frac{dn_F(x)}{dx} \right) \\ &\times \left( \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right) \left[ \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right] \\ &\times \text{Im} \left[ \{G^R(x)\}^2 G^A(x) - \frac{1}{3} \{G^R(x)\}^3 \right] \end{aligned} \quad (129)$$

を導くことができる．グリーン関数の具体的な形として先と同じく (120) を採用すれば，上の結果はさらに

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\frac{2e^3 H \tau_k^2}{c \hbar^4} \sum_{\mathbf{k}} \left( -\frac{dn_F(\xi_{\mathbf{k}})}{d\xi_{\mathbf{k}}} \right) \\ &\times \left[ \left( \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right] \end{aligned} \quad (130)$$

と表すことができる．これはボルツマン方程式から導かれる結果と一致する．なお，ここではパーテックス補正を考慮に入れていないので全てを  $dn_F(\varepsilon)/d\varepsilon$  に比例する形で表せたが，考慮に入れた場合は一般に， $n_F(\varepsilon)$  に比例する項も現れる．

**ワイル電子のホール伝導度** 有効ハミルトニアンが

$$\mathcal{H} = \gamma (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) \quad (131)$$

で与えられる 2次元における質量のないディラック電子（ワイル電子）の電気伝導度およびホール伝導度は， $X = \mu/\Gamma$  の関数として，それぞれ次のようになる．

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx0} K_{xx}(X) \quad (132)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy0} \left[ K_{xy}^{(2,3)}(X) + K_{xy}^{(1,4)}(X) \right] \quad (133)$$

$$K_{xx}(X) = 1 + \frac{1+X^2}{2|X|} \Phi(X) \quad (134)$$

$$K_{xy}^{(2,3)}(X) = \frac{1}{X} \left[ \frac{1-X^2}{1+X^2} - \frac{1+X^2}{2|X|} \Phi(X) \right] \quad (135)$$

$$K_{xy}^{(1,4)}(X) = -\frac{8}{3} \frac{X}{(1+X^2)^2} \quad (136)$$

$$\Phi(X) \equiv \frac{\pi}{2} - \text{atan} \frac{1-X^2}{2|X|} \quad (137)$$

$$\sigma_{xx0} = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \quad (138)$$

$$\sigma_{xy0} \equiv \frac{e^3 \gamma^2 H}{4\pi^2 c \hbar^2 \Gamma^2} \quad (139)$$

ここで， $K_{xy}^{(2,3)}$ ， $K_{xy}^{(1,4)}$  はそれぞれ解析接続の際に考えた積分経路  $C_2 + C_3$ ， $C_1 + C_4$  に対応している． $C_1 + C_4$  の寄与は通常の金属であればほとんどゼロで無視することができるが，2次元ワイル電子の  $|\mu|/\Gamma \lesssim 1$  の場合， $C_2 + C_3$  からの寄与と同程度の値を持ち，その結果全体の  $\sigma_{xy}$  に顕著なピーク構造が現れる．この  $K_{xy}^{(1,4)}$  は半古典論では決して現れない寄与であり，純粋に量子的な現象である反磁性と密接な関係を持っている．

久保公式に基づいた正確な計算で得られた  $\sigma_{xx}$ ， $\sigma_{xy}$  を用いてホール係数  $R_H = \sigma_{xy}/\sigma_{xx}^2 H$  を計算すると， $\mu \rightarrow 0$  のとき， $R_H \rightarrow 0$  となることが分かる．これはよく知られたホール係数の関係式  $R_H^{\text{半古典}} = -1/nec$  ( $\mu \rightarrow 0$  で  $R_H^{\text{半古典}} \rightarrow -\infty$ ) から得られる結論と全く異なる．これは，半古典論が  $|\mu| \lesssim \Gamma$  では破綻していることを物語っている．このように，ディラック電子系やワイル電子系ではホール伝導度およびホール係数の取り扱いに細心の注意を要する．

おことわり

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3）」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] E. H. Hall: Am. J. Appl. Math. **2** (1879) 287.
- [2] J. E. A. Alderson, T. Farrell, and C. M. Hurd: Phys. Rev. **174** (1968) 729.
- [3] H. Fukuyama, H. Ebisawa, and Y. Wada: Prog. Theor. Phys. **42** (1969) 494.



- [4] H. Fukuyama: Prog. Theor. Phys. **42** (1969) 1284.
- [5] R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **19** (1964) 2127.
- [6] B. Springer: Phys. Rev. **136** (1964) A115.
- [7] W. A. B. Evans: Proceedings of the Physical Society **88** (1966) 723.
- [8] 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.
- [9] H. Fukuyama: Prog. Theor. Phys. **44** (1970) 879.
- [10] L. I. シッフ: 新版 量子力学 (吉岡書店, 2008).
- [11] J. Schrieffer: *Theory of Superconductivity* (Advanced Book Program Series. Avalon Publishing, 1983), Advanced Book Program Series.
- [12] 磁場中のプロッホ電子については, 例えば H. Fukuyama: Doctoral Thesis, University of Tokyo, 1970. などが参考になる .
- [13] J. M. Luttinger and W. Kohn: Phys. Rev. **97** (1955) 869.
- [14] Y. Yafet: Solid State Phys. **14** (1963) 1 .
- [15] H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 043711.
- [16] T. Ando: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 777.
- [17] K. Kajita, Y. Nishio, N. Tajima, Y. Suzumura, and A. Kobayashi: J. Phys. Soc. Jpn. **83** (2014) 072002.
- [18] J. W. McClure: Phys. Rev. **104** (1956) 666. グラファイトに関するこの論文では, 炭素面一枚に垂直に磁場が存在する状況下でのエネルギー準位も与えられており, これが半世紀後に出現したグラフェンで実験的に観測され
- た<sup>?</sup>. このように, 固体中のディラック電子についての認識は古くからあった. 異方的ディラック電子: ビスマス (P. A. Wolff, 1964<sup>?</sup>), 質量のないディラック電子: グラファイト (本文献).
- [19] N. H. Shon and T. Ando: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 2421.
- [20] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 066601.
- [21] Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **84** (2015) 012001.