

# 多体電子論

愛媛大学大学院理工学研究科

楠瀬博明

## 授業の目的

物質の多彩な性質は、その中を運動する膨大な数の電子の振る舞いによって決まる。特に、電子間の強い斥力が本質的な役割を果たすとき、磁性や超伝導などマクロ系特有の新たな状態が発現する。多体電子系の諸現象を、古き良き手法であるグリーン関数法に基づいて理解する方法を学ぶ。

## 講義内容

強相関電子系の諸現象や理論模型の紹介から始め、量子多体論の共通言語であるグリーン関数法について述べる。グリーン関数を用いた多体摂動論の一般論を展開した後、それを用いた電荷秩序、磁気秩序、超伝導などの相転移現象を取り扱う。さらに、量子臨界点やその近傍で生じる超伝導などを議論する。電子相関が強い状況で生じる金属絶縁体転移や有効質量の増大した電子系を動的平均場理論に基づき取り扱う。以上の理論的取り扱いを俯瞰して利点と欠点を整理した上で、理論手法の最近の発展を紹介する。

## 授業計画

1. 基礎事項
- 2.-4. 線形応答、摂動論
- 5.-7. 磁性、超伝導
8. 電子相関効果

$\hbar \equiv 1$     $k_B \equiv 1$   
cgs gauss単位系

# 参考文献

## 多体問題

- ・統計物理学における場の量子論の方法 (アブリコソフ・ゴリコフ・ジャロシンスキー、東京図書)
- ・Quantum Many-particle Systems (J.W. Negele, H. Orland, Perseus)
- ・物性論における場の量子論、電子相関における場の量子論 (永長直人、岩波書店)
- ・多体問題、多体問題特論 (高田康民、朝倉書店)
- ・量子多体物理学 (倉本義夫、朝倉書店)
- ・多体問題 (高野文彦、培風館)
- ・物性II (中嶋貞雄、豊沢豊、阿部龍蔵、岩波書店)
- ・Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons (D. Senechal, A.-M. Tremblay, C. Bourbonnais, Springer)

## 磁性

- ・上田和夫「磁性入門」 裳華房 (2011)
- ・芳田奎「磁性」 岩波書店 (1991)
- ・金森順次郎「磁性」 培風館 (1969)

## 超伝導

- ・中嶋貞雄「超伝導入門」 培風館 (1971)
- ・恒藤敏彦「超伝導・超流動」 岩波書店 (2001)

# 多体電子論とは

凝縮系物理学の基本概念 P.W. Anderson (Basic Notions, 1984) cf. "More is different" (Science, 1972)

- ・自発的対称性の破れ： 相転移、秩序変数、新しい物性
- ・連続くりこみの原理： 揺らぎ、Fermi液体、近藤効果、くりこみ群、普遍性
- ・トポロジー： 整数値、マクロ量子化、強固 (量子ホール効果、トポロジカル絶縁体)

cf. X.G. Wen (Quantum Field Theory of Many-body Systems, 2003)

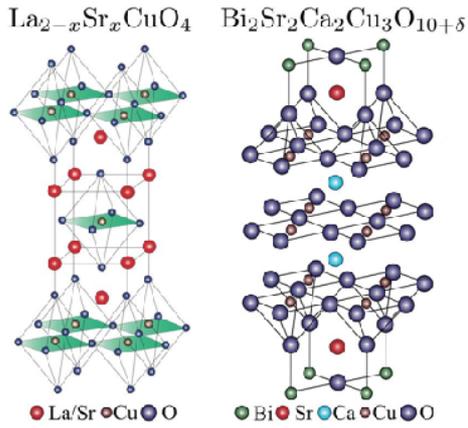
- ・手近な物質群で、多くの現象が実際に観測されている
- ・磁性と超伝導の研究境界領域で、新しい発見が相次いでいる
- ・軌道自由度への拡張、位相秩序の展開における基礎となっている
- ・上記、すべての取り扱いにおいて、グリーン関数や摂動展開は有用な基本的道具

# 基礎事項

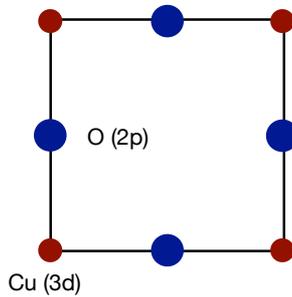
凝縮電子系とは

銅酸化物高温超伝導体

<http://wyvern.phys.s.u-tokyo.ac.jp/f/Research/hts.htm>

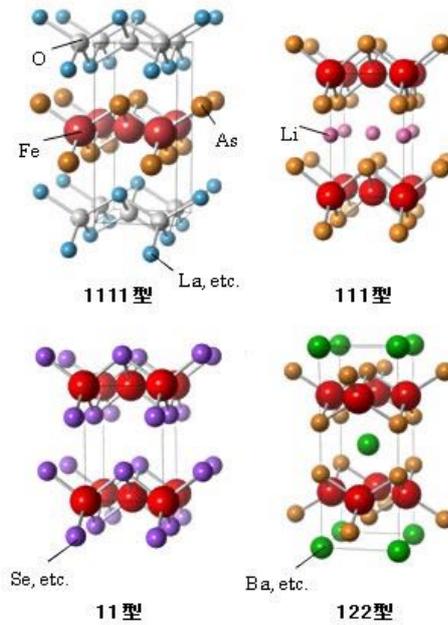


CuO<sub>2</sub>面 超伝導現象に本質的と考えられている

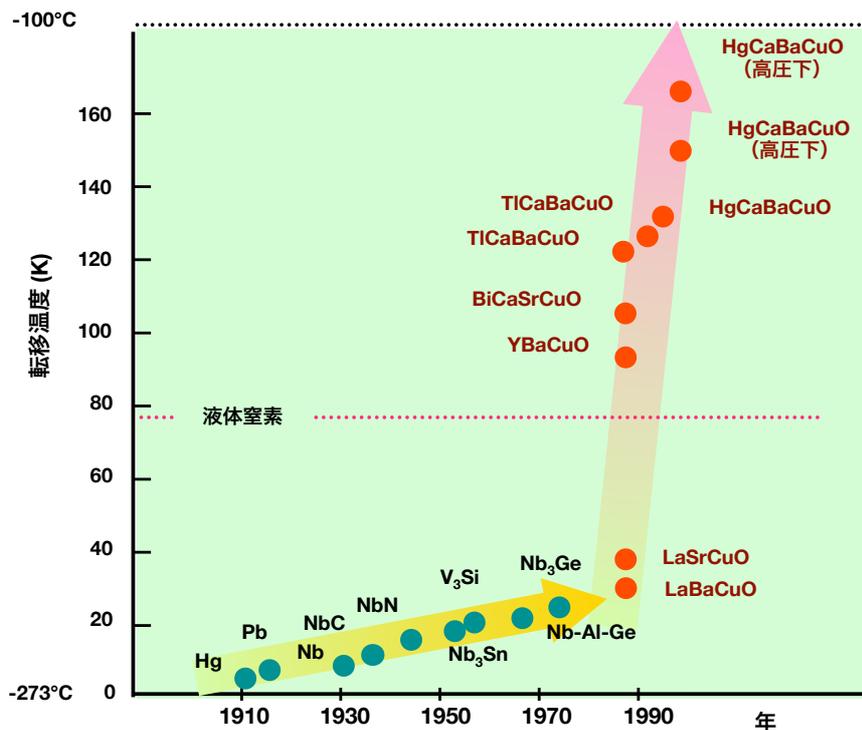


鉄系「高温」超伝導体

<http://www.jst.go.jp/extra/2008/090217.html>



超伝導転移温度の推移



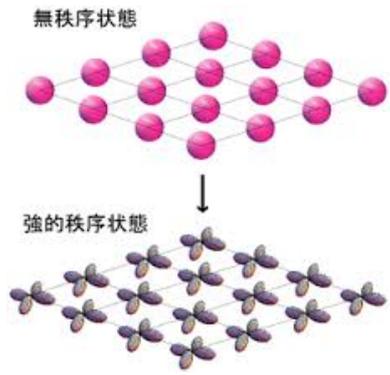
1911 Hg : 4.2 K  
Univ. Leiden :  
Prof. H. Kamerlingh-Onnes

1986 La-Ba-Cu-O系 : 30 K  
IBM Zurich :  
J.G. Bednorz, K.A. Mueller

2001 MgB<sub>2</sub> : 39 K  
青山学院大 : 秋光純教授

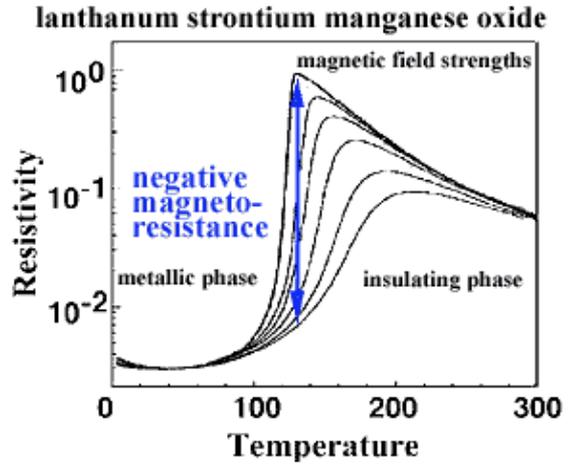
2008 FeAs系 : 20 ~ 50 K  
東工大 : 細野秀雄教授

軌道秩序



<http://legacy.kek.jp/ja/news/press/2005/Ferrottype4d.html>

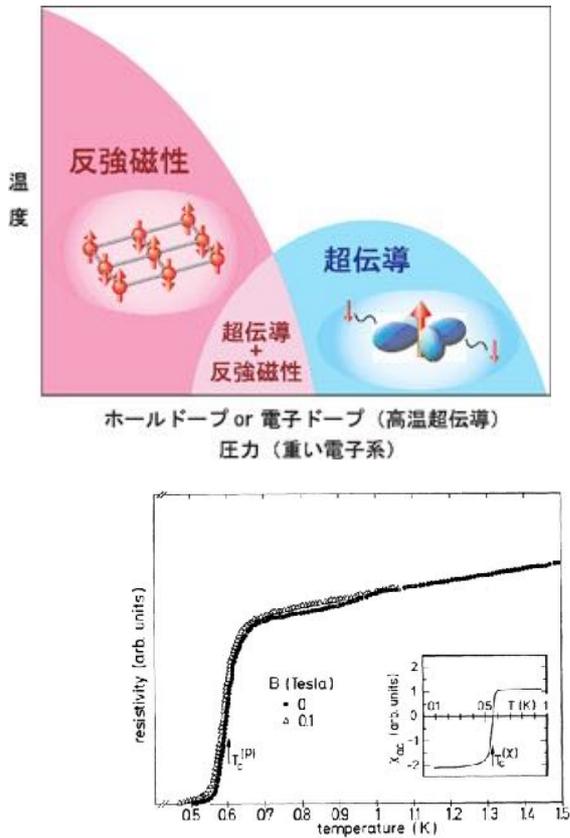
巨大磁気抵抗 (磁気ヘッド：大容量ハードディスク)



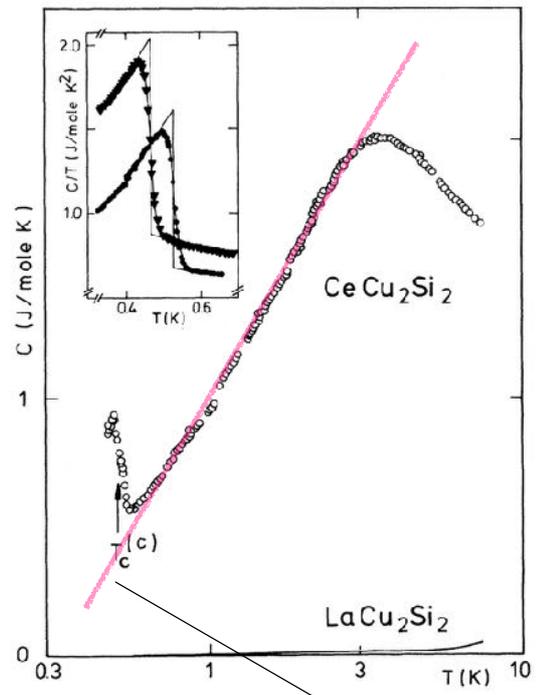
<http://www2.lbl.gov/Science-Articles/Archive/colossal-magnetoresistance.html>

重い電子超伝導

[http://www.spigse.chem.es.osaka-u.ac.jp/spigse/modules/labos/index.php/mirai/Kitaoka\\_j.html](http://www.spigse.chem.es.osaka-u.ac.jp/spigse/modules/labos/index.php/mirai/Kitaoka_j.html)



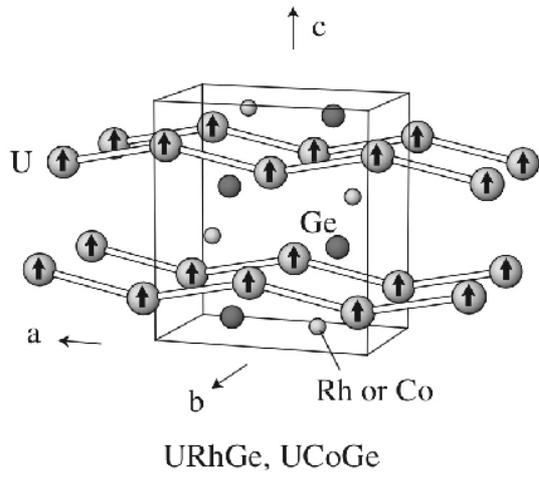
F. Steglich et al. PRL **43** (1979) 1892.



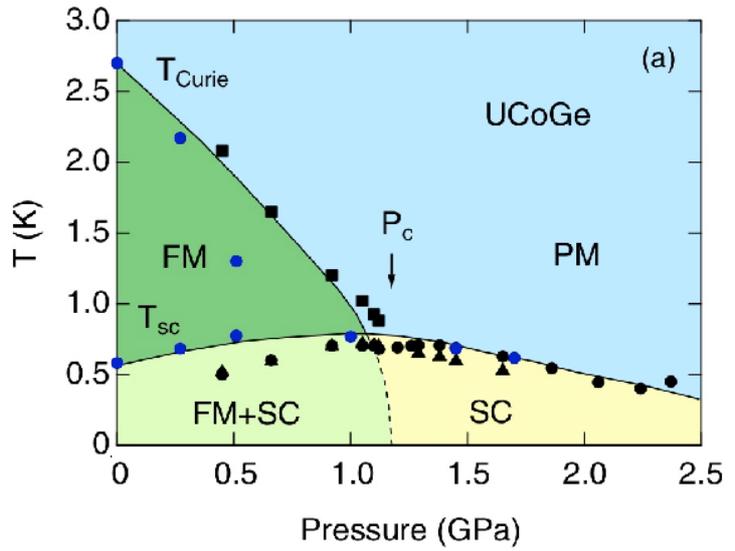
- ・有効質量  $m^* \sim 1000 \times m_0$
- ・超伝導 (反強磁性の近傍)

$$C/T \propto D(\epsilon_F) \propto m^*$$

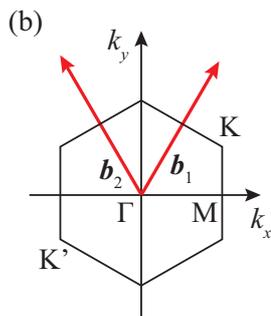
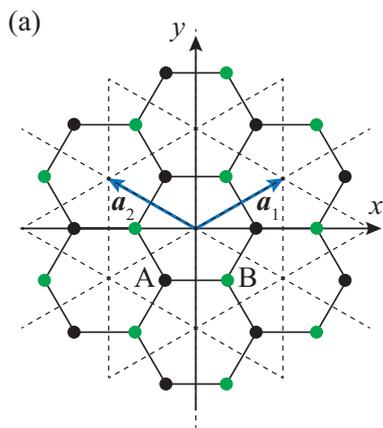
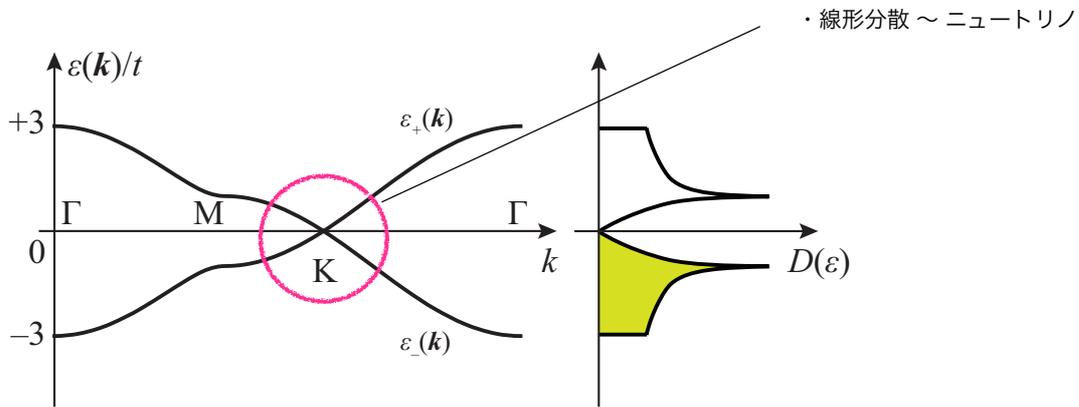
強磁性超伝導



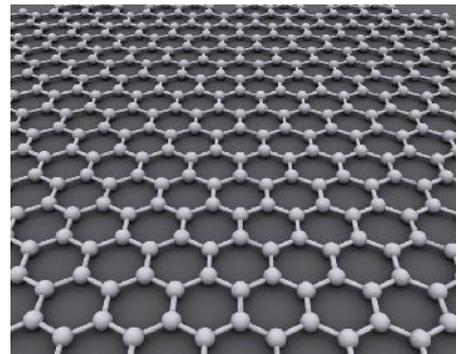
D. Aoki, J. Flouquet JPSJ **81** (2012) 011003.



グラフェン

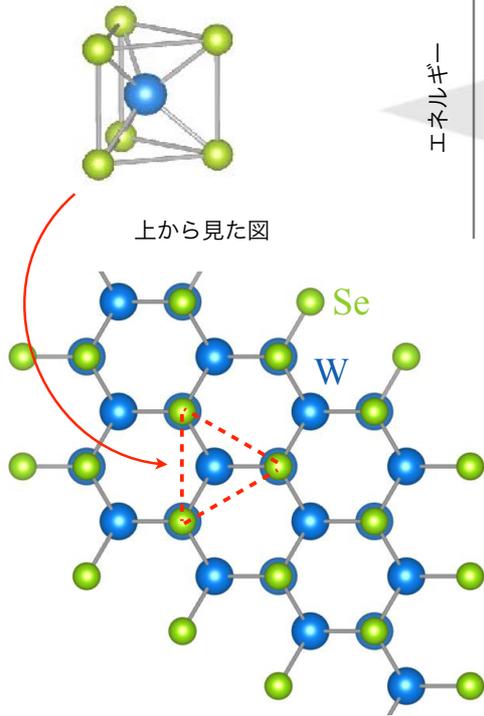


<http://ja.wikipedia.org/wiki/グラフェン>



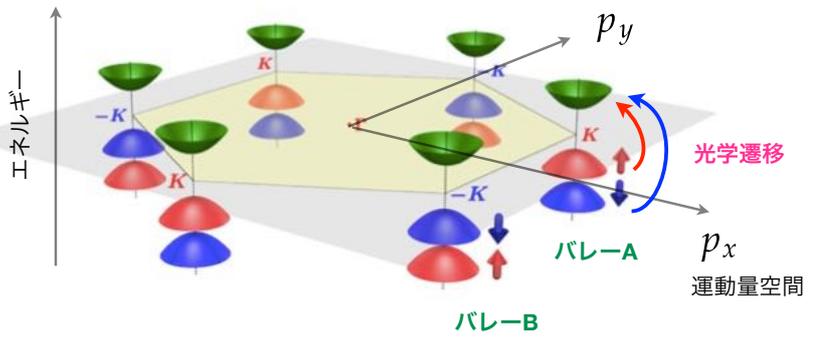
# 単層カルコゲナイド (WSe<sub>2</sub>)

- ・反転対称性なし
- ・スピン軌道相互作用

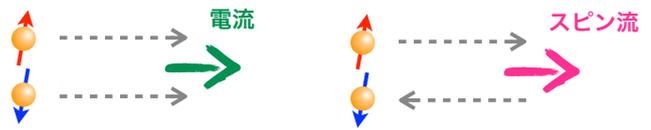


d電子のバンド構造

D. Xiao et al., PRL **108** (2012) 196802.



- ・スピンの向きに依存した光学応答
- ・光を使ったキャリアドーブとスピン流生成
- ・バレー自由度の制御



# 第二量子化

## N個の自由なFermi粒子系

$$H_N = \sum_{j=1}^N \left[ -\frac{\nabla_j^2}{2m} + v(\mathbf{r}_j) \right] \equiv \sum_{j=1}^N h(\mathbf{r}_j), \quad h(\mathbf{r}) = -\frac{\nabla^2}{2m} + v(\mathbf{r}).$$

一粒子状態の固有エネルギーと固有状態  $h(\mathbf{r})\phi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r})$

( $k$ : 固有状態を区別する量子数の組 = 「軌道」)

Diracの表示

$$h|k\rangle = \epsilon_k |k\rangle$$

$$\int d\mathbf{r} \phi_k(\mathbf{r})^* \phi_l(\mathbf{r}) = \delta_{k,l}, \quad \text{規格直交性}$$

$$\sum_k \phi_k(\mathbf{r}) \phi_k(\mathbf{r}')^* = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \text{完全性}$$

$$\langle k|l\rangle = \delta_{k,l} \quad \sum_k |k\rangle \langle k| = 1$$

$H_N$ の固有状態

反交換性の要請: Slater行列

$$\Phi_K(R) = \frac{1}{\mathcal{N}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_N) \\ \phi_{k_2}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_{k_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k_N}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \begin{matrix} k_i \\ \Downarrow \\ \mathbf{r}_j \Longleftrightarrow \end{matrix}$$

$\mathbf{r}_j \Longleftrightarrow$

占有状態のセット

$$K = \{k_1, k_2, \dots, k_N\}$$

$$R = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$$

$$H_N \Phi_K(R) = E_K \Phi_K(R), \quad E_K = \sum_{j=1}^N \epsilon_{k_j}$$

$$H_N |K\rangle = E_K |K\rangle$$

第二量子化 多電子系の取り扱いに適している

Slater行列の持つ情報 (1) 粒子が占有している状態の組  $K = \{k_1, k_2, \dots, k_N\}$   
 (2) 粒子の入れ換えに対する反交換性  $\Phi_K(\dots, r_i, \dots, r_j, \dots) = -\Phi_K(\dots, r_j, \dots, r_i, \dots)$

(1) 数表示 全ての1粒子状態に通し番号をつけ、各状態の占有数を用いてK状態を指定する

例: N=3粒子系の  $k_1=3, k_2=8, k_3=10$  占有状態  $\implies K=(0,0,1,0,0,0,1,0,1,0,0,\dots)$

$|K\rangle = c_3^\dagger c_8^\dagger c_{10}^\dagger |0\rangle$  生成演算子  $c_k^\dagger$  k状態に粒子を生成する  
 消滅演算子  $c_k \equiv [c_k^\dagger]^\dagger$  k状態の粒子を消す  
 真空  $|0\rangle$   $c_k |0\rangle \equiv 0$   $\langle K| \equiv [|K\rangle]^\dagger = [c_3^\dagger c_8^\dagger c_{10}^\dagger |0\rangle]^\dagger = \langle 0| c_{10} c_8 c_3$

(2) 反交換関係 生成消滅演算子に以下の関係を課す

$$\{c_k, c_l\} = 0, \quad \{c_k^\dagger, c_l^\dagger\} = 0, \quad \{c_k, c_l^\dagger\} = \delta_{k,l} \quad \{A, B\} = AB + BA$$

$$\implies (c_k^\dagger)^2 = (c_k)^2 = 0 \quad \text{Pauliの排他律}$$

各状態の占有数を取り出すには? 数密度演算子  $\hat{n}_k \equiv c_k^\dagger c_k$   $n_2 |K\rangle = 0 |K\rangle$   
 $\hat{n}_k |K\rangle = n_k |K\rangle$   $n_k$ : 状態kの占有数  $n_3 |K\rangle = 1 |K\rangle$   
 ...

$$H_N \implies \mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k$$

Bose粒子系

- (1) 粒子が占有している状態の組 (0, 1, 2, ... 個)
- (2) 粒子の入れ換えに対する交換性

(1) 数表示 全ての1粒子状態に通し番号をつけ、各状態の占有数(複数可)を用いてK状態を指定する

(2) 交換関係 生成消滅演算子に以下の関係を課す

$$[b_k, b_l] = 0, \quad [b_k^\dagger, b_l^\dagger] = 0, \quad [b_k, b_l^\dagger] = \delta_{k,l} \quad [A, B] = AB - BA$$

ある状態をn個の粒子が占有している場合  $|n\rangle = \frac{(b^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$  (規格化されている)

$$b^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$b |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

cf. 調和振動子の昇降演算子

$$b = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left( x + \frac{i}{m\omega} p \right), \quad b^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left( x - \frac{i}{m\omega} p \right)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \omega \left( b^\dagger b + \frac{1}{2} \right)$$

場の演算子

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r})c_k, \quad \psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r})^*c_k^\dagger$$

$$\phi_k(\mathbf{r}) \text{ の完全性 } \implies \{\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')\} = 0, \quad \{\psi^\dagger(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')\} = 0, \quad \{\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$\text{逆変換 (直交性を用いて)} \quad c_k = \int d\mathbf{r} \phi_k(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}), \quad c_k^\dagger = \int d\mathbf{r} \phi_k(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r})$$

$$\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k = \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\nabla^2}{2m} + v(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r})$$

1粒子演算子

エネルギー期待値の表式に似ているが、  
 $\psi(\mathbf{r})$ は波動関数ではなく演算子である

第二量子化  
 の由来

Fourier変換

周期境界条件

$V=L^3$ : 系の体積

$$\text{連続体} \quad f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad \frac{1}{V} \sum_k = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

任意の整数

$$f(\mathbf{k}, \omega) = \int_V d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$$

$$H_{\text{ex}} = - \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) \implies H_{\text{ex}} = -\rho_{-q} \phi(\mathbf{r}, t)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi_0 e^{i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - (\omega+i\delta)t]}$$

格子系

$\omega$ - $t$  に関しては連続体と同じ

$N$ :  $V$ 内の格子点数 = Brillouin Zone (B.Z.)内の独立な $\mathbf{k}$ 点の数

$$f(\mathbf{R}_i) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{B.Z.}} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}$$

$\implies$

$$f_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = f_{\mathbf{k}} \quad \mathbf{G}: \text{任意の逆格子ベクトル}$$

$$f_{\mathbf{k}} = \sum_i f(\mathbf{R}_i) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}$$

$$\sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} = N \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{G}} \quad \text{運動量保存則は、逆格子ベクトル}\mathbf{G}\text{のずれを含めた範囲で成り立つ} = \text{擬運動量}$$

$\mathbf{G} = 0$  正常過程

$\mathbf{G} \neq 0$  Umklapp過程

任意の1粒子、2粒子演算子の第二量子化

第一量子化:  $F(R) = \sum_{j=1}^N f(\mathbf{r}_j), \quad G(R) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = g(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i))$

例 粒子数密度:  $\rho(\mathbf{R}) = \sum_j \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}_j) \Rightarrow f(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r})$

全運動エネルギー:  $H_K(R) = -\sum_j \frac{\nabla_j^2}{2m} \Rightarrow f(\mathbf{r}) = -\frac{\nabla^2}{2m}$

クーロン相互作用:  $V_C(R) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \Rightarrow g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$

第二量子化:  $\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad \mathcal{G} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})$

任意の行列要素が、2つの表示で一致

$$\int dR \Phi_K(R)^* F(R) \Phi_L(R), \quad \int dR \Phi_K(R)^* G(R) \Phi_L(R) \quad \longleftrightarrow \quad \langle K | \mathcal{F} | L \rangle, \quad \langle K | \mathcal{G} | L \rangle$$

Slater表示  数表示

任意の1粒子状態基底では  $\psi(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) c_k, \quad \psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r})^* c_k^\dagger$

$$\mathcal{F} = \sum_{kl} \langle k | f | l \rangle c_k^\dagger c_l, \quad \langle k | f | l \rangle \equiv \int d\mathbf{r} \phi_k(\mathbf{r})^* f(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r})$$

$$\mathcal{G} = \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl | g | mn \rangle c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n, \quad \langle kl | g | mn \rangle \equiv \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_k(\mathbf{r})^* \phi_l(\mathbf{r}')^* g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}')$$

スピンの導入 Fermi粒子の内部自由度  $\alpha = \uparrow, \downarrow$

2成分スピノール  $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{r}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$

スピンの作用する任意のエルミート演算子 次の行列の線形結合で表現可

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

単位行列  Pauli行列

$f(\mathbf{r}), g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ がスピンによらない場合

$$\langle k\alpha | f | l\alpha' \rangle = \langle k | f | l \rangle \delta_{\alpha, \alpha'}$$

$$\langle k\alpha l\beta | g | m\alpha' n\beta' \rangle = \langle kl | g | mn \rangle \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{\beta, \beta'}$$

$$\mathcal{F} = \sum_\alpha \int d\mathbf{r} \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{kl} \sum_\alpha \langle k | f | l \rangle c_{k\alpha}^\dagger c_{l\alpha}$$

$$\mathcal{G} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}') g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_\beta(\mathbf{r}') \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{klmn} \sum_{\alpha\beta} \langle kl | g | mn \rangle c_{k\alpha}^\dagger c_{l\beta}^\dagger c_{n\beta} c_{m\alpha}$$

$\begin{matrix} 1 & 4 \\ 1 & 2 \end{matrix}$ 
 $\begin{matrix} 2 & 3 \\ 4 & 3 \end{matrix}$

有用な恒等式

$$\delta_{13} \delta_{24} = \frac{1}{2} (\delta_{12} \delta_{43} + \sigma_{12} \cdot \sigma_{43}) = \frac{1}{2} [(i\sigma_y)_{12}^\dagger (i\sigma_y)_{43} + (i\sigma_y \sigma)_{12}^\dagger \cdot (i\sigma_y \sigma)_{43}]$$

charge & spin

Cooper pair (singlet & triplet)

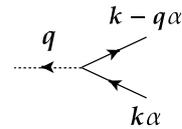
密度演算子

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r})c_k, \quad \psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r})^*c_k^\dagger$$

$$\phi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{平面波とすればFourier変換}$$

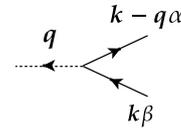
粒子数密度

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_q e^{iq\cdot\mathbf{r}} \rho_q, \quad \rho_q \equiv \sum_{k\alpha} c_{k-q\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$$



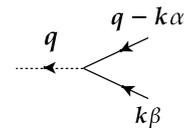
スピン密度

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)_{\alpha\beta} \psi_\beta(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_q e^{iq\cdot\mathbf{r}} \mathbf{S}_q, \quad \mathbf{S}_q \equiv \sum_{k\alpha\beta} c_{k-q\alpha}^\dagger \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)_{\alpha\beta} c_{k\beta}$$



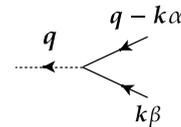
1重項ペア密度

$$\rho_s(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \psi_\alpha(\mathbf{r}) \left(\frac{i\sigma_y}{\sqrt{2}}\right)_{\alpha\beta} \psi_\beta(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_q e^{iq\cdot\mathbf{r}} \rho_{sq}, \quad \rho_{sq} \equiv \sum_{k\alpha\beta} c_{q-k\alpha} \left(\frac{i\sigma_y}{\sqrt{2}}\right)_{\alpha\beta} c_{k\beta}$$



3重項ペア密度

$$\rho_t(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \psi_\alpha(\mathbf{r}) \left(\frac{i\sigma_y\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{2}}\right)_{\alpha\beta} \psi_\beta(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_q e^{iq\cdot\mathbf{r}} \rho_{tq}, \quad \rho_{tq} \equiv \sum_{k\alpha\beta} c_{q-k\alpha} \left(\frac{i\sigma_y\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{2}}\right)_{\alpha\beta} c_{k\beta}$$



Coulomb相互作用 (原子内)

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\{m_i\}} \sum_{\alpha\beta} V_{m_1 m_2, m_3 m_4} c_{m_1 \alpha}^\dagger c_{m_2 \beta}^\dagger c_{m_4 \beta} c_{m_3 \alpha} \quad V_{m_1 m_2, m_3 m_4} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \overbrace{\phi_{m_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{m_2}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \phi_{m_3}(\mathbf{r}) \phi_{m_4}(\mathbf{r}')}$$

最大:  $m_1=m_2=m_3=m_4 (=m)$   $U_m \equiv V_{mm,mm} > 0$  直接積分

$$\phi_m(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$$

$$\sum_m U_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} \quad \text{Hubbard相互作用}$$

粒子数演算子(m)

$$n_m = \sum_\sigma n_{m\sigma}$$

二番目:  $m_1=m_3, m_2=m_4 (m_1 \neq m_2)$   $U(m_1, m_2) \equiv V_{m_1 m_2, m_1 m_2} > 0$  直接積分

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} U(m_1, m_2) n_{m_1} n_{m_2} \quad U(m_1, m_2) \text{は} |m_1 - m_2| \text{が小さいほど小さい}$$

⇒ Hund則(2) S最大の中でL最大

三番目:  $m_1=m_4, m_2=m_3 (m_1 \neq m_2)$   $J(m_1, m_2) \equiv V_{m_1 m_2, m_2 m_1} > 0$  交換積分

スピン演算子(m)

$$\frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} \sum_{\alpha\beta} J(m_1, m_2) c_{m_1 \alpha}^\dagger c_{m_2 \beta}^\dagger c_{m_1 \beta} c_{m_2 \alpha} = -\frac{1}{4} \sum_{m_1 \neq m_2} J(m_1, m_2) (\boldsymbol{\sigma}_{m_1} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{m_2} + n_{m_1} n_{m_2})$$

$$\boldsymbol{\sigma}_m = \sum_{\alpha\beta} c_{m\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{m\beta}$$

強磁性的相互作用 ⇒ Hund則(1) S最大

$$H_C = \sum_m U_m n_{m\uparrow} n_{m\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2} U'(m_1, m_2) n_{m_1} n_{m_2} - \frac{1}{4} \sum_{m_1 \neq m_2} J(m_1, m_2) \boldsymbol{\sigma}_{m_1} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{m_2} + \dots$$

$$U'(m_1, m_2) = U(m_1, m_2) - \frac{1}{2} J(m_1, m_2)$$

# 基本モデル

電子ガス模型 (連続体模型) 詳細な構造が重要で無く、長波長の物理

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{kk'\alpha\beta} \sum_{q \neq 0} v(q) c_{k\alpha}^\dagger c_{k'-q\beta}^\dagger c_{k'\beta} c_{k-q\alpha}$$

運動エネルギー

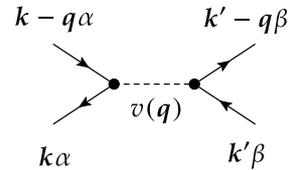
Coulomb相互作用

$$\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu$$

$$v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 V}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} v(q) [\rho_{-q} \rho_q - N_e]$$

電子密度のq=0(一様)成分は、背景の正電荷とキャンセル



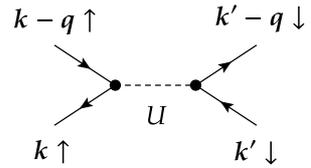
Hubbard模型 (1軌道) 運動エネルギーと短距離斥力が拮抗する物理

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

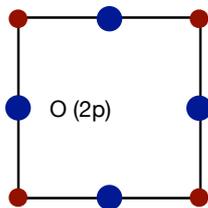
$$n_{i\alpha} = c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha}$$

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{U}{N} \sum_{kk'} \sum_{q \neq 0} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'-q\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{k-q\uparrow}$$

$\xi_k$  tight-binding模型など



CuO<sub>2</sub>面



Cu (3d)

Cu (3d)<sup>9</sup>

1 hole (d軌道)

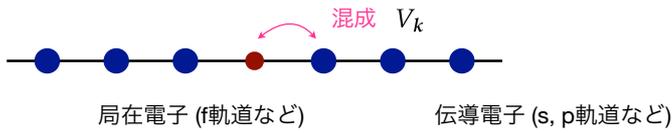
2 holes になると強い斥力が働く

スピン↑とスピン↓の間にもみ働く



$$\xi_k = -2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] - \mu \quad (\text{正方格子})$$

Anderson模型 (局在軌道 + 遍歴軌道) 金属中の磁性不純物の問題、量子ドット



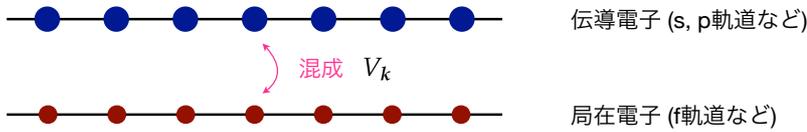
$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \xi_f \sum_{\alpha} f_{\alpha}^\dagger f_{\alpha} + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\alpha} (V_k c_{k\alpha}^\dagger f_{\alpha} + \text{h.c.})$$

伝導電子の運動エネルギー      局在電子のエネルギー準位      局在電子のクーロン斥力      伝導・局在電子の混成

$\xi_f = \epsilon_f - \mu$

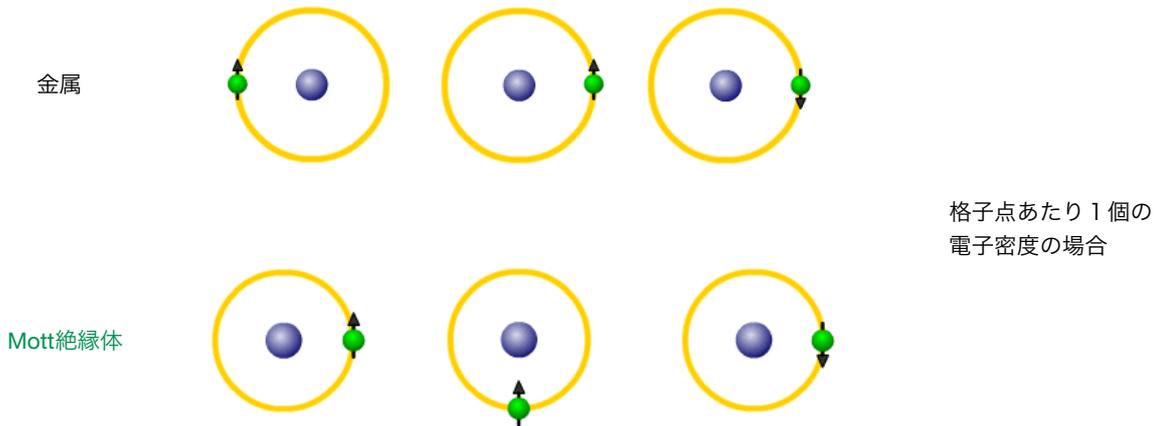
$$n_{f\alpha} = f_{\alpha}^\dagger f_{\alpha}$$

周期Anderson模型 (局在軌道 + 遍歴軌道) f電子系 (f電子の軌道自由度は無視)



$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \xi_f \sum_{i\alpha} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} + U \sum_i n_{f i \uparrow} n_{f i \downarrow} + \sum_{k\alpha} (V_k c_{k\alpha}^\dagger f_{k\alpha} + \text{h.c.})$$

Mott絶縁体      バンド理論では金属になるはずが、電子間のCoulomb斥力によって絶縁体になる物質



電子間のクーロン斥力により、各格子点に1個の電子のみ存在

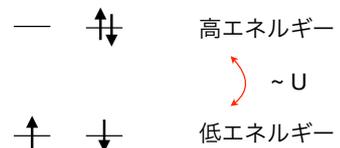
バンド絶縁体：電荷とスピンの自由度がともに消失

Mott絶縁体：電荷の自由度のみ消失、スピン自由度は活性 (多くの磁性体)

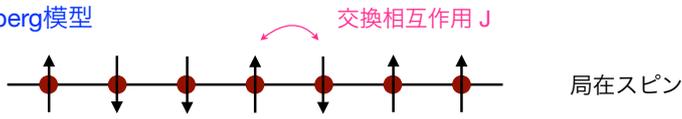
相互作用なし



相互作用あり

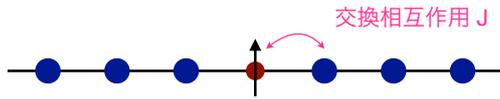


Heisenberg模型



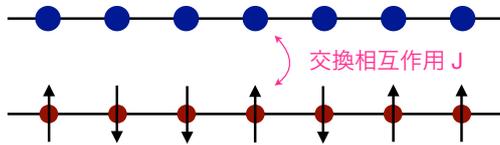
$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \quad J = \frac{4t^2}{U}$$

近藤模型、近藤格子模型



$$H = \sum_{k\alpha} \xi_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + J \sum_{kk'\alpha\beta} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{k'\beta} \cdot \mathbf{S}_f$$

$$J = \frac{4|V_k|^2}{U} \quad (\text{対称条件 } 2\epsilon_f + U = 0 \text{ の場合})$$



$$H = \sum_{k\alpha} \xi_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + J \sum_{i\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{i\beta} \cdot \mathbf{S}_{fi}$$

# 線形応答

準備

量子力学的表示  $i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t)$

Schrödinger表示 Hは時間に顕わによらない

$\psi(t) = e^{-iHt} \psi(0)$  系の時間変化は全て波動関数が担っている

任意の行列要素  $\langle \psi_1(t) | A | \psi_2(t) \rangle = \langle \psi_1(0) | e^{iHt} A e^{-iHt} | \psi_2(0) \rangle$

Heisenberg表示  $\tilde{A}(t) \equiv e^{iHt} A e^{-iHt} \implies i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{A}(t) = [\tilde{A}(t), H]$  Heisenbergの運動方程式

任意の行列要素  $\langle \psi_1(0) | \tilde{A}(t) | \psi_2(0) \rangle$  系の時間変化は全て演算子が担っている

虚時間  $t \rightarrow -i\tau$  を考えると  $\tilde{A}(-i\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H} \equiv A(\tau)$  虚時間Heisenberg表示

熱統計の計算で頻出

大正準集合の場合  $H \rightarrow K \equiv H - \mu N$  と置き換える

相互作用表示

$H = H_0 + V$  厳密に解ける部分 (自由粒子系) + 相互作用項 摂動展開に有用

$\psi_I(t) \equiv e^{iH_0 t} \psi(t) \implies i \frac{\partial}{\partial t} \psi_I(t) = V \psi_I(t)$  「波動関数」はVによって時間発展

$A_I(t) \equiv e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} \implies i \frac{\partial}{\partial t} A_I(t) = [A_I(t), H_0]$  「演算子」はH<sub>0</sub>によって時間発展

密度行列

$H \psi_m = E_m \psi_m \quad \psi_m = |m\rangle \quad H$ の固有状態 (正規直交系)

量子統計平均  $\langle A \rangle = \sum_m w_m \langle m | A | m \rangle \equiv \text{Tr}(\rho A)$

正準集合  $\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} |m\rangle \langle m|$

$\rho \equiv \sum_m w_m |m\rangle \langle m|$  密度行列

大正準集合  $\rho = \frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{\text{Tr}(e^{-\beta(H-\mu N)})} = \frac{e^{-\beta(E_m-\mu N_m)}}{\sum_m e^{-\beta(E_m-\mu N_m)}} |m\rangle \langle m|$

時間発展  $\psi_m(t) = |m(t)\rangle \quad i \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle = H |m(t)\rangle$

$\rho(t) \equiv \sum_m w_m |m(t)\rangle \langle m(t)|$  時間発展する密度行列

$i \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = \sum_m w_m \left( i \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle \langle m(t)| + |m(t)\rangle i \frac{\partial \langle m(t)|}{\partial t} \right) = \sum_m w_m \left( H |m(t)\rangle \langle m(t)| - H |m(t)\rangle \langle m(t)| H \right)$

$= [H, \rho(t)]$  von Neumann方程式 Heisenberg方程式と順序が異なることに注意

座標表示

$\rho(R, R') \equiv \langle R | \rho | R' \rangle = \sum_m w_m \psi_m(R) \psi_m^*(R')$

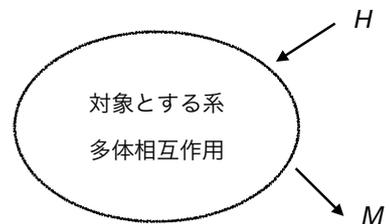
# 一般論

線形応答 外場に対する応答を見て内部の様子を探る

磁場 (H) → 磁化 (M)      電場 (E) → 電流 (j)

$$M(H) = \chi H + \chi_3 H^3 + \dots$$

線形応答



純粋状態に対する応答

系のハミルトニアン  $H$   
 外場との結合  $H_{\text{ex}}(t) = -BF(t)$       B は演算子、Fは振動外場

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = [H + H_{\text{ex}}(t)] \psi(t) \quad \Longrightarrow \quad i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(t) = \tilde{H}_{\text{ex}}(t) \varphi(t)$$

$$\psi(t) \equiv e^{-iHt} \varphi(t)$$

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n|$$

$t \rightarrow -\infty$  で熱平衡 (F=0)       $\varphi(t \rightarrow -\infty) = |m\rangle$        $H|m\rangle = E_m|m\rangle$       cf. 時間に依存する摂動論

$$\varphi(t) = |m\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' \tilde{H}_{\text{ex}}(t') \varphi(t') \sim |m\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' \tilde{H}_{\text{ex}}(t') |m\rangle = |m\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' \sum_n |n\rangle \langle n| \tilde{H}_{\text{ex}}(t') |m\rangle$$

外場の1次まで

時刻 t の期待値

$$\langle \psi | A | \psi \rangle \sim \langle m | \tilde{A}(t) | m \rangle - i \left\langle m \left| \tilde{A}(t) \int_{-\infty}^t dt' \tilde{H}_{\text{ex}}(t') \right| m \right\rangle + i \left\langle m \left| \int_{-\infty}^t dt' \tilde{H}_{\text{ex}}(t') \tilde{A}(t) \right| m \right\rangle$$

$$= \langle m | A | m \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \langle m | [\tilde{A}(t - t'), B] | m \rangle F(t') \quad t > t': \text{因果律}$$

$$\left( \begin{array}{l} \text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) \\ e^{-iHt} |n\rangle = e^{-iE_n t} |n\rangle \end{array} \right.$$

統計平均：断熱  $t \rightarrow -\infty$  で熱平衡にあった系を熱浴から切り離し、外場をゆっくりと印加 以下では  $\langle A \rangle \equiv 0$   
 (外場によってエネルギー散逸が生じる場合, e.g. 直流伝導率)

$$w_m = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_m} \quad m \text{ 状態の出現確率は、} t \rightarrow -\infty (F=0) \text{ の熱平衡分布に従う} \quad \langle \dots \rangle \equiv \sum_m w_m \langle m | \dots | m \rangle$$

大正準集合の場合は  $H \rightarrow K \equiv H - \mu N$  と置き換える

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle + \int_{-\infty}^0 dt' \chi_{AB}^R(t-t') F(t') \quad \text{久保公式}$$

$$\chi_{AB}^R(t) \equiv i\theta(t) \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle \quad \text{遅延グリーン関数} \quad \left( \begin{array}{l} \text{bosonのグリーン関数は通常} \\ \text{負符号を付けて定義する} \end{array} \right)$$

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & (t > 0) \\ 0 & (t < 0) \end{cases}$$

$F(t) = F_0 e^{-i(\omega+i\delta)t}$  のとき  $\delta$ は正の無限小であり、ゆっくり印加することを表す収束因子

$$\langle A \rangle(t) = \chi_{AB}^R(\omega) F(t) \quad \text{複素感受率} \quad \chi_{AB}^R(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi_{AB}^R(t) e^{i(\omega+i\delta)t} \quad (\text{フーリエ変換})$$

密度行列を用いて書くと

$$\langle A \rangle(t) = \langle A \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \langle [\tilde{A}(t-t'), B] \rangle F(t')$$

$$\langle [\tilde{A}(t), B] \rangle = \text{Tr}(\rho(0) \{ e^{iHt} A e^{-iHt} B - B e^{iHt} A e^{-iHt} \})$$

$$= \text{Tr}([\tilde{B}(-t), \rho(0)] A) \quad [\rho(0), H] = 0$$

$$= \text{Tr} \left( \left\{ \rho(0) + i \int_{-\infty}^t dt' [\tilde{B}(-t+t'), \rho(0)] F(t') \right\} A \right)$$

$$\equiv \text{Tr}(\rho(t) A)$$

$$\rho(t) \sim \rho(0) - i \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH(t-t')} [H_{\text{ex}}(t'), \rho(0)] e^{iH(t-t')} \quad \text{外場の1次まで}$$

### スペクトル (Lehmann) 表示

$$\chi_{AB}^R(\omega) = i \int_0^{\infty} dt \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle e^{i(\omega+i\delta)t} \quad A_{mn} \equiv \langle m | A | n \rangle$$

$$= i \int_0^{\infty} dt \sum_{mn} w_m (e^{i(E_m - E_n)t} A_{mn} B_{nm} - e^{-i(E_m - E_n)t} B_{mn} A_{nm}) e^{i(\omega+i\delta)t} = i \int_0^{\infty} dt \sum_{mn} (w_m - w_n) A_{mn} B_{nm} e^{i(\omega+i\delta+E_m - E_n)t}$$

$$= - \sum_{mn} \frac{(w_m - w_n) A_{mn} B_{nm}}{\omega + i\delta + E_m - E_n} = - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{AB}(x)}{\omega + i\delta - x}$$

$$\text{スペクトル関数} \quad \rho_{AB}(x) \equiv \pi \sum_{mn} (w_m - w_n) A_{mn} B_{nm} \delta(x + E_m - E_n) = \pi(1 - e^{-\beta x}) \sum_{mn} w_m A_{mn} B_{nm} \delta(x + E_m - E_n)$$

$$A = B^\dagger \text{ のとき } \rho_{B^\dagger B}(x) = \pi(1 - e^{-\beta x}) \sum_{mn} w_m |B_{nm}|^2 \delta(x + E_m - E_n) \text{ は実数}$$

$$\Rightarrow \rho_{B^\dagger B}(\omega) = \text{Im} \chi_{B^\dagger B}^R(\omega) = -\rho_{BB^\dagger}(-\omega) \quad \chi_{B^\dagger B}^R(\omega) = \chi_{BB^\dagger}^R(-\omega)^*$$

$$\text{sgn}[\rho_{B^\dagger B}(x)] = \text{sgn}(x) \quad \frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P} - i\pi\delta(x)$$

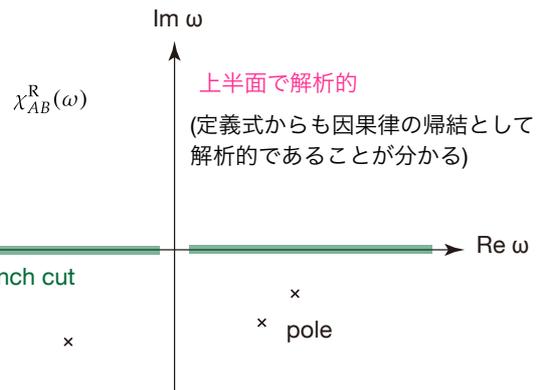
例：Lorentz型

$$\rho_{AB}(x) = \chi_0 \frac{x\Gamma}{x^2 + \Gamma^2}$$

$$\Rightarrow \chi_{AB}^R(\omega) = \frac{\chi_0}{1 - i\omega/\Gamma}$$

(連続スペクトルによって下半面に極が出現：系の励起状態の情報)

無限小の $\delta$ により、マクロな系に不可逆性が導入された



統計平均：等温 外場  $F(t) = F_0$  の下で、常に熱平衡を保つ場合 (e.g. 一様磁化率)

$$w'_m = \frac{1}{Z'} \langle m | e^{-\beta(H+H_{\text{ex}})} | m \rangle \sim \frac{w_m e^{\beta F_0 B_{mm}}}{\sum_m w_m e^{\beta F_0 B_{mm}}} \sim w_m (1 + \beta F_0 B_{mm} - \beta F_0 \langle B \rangle)$$

$$Z' = \sum_m \langle m | e^{-\beta(H+H_{\text{ex}})} | m \rangle$$

(注：エネルギー単位は縮退していないとした)

$$\langle A \rangle_T \equiv \sum_m w'_m \langle \psi | A | \psi \rangle \equiv \langle A \rangle + \chi_{AB}^T F_0$$

$$\begin{aligned} \chi_{AB}^T &\sim \sum_m w_m i \int_0^\infty dt \langle m | [\tilde{A}(t), B] | m \rangle + \beta \sum_m w_m A_{mm} B_{mm} - \beta \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= \chi_{AB}^R(\omega \rightarrow 0) + \beta \sum_m w_m A_{mm} B_{mm} \quad (=0) \end{aligned}$$

この部分がゼロならば  
断熱感受率の静的極限と一致 (混合性の条件)

演算子 A または B が保存する成分を持たない場合に  
満たされる

(e.g. 外場が空間的に非一様  $\mathbf{q} \neq 0$  場合)

⇒ (一様)等温感受率を求めるには、常に  $\chi_{AB}^R(\mathbf{q}, \omega)$  を求めて、 $\omega=0, \mathbf{q} \rightarrow 0$  の順で極限を取れば良い

等温感受率は次のように求めることもできる (縮退があってもOK)

$$\chi_{AB}^T = \int_0^\beta d\tau \langle B(\tau) A \rangle = - \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} \frac{(w_m - w_n) A_{mn} B_{nm}}{E_m - E_n} + \beta \sum_{mn}^{E_m = E_n} w_n A_{mn} B_{nm}$$

(cf. スペクトル表示)

$$\left( \begin{array}{l} e^{-\tau(H+H_{\text{ex}})} \equiv e^{-\tau H} U(\tau) \\ \frac{\partial U}{\partial \tau} = -H_{\text{ex}}(\tau) U(\tau) \\ U(\beta) = 1 - \int_0^\beta d\tau H_{\text{ex}}(\tau) + \dots \end{array} \right.$$

# 因果律・揺動散逸定理

## 因果律、解析性とKramers-Kronig関係式

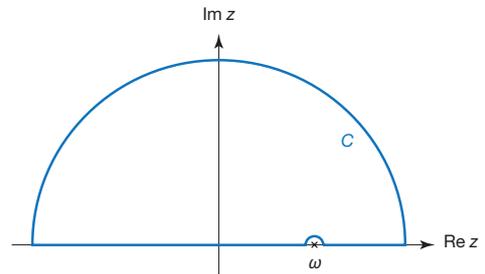
$$\chi_{AB}^R(\omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle e^{i(\omega+i\delta)t} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{AB}(x)}{\omega + i\delta - x}$$

$\theta(t)$ の存在は因果律を表す  $\implies$   $\chi_{AB}^R(\omega)$ は $\omega$ の上半面で解析的 (逆も真)

$\omega \rightarrow \infty$ で $\chi_{AB}^R(\omega)$ は速やかにゼロ

$$0 = \oint_C dz \frac{\chi_{AB}^R(z)}{z - \omega} = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi_{AB}^R(\omega')}{\omega' - \omega} - \pi i \chi_{AB}^R(\omega)$$

上半面で解析的      実軸上       $z=\omega$ まわりの半円



## Kramers-Kronig 関係式

$$\text{Re } \chi_{AB}^R(\omega) = -\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \chi_{AB}^R(\omega')}{\omega - \omega'}$$

$$\text{Im } \chi_{AB}^R(\omega) = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Re } \chi_{AB}^R(\omega')}{\omega - \omega'}$$

## 散逸とスペクトル関数

外場が系にする仕事

$$B^\dagger = B$$

$$\frac{dW}{dt} = \frac{d}{dt} \langle H_{\text{ex}}(t) \rangle = -\langle B \rangle (t) \frac{dF(t)}{dt} \sim -\left( \langle B \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{BB}^R(t-t') F(t') \right) \frac{dF(t)}{dt}$$

長時間平均 (= 系が吸収するエネルギー : 熱力学第2法則より必ず正)

$$\begin{aligned} \bar{W} &\equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \frac{dW}{dt} \sim - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{BB}^R(t-t') F(t') \frac{dF(t)}{dt} \quad (\text{Fourier変換}) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (i\omega) \chi_{BB}^R(\omega) F(\omega) F(-\omega) \\ &= \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega \frac{\chi_{BB}^R(\omega) - \chi_{BB}^R(-\omega)}{2i} |F(\omega)|^2 = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \left( \omega \text{Im} \chi_{BB}^R(\omega) \right) |F(\omega)|^2 \end{aligned}$$

$$\implies \omega \text{Im} \chi_{BB}^R(\omega) > 0$$

スペクトル表示を用いても確認できる

- ・線形応答が成立するとき、外場を印加し続けてもエネルギーは非平衡定常状態に達して、一定に留まる
- ・系が吸収したエネルギーは、系外へ散逸される
- ・複素感受率の虚部は、散逸と関係した量である

cf. 摩擦のある調和振動子

## 揺動散逸定理

動的相関関数 (ゆらぎ)

$$S_{BB}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \delta \tilde{B}(t) \delta B \rangle \quad \delta B \equiv B - \langle B \rangle$$

スペクトル表示すると

$$S_{BB}(\omega) = \sum_{mn} w_m |B_{nm}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega + E_m - E_n)t} = 2\pi \sum_{mn} w_m |B_{nm}|^2 \delta(\omega + E_m - E_n)$$

$$\implies \text{Im} \chi_{BB}^R(\omega) = \frac{1}{2} (1 - e^{-\beta\omega}) S_{BB}(\omega)$$

散逸

揺動

外場、または、自発的な揺らぎによって生じた非平衡状態から平衡状態への緩和は、同じ法則に従う

cf. Onsager相反定理

$$S_{BB}(-\omega) = e^{-\beta\omega} S_{BB}(\omega)$$

放出プロセス

吸収プロセス

e.g. Raman散乱のStokes過程と反Stokes過程の強度比

# 松原形式

## 虚時間(松原/温度)グリーン関数

「時間」順序積

2粒子グリーン関数  $\chi_{AB}(\tau) \equiv \langle T_\tau A(\tau) B \rangle$

$$T_\tau A(\tau) B = \theta(\tau) A(\tau) B \mp \theta(-\tau) B A(\tau) \quad (\text{fermion/boson})$$

A, B: (スピン)密度演算子 (boson)

$$\chi_{AB}(\tau < 0) = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} B e^{\tau H} A e^{-\tau H}) = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} e^{(\tau+\beta)H} A e^{-(\tau+\beta)H} B) = \chi_{AB}(\tau + \beta)$$

周期 $\beta$ の周期関数

$$\implies \text{Fourier級数} \quad \chi_{AB}(\tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \chi_{AB}(i\omega_n) \quad \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta} \quad n: \text{整数}$$

(fermionの場合は  
周期 $\beta$ の反周期関数)

$$\chi_{AB}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \chi_{AB}(\tau)$$

松原振動数(boson)

等温感受率  $\chi_{AB}^T = \chi_{BA}(i\omega_n = 0)$

1粒子グリーン関数  $G_{ij}(\tau) \equiv -\langle T_\tau c_i(\tau) c_j^\dagger \rangle$

$$H \rightarrow K = H - \mu N$$

中間状態で粒子数が変化するので  
Kを用いたHeisenberg表示を使う

$$G_{ij}(\tau < 0) = \mp G_{ij}(\tau + \beta) \implies G_{ij}(\tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_{ij}(i\omega_n)$$

$$(fermion/boson) \quad G_{ij}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{ij}(\tau)$$

$$\omega_n = \frac{\pi n}{\beta} (2n + 1) \quad n: \text{整数}$$

松原振動数(fermion)

密度演算子の期待値  $\pm G_{ij}(\tau = -0) = \langle c_j^\dagger c_i \rangle = T \sum_n e^{i\omega_n 0^+} G_{ij}(i\omega_n)$

1粒子遅延グリーン関数  $G_{ij}^R(t) \equiv -i\theta(t) \langle \tilde{c}_i(t) c_j^\dagger \pm c_j^\dagger \tilde{c}_i(t) \rangle \quad (\text{fermion/boson})$

因果律を満たすグリーン関数

$$G_{ij}^R(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{ij}^R(t) e^{i(\omega+i\delta)t}$$

## スペクトル表示と解析接続

### 2粒子

(boson)

$$\chi_{AB}(i\omega_n) = -\sum_{mn} \frac{(w_m - w_n)A_{mn}B_{nm}}{i\omega_n + E_m - E_n} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{AB}(x)}{i\omega_n - x} = \chi_{AB}(z = i\omega_n)$$

$$\chi_{AB}^R(\omega_n) = -\sum_{mn} \frac{(w_m - w_n)A_{mn}B_{nm}}{\omega + i\delta + E_m - E_n} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{AB}(x)}{\omega + i\delta - x} = \chi_{AB}(z = \omega + i\delta)$$

上半面で解析的なので  
 $\omega_n > 0$  に解析接続できる

### 1粒子

(fermion/boson)

$$G_{ij}(i\omega_n) = \sum_{mn} \frac{(w_m \pm w_n)(c_i)_{mn}(c_j^\dagger)_{nm}}{i\omega_n + E_m - E_n} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A_{ij}(x)}{i\omega_n - x} = G_{ij}(z = i\omega_n)$$

$$A_{ij}(x) \equiv \sum_{mn} (w_m \pm w_n)(c_i)_{mn}(c_j^\dagger)_{nm} \delta(x + E_m - E_n)$$

$$= (1 \pm e^{-\beta x}) \sum_{mn} w_m (c_i)_{mn}(c_j^\dagger)_{nm} \delta(x + E_m - E_n) = A_{ji}^*(x)$$

(fermion/boson)

$$G_{ij}^R(\omega) = \sum_{mn} \frac{(w_m \pm w_n)(c_i)_{mn}(c_j^\dagger)_{nm}}{\omega + i\delta + E_m - E_n} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A_{ij}(x)}{\omega + i\delta - x} = G_{ij}(z = \omega + i\delta)$$

上半面で解析的なので  
 $\omega_n > 0$  に解析接続できる

密度行列に  $K = H - \mu N$  を用いた場合、 $\omega, x$  は化学ポテンシャルから測ったものになる

実用上は温度グリーン関数を求め、解析接続によって遅延グリーン関数を求める  $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$  ( $\omega_n \geq 0$ )

実数場  $c_i = c_i^\dagger$  の場合 e.g. phonon, Majorana fermion cf. 電子ホール対称性

$$G_{ij}(i\omega_n) = G_{ji}^*(-i\omega_n)$$

$$G_{ij}(\tau) = G_{ji}^*(\tau)$$

$$A_{ij}^*(x) = \pm A_{ij}(-x) \implies$$

$$G_{ij}(i\omega_n) = \mp G_{ij}^*(i\omega_n)$$

$$G_{ij}(\tau) = \mp G_{ij}^*(-\tau)$$

## 自由粒子の1粒子グリーン関数

$$K = \sum_k (\epsilon_k - \mu) c_k^\dagger c_k \equiv \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k$$

$$G_0(k, \tau) = \begin{cases} \mp f_\pm(-\xi_k) e^{-\xi_k \tau} & (\tau > 0) \\ \pm f_\pm(+\xi_k) e^{-\xi_k \tau} & (\tau < 0) \end{cases}$$

(fermion/boson)

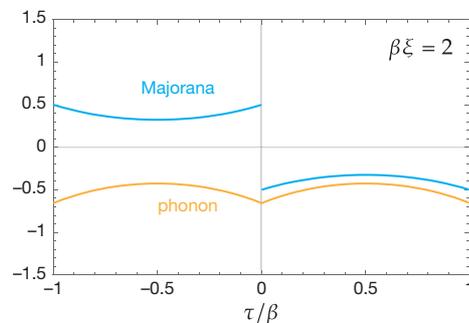
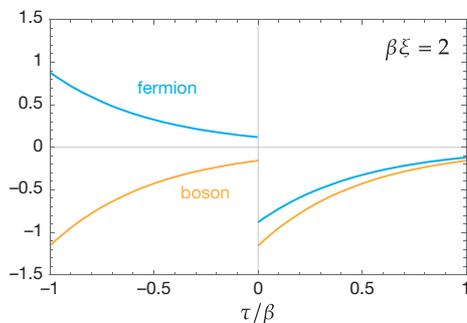
$$G_0(k, z) = \frac{1}{z - \xi_k}$$

$$G_0(k, \tau) = -\frac{1}{4} \frac{\cosh(|\tau|\xi_k) + \cosh((\beta - |\tau|)\xi_k)}{\cosh^2(\beta\xi_k/2)} \text{sgn}(\tau)$$

$$G_0(k, \tau) = -\frac{1}{4} \frac{\sinh(|\tau|\xi_k) + \sinh((\beta - |\tau|)\xi_k)}{\sinh^2(\beta\xi_k/2)}$$

(Majorana/phonon)

$$G_0(k, z) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{z - \xi_k} \pm \frac{1}{z + \xi_k} \right)$$



### $\tau=0$ の不連続性

$$G_0(k, 0-) - G_0(k, 0+) = \langle c_k c_k^\dagger \pm c_k^\dagger c_k \rangle = 1$$

### 分布関数

$$G_0(k, 0-) = \pm f_\pm(\xi_k)$$

### 1粒子状態密度 & 角度分解スペクトル

$$A(k, \omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_0^R(k, \omega) = \delta(\omega - \xi_k)$$

$$\rho(\omega) = \sum_k A(k, \omega) = \sum_k \delta(\omega - \xi_k)$$

## グリーン関数と物理量

動的帯磁率  $A \rightarrow M_\alpha, B \rightarrow M_\beta$

$$\chi_{\alpha\beta}^R(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, x)}{\omega + i\delta - x}$$

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \pi(1 - e^{-\beta\omega}) S_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$$

動的構造因子

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{mn} w_m [(M_{q\alpha})_{mn} (M_{-q\beta})_{nm}] \delta(x + E_m - E_n)$$

中性子散乱の微分散乱断面積は  $S_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$  に比例

$$\frac{1}{TT_1} \propto \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \chi_{+-}^R(\omega_0)}{\pi \omega_0}$$

核磁気共鳴のスピンの格子(縦)緩和時間  $T_1$  は局所横帯磁率と関係

cf. 総和則

$$\langle |M_{q\alpha}|^2 \rangle = T \sum_n \chi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\omega_n)$$

## 電子の1粒子グリーン関数

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(\mathbf{k}, x)}{\omega + i\delta - x}$$

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{mn} |\langle m|c_{\mathbf{k}}|n \rangle|^2 (w_m + w_n) \delta(\omega + E_m - E_n)$$

cf. 総和則

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx A(\mathbf{k}, x) = 1$$

n状態はm状態より電子数が1個多い

$\omega > 0, \rightarrow E_n > E_m$  「粒子的」な励起 逆光電子分光 (精度が悪い)

$\omega < 0, \rightarrow E_n < E_m$  「ホールの」な励起 光電子分光 (精度が良い、 $\mathbf{k}$ 依存性も分かる)

Fermi準位以下の電子状態が分かる

## 松原振動数の和の公式

T=0極限  $T \sum_n A(i\omega_n) \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(i\omega)$

和を積分に  $T \sum_n A(i\omega_n) = \mp \frac{1}{2\pi i} \int_C dz A(z) f_{\pm}(z) = \pm \frac{1}{2\pi i} \int_C dz A(z) f_{\pm}(-z)$  (fermion/boson)

$A(z) f_{\pm}(z)$  が  $|z| \rightarrow \infty$  で速やかにゼロになる場合

$$= \pm \sum_i f_{\pm}(z_i) \text{Res} A(z_i) \mp \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx [A(x+i\delta) - A(x-i\delta)] f_{\pm}(x)$$

例1 実軸  $z > \xi_k$  にlogの切断

$$T \sum_n \log(\xi_k - i\omega_n) = T \ln(1 \pm e^{-\beta\xi_k})^{\pm 1}$$

bosonの場合  $\xi_k > 0$

例2  $z = \xi_k$  に1位の極

$$T \sum_n \frac{e^{i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \xi_k} = \pm f_{\pm}(\xi_k)$$

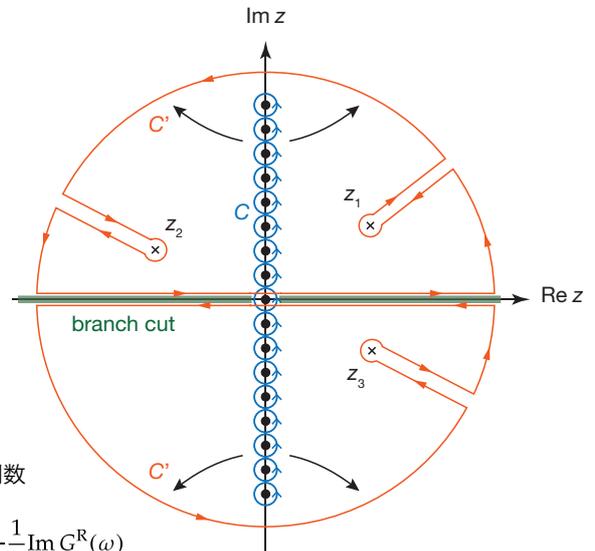
例3  $\omega_n$  fermion  $\epsilon_m$  boson

$$-T \sum_n G_0^{(1)}(i\omega_n) G_0^{(2)}(i\omega_n + i\epsilon_m) = \frac{f(\xi_2) - f(\xi_1)}{i\epsilon_m + \xi_1 - \xi_2}$$

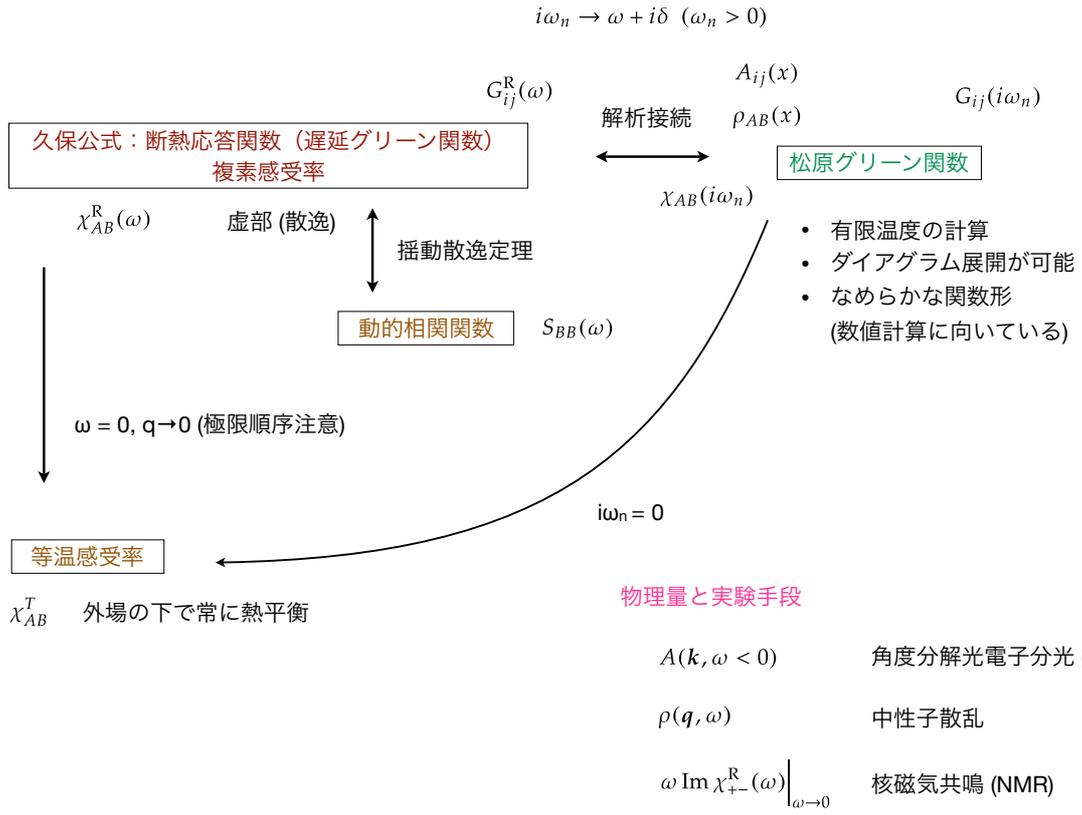
cf. Lindhard関数

例4

$$T \sum_n G(i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} = \pm \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{\pm}(\omega) \rho(\omega) \quad \rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\omega)$$



各種関数の相関図



# 総和則

## 総和則

- ・ 多体問題の応答や散乱断面積の計算には、非自明な時間発展が問題となる
- ・ 同時刻の量は、比較的容易に計算可能
- ・ 同時刻の量 = 振動数の積分  $\longrightarrow$  和則
- ・ 近似計算や数値計算のチェックに有用

## 熱力学的和則 cf. (-1)次モーメント和則

スペクトル表示  $\chi_{AB}^R(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho_{AB}(\mathbf{q}, x)}{\omega + i\delta - x}$

### 等温感受率

$$\chi_{AB}^T = \frac{\partial \langle A \rangle_T}{\partial B_0} = \chi_{AB}(\mathbf{q} \rightarrow 0, 0) = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\pi} \frac{\rho_{AB}(\mathbf{q} \rightarrow 0, x)}{x}$$

$\omega=0$ では散逸がないことを用いた

$$\rho_{AB}(0) = 0$$

$A = B$  かつ保存量であるとき  $\longrightarrow$  スペクトルは $x=0$ に集中している

$$\rho_{BB}(x) = \frac{\beta x}{2} S_{BB}(x) = \pi \beta x \sum_m w_m B_{mm}^2 \delta(x)$$

揺動散逸定理

$$\chi_{BB}^T = \beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S_{BB}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega) \quad \text{揺動散逸定理の古典版}$$

## モーメント総和則

部分積分を繰り返すと

$$\chi_{AB}^R(\omega) = i \int_0^\infty dt g(t) e^{i(\omega+i\delta)t} = -\frac{1}{\omega} g(0) - \frac{1}{\omega^2} i g^{(1)}(0) - \frac{1}{\omega^3} i^2 g^{(2)}(0) - \dots = -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n g^{(n)}(0)}{\omega^{n+1}}$$

$$g(t) \equiv \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle$$

k次だけ取り出すために

$$f_k(\omega) \equiv \omega^k \chi_{AB}^R(\omega) + \omega^k \sum_{n=0}^{k-1} \frac{i^n g^{(n)}(0)}{\omega^{n+1}} = -\frac{i^k g^{(k)}(0)}{\omega} + O(\omega^{-2}) \quad (|\omega| \rightarrow \infty)$$

$$f_k(\omega) \text{は上半面で解析的} \implies \text{Re } f_k(\omega) = -\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } f_k(\omega')}{\omega - \omega'}$$

Kramers-Krönig関係式

$$-\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \text{Re } f_k(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \text{Im } f_k(\omega') = \text{Re} [i^k g^{(k)}(0)]$$

k次モーメント総和則

$$i^k g^{(k)}(0) = \left\langle \underbrace{[[[[A, H], H], \dots, H], B]}_{k \text{ 個}} \right\rangle \text{は実数と仮定} \implies \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega^k \text{Im } \chi_{AB}^R(\omega) = \left\langle \underbrace{[[[[A, H], H], \dots, H], B]}_{k \text{ 個}} \right\rangle$$

$$\text{Im } f_k(\omega) = \omega^k \text{Im } \chi_{AB}^R(\omega)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im } \chi_{AB}^R(\omega) = \langle [A, B] \rangle$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega \text{Im } \chi_{AB}^R(\omega) = \langle [[A, H], B] \rangle \quad \text{cf. 光学伝導度 f-sum rule (1次の和則)}$$

⋮

## 松原形式の総和則

2体温度グリーン関数 cf. 揺動散逸定理

$$\chi_{AB}(\tau = 0_+) = \langle AB \rangle = T \sum_n \chi_{AB}(i\omega_n)$$

1体温度グリーン関数

部分積分を繰り返すと

$$G_{ij}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{ij}(\tau) = \frac{G_{ij}(\tau = 0_-) - G_{ij}(\tau = 0_+)}{i\omega_n} - \frac{G_{ij}^{(1)}(\tau = 0_-) - G_{ij}^{(1)}(\tau = 0_+)}{(i\omega_n)^2} + \dots$$

スペクトル表示を展開すると

$$= \frac{1}{i\omega_n} \int_{-\infty}^{\infty} dx A_{ij}(x) - \dots$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx A_{ij}(x) = \sum_{mn} (w_m \pm w_n) \langle m | c_i | n \rangle \langle n | c_j^\dagger | m \rangle = \sum_m w_m \langle m | c_i c_j^\dagger \pm c_j^\dagger c_i | m \rangle = \delta_{ij}$$

$$G_{ij}(\tau = 0_-) - G_{ij}(\tau = 0_+) = \delta_{ij}$$

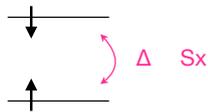
# 自由粒子系

## 自由スピン系 (等温帯磁率)

縮退系  $H = 0 \quad A = B = \mu_B S_z$

$$\chi_{L0,zz}^T = \mu_B^2 \int_0^\beta d\tau \langle \widetilde{S}_z(-i\tau) S_z \rangle = \int_0^\beta d\tau \langle S_z^2 \rangle = \frac{\mu_B^2 S(S+1)}{3T} \quad \text{Curie 則}$$

ギャップ系  $H = -\Delta S_z \quad A = B = \mu_B S_x \quad S = 1/2$



$$\begin{aligned} \chi_{L0,zz}^T &= \mu_B^2 \int_0^\beta d\tau \langle \widetilde{S}_x(-i\tau) S_x \rangle = -\mu_B^2 \sum_{mn}^{E_m \neq E_n} \frac{(w_m - w_n) S_{mn}^x S_{nm}^x}{E_m - E_n} + \mu_B^2 \beta \sum_{mn}^{E_m = E_n} w_n S_{mn}^x S_{nm}^x = -\frac{\mu_B^2}{4} \sum_m^\pm \frac{(w_m - w_{-m})}{E_m - E_{-m}} \\ &= \frac{\mu_B^2}{2\Delta} \tanh\left(\frac{\beta\Delta}{2}\right) \sim \frac{\mu_B^2}{2\Delta} \quad (T \ll \Delta) \quad \sim \frac{\mu_B^2}{4T} \quad (T \gg \Delta) \end{aligned}$$

van Vleck 帯磁率

自由粒子系

$$K \equiv H - \mu N = \sum_k (\epsilon_k - \mu) c_k^\dagger c_k \equiv \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k$$

Baker-Hausdorff 公式

$$e^B A e^{-B} = A + [B, A] + \frac{1}{2!} [B, [B, A]] + \frac{1}{3!} [B, [B, [B, A]]] + \dots$$

$$[K, c_k] = -\xi_k c_k \quad [K, c_k^\dagger] = \xi_k c_k^\dagger$$

$$e^{\tau K} c_k e^{-\tau K} = c_k + \tau [K, c_k] + \frac{\tau^2}{2!} [[K, [K, c_k]]] + \dots = c_k - \tau \xi_k c_k + \frac{(-\tau)^2}{2!} \xi_k^2 c_k + \dots = e^{-\tau \xi_k} c_k$$

$$e^{\tau K} c_k^\dagger e^{-\tau K} = e^{\tau \xi_k} c_k^\dagger$$

分布関数

$$\begin{aligned} \langle c_k^\dagger c_j \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta K} c_k^\dagger c_j) = \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta K} c_k^\dagger e^{\beta K} e^{-\beta K} c_j) = \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta \xi_k} c_k^\dagger e^{-\beta K} c_j) = e^{-\beta \xi_k} \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta K} [\delta_{kj} \mp c_k^\dagger c_j]) \\ &= e^{-\beta \xi_k} (\delta_{kj} \mp \langle c_k^\dagger c_j \rangle) \quad (\text{fermion/boson}) \end{aligned}$$

$$\implies \langle c_k^\dagger c_j \rangle = \frac{1}{e^{\beta \xi_k} \pm 1} \delta_{kj} \equiv f_{\pm}(\xi_k) \delta_{kj}$$

Fermi-Dirac 分布関数

$$f(x) = \frac{1}{e^{\beta x} + 1}$$

Bose-Einstein 分布関数

$$n(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1}$$

同様にして

$$\begin{aligned} \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta K} c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4) = \frac{e^{-\beta \xi_1}}{Z} \text{Tr} (c_1^\dagger e^{-\beta K} c_2^\dagger c_3 c_4) = e^{-\beta \xi_1} (\langle c_2^\dagger c_3 \rangle \delta_{14} \mp \langle c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_4 \rangle) \\ &= e^{-\beta \xi_1} (\langle c_2^\dagger c_3 \rangle \delta_{14} \mp \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \delta_{13} + \langle c_2^\dagger c_1^\dagger c_3 c_4 \rangle) = e^{-\beta \xi_1} (\langle c_2^\dagger c_3 \rangle \delta_{14} \mp \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \delta_{13} \mp \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle) \end{aligned}$$

$$\implies \langle c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 c_4 \rangle = \frac{1}{e^{\beta \xi_1} \pm 1} (\langle c_2^\dagger c_3 \rangle \delta_{14} \mp \langle c_2^\dagger c_4 \rangle \delta_{13}) = \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2^\dagger c_3 \rangle \mp \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \langle c_2^\dagger c_4 \rangle$$

Bloch-de Dominicis (Wick) の定理 可能なペアに分解でき、演算子の交換に対応した符号を付ける

断熱感受率

任意の1体密度演算子

$$A = \sum_{12} a_{12} c_1^\dagger c_2 \quad B = \sum_{12} b_{12} c_1^\dagger c_2$$

$$\chi_{AB}^R(\omega) = i \int_0^\infty dt \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle e^{i(\omega+i\delta)t}$$

$$\tilde{A}(t) = \sum_{12} a_{12} (e^{iKt} c_1^\dagger e^{-iKt}) (e^{iKt} c_2 e^{-iKt}) = \sum_{12} a_{12} c_1^\dagger c_2 e^{i(\xi_1 - \xi_2)t}$$

$$= - \sum_{12,34} \frac{a_{12} b_{34}}{\omega + i\delta + \xi_1 - \xi_2} \langle [c_1^\dagger c_2, c_3^\dagger c_4] \rangle$$

$$\begin{aligned} \langle [c_1^\dagger c_2, c_3^\dagger c_4] \rangle &= \langle c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_4 \rangle - \langle c_3^\dagger c_4 c_1^\dagger c_2 \rangle = \langle c_1^\dagger c_2 \rangle \langle c_3^\dagger c_4 \rangle + \langle c_1^\dagger c_4 \rangle \langle c_2 c_3^\dagger \rangle - \langle c_3^\dagger c_4 \rangle \langle c_1^\dagger c_2 \rangle - \langle c_4 c_1^\dagger \rangle \langle c_3^\dagger c_2 \rangle \\ &= \delta_{14} \delta_{23} (1 \mp \langle c_2^\dagger c_2 \rangle) \langle c_1^\dagger c_1 \rangle - \delta_{14} \delta_{23} (1 \mp \langle c_1^\dagger c_1 \rangle) \langle c_2^\dagger c_2 \rangle = \delta_{14} \delta_{23} (f_{\pm}(\xi_1) - f_{\pm}(\xi_2)) \end{aligned}$$

$$\implies \chi_{0,AB}^R(\omega) = - \sum_{12} \frac{a_{12} b_{21} (f_{\pm}(\xi_1) - f_{\pm}(\xi_2))}{\omega + i\delta + \xi_1 - \xi_2}$$

例：スピン帯磁率

$$A = (g\mu_B) S_q^z$$



$$1 \rightarrow k', \alpha$$

$$B = (g\mu_B) S_{-q}^z$$

$$2 \rightarrow k, \beta$$

$$a_{12} = b_{21} = (g\mu_B) \frac{\sigma_{\alpha\beta}^z}{2} \delta_{k', k-q}$$

$$\chi_{0,zz}^R(\mathbf{q}, \omega) = - \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_k \frac{f(\xi_{k-q}) - f(\xi_k)}{\omega + i\delta + \xi_{k-q} - \xi_k}$$

等温帯磁率 (Pauli 帯磁率)

$$\equiv \frac{(g\mu_B)^2}{2} \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$$

$$\chi_{0,zz}^R(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0) = \frac{(g\mu_B)^2}{2} \sum_k \left( -\frac{\partial f}{\partial \xi} \right) \sim \frac{(g\mu_B)^2}{2} \rho_F$$

断熱帯磁率

$$\chi_{0,zz}^R(\mathbf{q} = 0, \omega \rightarrow 0) = 0$$

## Lindhard関数 (自由電子)

静電ポテンシャル  $\phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow$  電荷分布  $\rho(\mathbf{r}, t)$

自由電子

$$\chi_{0c}^R(\mathbf{q}, \omega) = -2 \sum_k \frac{f(\xi_{k-q}) - f(\xi_k)}{\omega + i\delta + \xi_{k-q} - \xi_k} = 2\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)$$

電荷感受率

Lindhard関数

T=0 (3次元)  $\xi_k = \frac{k^2}{2m}$   $x \equiv \frac{q}{2k_F}$   $y \equiv \frac{\omega + i\delta}{4\epsilon_F}$   $\rho_F = \frac{mk_F}{2\pi^2}$

$$\sum_k \frac{f(\xi_k)}{\omega + i\delta + \xi_{k-q} - \xi_k} = \frac{\rho_F}{4x} \int_0^\infty dk \int_{-1}^1 dt \frac{k^2}{y_+ - kt} = \frac{\rho_F}{4x} I(y_+)$$

$$I(x) \equiv x - \frac{1}{2}(1-x^2) \ln \left| \frac{x-1}{x+1} \right| - \frac{i\pi}{2}(1-x^2)\theta(1-x^2) \quad y_\pm \equiv \frac{y}{x} \pm x$$

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\rho_F}{4x} (I(y_+) - I(y_-)) \sim \begin{cases} \rho_F \left( 1 - \frac{x^2}{3} - \frac{y^2}{x^2} + \frac{i\pi y}{2x} \right) & \left( \frac{y}{x} \rightarrow 0, x \rightarrow 0 \right) \\ -\rho_F \frac{x^2}{3y^2} \left( 1 + \frac{3x^2}{5y^2} \right) & \left( \frac{x}{y} \rightarrow 0, y \rightarrow 0 \right) \end{cases}$$

T=0 (2次元)  $\rho_F = \frac{m}{2\pi}$

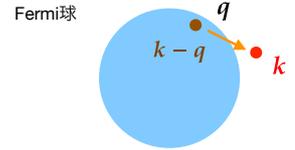
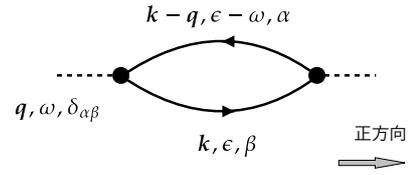
$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) = \rho_F \left[ 1 - \frac{1}{2x} \left( \sqrt{y_+^2 - 1} - \sqrt{y_-^2 + 1} \sqrt{y_- - 1} \right) \right]$$

T=0 (1次元)  $\rho_F = \frac{m}{\pi k_F}$

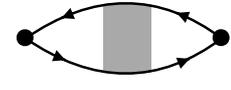
$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\rho_F}{4x} \ln \left[ \frac{(y_+ + 1)(y_- - 1)}{(y_+ - 1)(y_- + 1)} \right]$$

$$A = \rho_q \quad 1 \rightarrow k', \alpha \quad 2 \rightarrow k, \beta$$

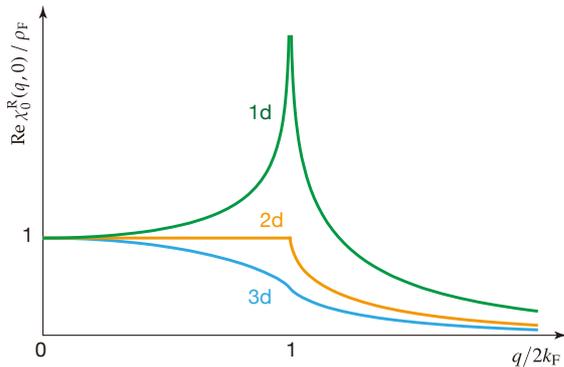
$$B = \rho_{-q} \quad a_{12} = b_{21} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{k', k-q}$$



相互作用あり



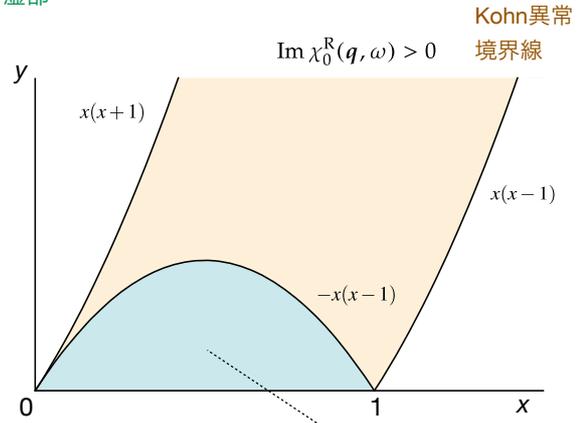
実部



2k<sub>F</sub> 異常

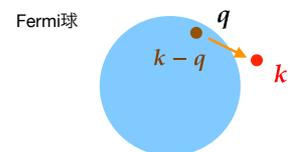
Fermi面が存在することから現れる異常

虚部



個別励起

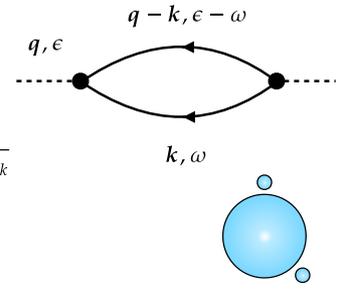
電子・ホールのパリア励起が可能な領域



1次元は $q=2k_F$ に発散的異常があり、低エネルギー励起が存在しない

粒子-粒子感受率

$$\begin{aligned} \psi_0(q) &\equiv \int_k G_0(k)G_0(q-k) = T \sum_n \sum_k \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} \frac{1}{i\epsilon_m - i\omega_n - \xi_{q-k}} \\ &= T \sum_n \sum_k \left[ \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} + \frac{1}{i\epsilon_m - i\omega_n - \xi_{q-k}} \right] \frac{1}{i\epsilon_m - \xi_k - \xi_{q-k}} \\ &= \sum_k \frac{f(\xi_k) + f(\xi_{q-k}) - 1}{i\epsilon_m - \xi_k - \xi_{q-k}} \end{aligned}$$



$$\psi_0^R(q, \omega) = \sum_k \frac{f(\xi_k) + f(\xi_{q-k}) - 1}{\omega + i\delta - \xi_k - \xi_{q-k}} \quad (\mathbf{q}=0, \omega=0) \text{で最大}$$

$$\begin{aligned} \psi_0^R(0, 0) &= \sum_k \frac{\tanh(\beta\xi_k/2)}{2\xi_k} \sim 2\rho_F \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{2\xi} \\ &\sim \rho_F \ln\left(\frac{2\omega_c e^\gamma}{\pi T}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{\xi} &= \int_0^{x_c} dx \frac{\tanh x}{x} \\ &\sim \ln x_c - \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \quad (x_c \gg 1) \\ &= \ln x_c - \ln \frac{\pi}{4e^\gamma} = \ln\left(\frac{2\omega_c e^\gamma}{\pi T}\right) \\ \gamma &= 0.5772 \quad \text{Euler定数} \end{aligned}$$

低温で対数発散 ... 超伝導不安定性

ネスティング条件が成り立つ時  $\xi_{k-Q} = -\xi_{-k}$

$$\chi_0^R(Q, \omega) = \sum_k \frac{f(\xi_k) - f(\xi_{k-Q})}{\omega + i\delta - \xi_k + \xi_{k-Q}} = \sum_k \frac{f(\xi_k) + f(\xi_{-k}) - 1}{\omega + i\delta - \xi_k - \xi_{-k}} = \psi_0(0, \omega)$$

⇒  $\chi_0^R(Q, 0)$  も低温で対数発散 (e.g. 擬1次元の電荷・スピン密度波の不安定性)

誘電率

運動エネルギー + Coulomb相互作用 + 外場

$$H_0 + H_C + H_{\text{ex}} \quad H_{\text{ex}} = -e\rho_{-q}\phi_0 e^{i[q\cdot r - (\omega+i\delta)t]}$$

一様電荷分布からのずれによって誘起される静電ポテンシャル  $v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$

$$\phi_{\text{ind}}(q, \omega) = \frac{v(q)}{-e} \langle \rho_q \rangle(\omega)$$

$$\phi(q, \omega) = \phi_0 + \phi_{\text{ind}}(q, \omega)$$

(A) D-法

$$\text{久保公式} \quad -e \langle \rho_q \rangle(\omega) = -e^2 \chi_c^R(q, \omega) \phi_0 \implies \phi_{\text{ind}}(q, \omega) = -v(q) \chi_c^R(q, \omega) \phi_0$$

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \equiv \frac{\phi(q, \omega)}{\phi_0} = 1 - v(q) \chi_c^R(q, \omega) \quad \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right] = -v(q) \text{Im} \chi_c^R(q, \omega)$$

(B) E-法 (乱雑位相近似 RPA)

$$\begin{aligned} H_C \sim v(q) \langle \rho_q \rangle(\omega) \rho_{-q} e^{i[q\cdot r - (\omega+i\delta)t]} &\implies H \sim H_0 \\ H'_{\text{ex}} \sim -e\rho_{-q} \left( \phi_0 + \frac{v(q)}{-e} \langle \rho_q \rangle(\omega) \right) e^{i[q\cdot r - (\omega+i\delta)t]} & \\ \text{久保公式} \quad -e \langle \rho_q \rangle(\omega) = -e^2 \chi_{0c}^R(q, \omega) \phi(q, \omega) & \implies -e\rho_{-q} \phi(q, \omega) e^{i[q\cdot r - (\omega+i\delta)t]} \\ & \implies \phi_{\text{ind}}(q, \omega) = -v(q) \chi_{0c}^R(q, \omega) \phi(q, \omega) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = \left( 1 + v(q) \chi_{0c}^R(q, \omega) \right)^{-1} \quad \text{(A) = (B) : RPA}$$

$$\chi_c^R(q, \omega) \sim \frac{\chi_{0c}^R(q, \omega)}{1 + v(q) \chi_{0c}^R(q, \omega)}$$

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = 1 - v(\mathbf{q})\chi_c^R(\mathbf{q}, \omega) \sim \left(1 + v(\mathbf{q})\chi_{0c}^R(\mathbf{q}, \omega)\right)^{-1}$$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 0 \implies \omega(\mathbf{q}) \quad \text{外場なしで電場が誘起される (系に固有の素励起: 集団励起)}$$

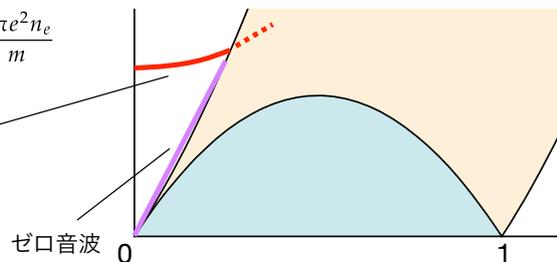
### プラズマ振動 縦波

$$\chi_{0c}^R(\mathbf{q}, \omega) \sim -\frac{2\rho_F}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2\right] \quad (v_F q \ll \omega, \omega \ll \epsilon_F) \quad \frac{n_e}{m} = 2\rho_F \frac{v_F^2}{3}$$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2\right]$$

$$\implies \omega(\mathbf{q}) = \omega_p \left[1 + \frac{3}{10} \left(\frac{v_F q}{\omega_p}\right)^2\right]$$

$$\omega_p^2 \equiv \frac{4\pi e^2 n_e}{m}$$



- ・ Coulomb力が長距離力  $v(\mathbf{q})q^2 = \text{const.}$  であることを反映してプラズマ振動が出現
  - ・ 電子・ホール励起領域に入るとLindhard関数が虚部を持つため  $\omega(\mathbf{q})$  も虚部を持ち減衰するモードになる [Landau 減衰]
  - ・ 短距離力  $v(\mathbf{q}) = v_0$  なら  $\omega(\mathbf{q}) \propto v_F q$  のゼロ音波となる cf.  $^3\text{He}$  のFermi液体  
衝突なしで伝わる集団励起
  - ・ 引力の場合、集団励起は存在しない cf. 超伝導
- $$e^{-i\omega(\mathbf{q})t} = e^{-|\text{Im}\omega(\mathbf{q})|t} e^{-i\text{Re}\omega(\mathbf{q})t} \quad \text{Im}\omega(\mathbf{q}) < 0$$

### 静電遮蔽

$$\text{点電荷} \quad \phi_0 = \frac{4\pi Ze}{q^2} \quad \epsilon(\mathbf{q}, 0) \sim 1 + 2v(\mathbf{q})\rho_F \equiv 1 + (q\lambda)^{-2} \quad \lambda^{-2} = 8\pi e^2 \rho_F \quad T \ll \epsilon_F$$

$$\implies \phi(\mathbf{q}, 0) = \frac{\phi_0}{\epsilon(\mathbf{q}, 0)} = \frac{4\pi Ze}{q^2 + \lambda^{-2}} \quad \phi(r) = \frac{Ze}{r} e^{-r/\lambda} \quad \text{湯川型ポテンシャル}$$

$$\lambda^{-1} \quad \text{Thomas-Fermi 遮蔽定数}$$

$$T \gg \epsilon_F \text{ のとき} \quad \chi_0^R(\mathbf{q}, 0) \sim \frac{n_e}{2T} \implies \lambda^{-2} = \frac{4\pi e^2 n_e}{T} \quad \lambda^{-1} \quad \text{Debye-Hückel 遮蔽定数}$$

# 電気伝導率

## 電流演算子

ゲージ不変運動量  $m\mathbf{v} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} = -i\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}$

$$A \propto e^{-i\omega t}$$

$$E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} \implies E = \frac{i\omega}{c} A$$

$$\mathbf{j}_q = -e \sum_{k\alpha} \left( \mathbf{v}_k + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) c_{k-q\alpha}^\dagger c_{k\alpha} = -e \sum_{k\alpha} \mathbf{v}_k c_{k-q\alpha}^\dagger c_{k\alpha} - \frac{n_e e^2}{m c} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \mathbf{j}_{pq} - \frac{n_e e^2}{m c} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega)$$

電流は  $\mathbf{q}=0$

常磁性電流 反磁性電流

相互作用項  $H_{\text{ex}} = -\frac{1}{c} \mathbf{j}_{-q} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) \sim -\frac{1}{c} \mathbf{j}_{p,-q} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega)$

## 久保公式

$$\Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{j_p, j_p}^R(\mathbf{q}, \omega)$$

$$\langle j^i \rangle(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{c} \sum_j \left[ \Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) - \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij} \right] A_j(\mathbf{q}, \omega) = \sum_j K_{ij}(\mathbf{q}, \omega) A_j(\mathbf{q}, \omega) = \sum_j \sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega) E_j(\mathbf{q}, \omega)$$

常磁性 反磁性

Meissner核  $K_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{c} \left[ \Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) - \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij} \right]$

電気伝導度  $\sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{i\omega} \left[ \Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) - \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij} \right]$

電荷の保存則と1次モーメントの総和則より  $\Pi_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0) = \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij}$

$$\implies \sigma_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0) = K_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0) = 0$$

Aに比例する電流は存在しない (cf. 超伝導)  
cf. 等温応答に対応

## 自由電子系 (多バンド)

$$(1,2) \rightarrow (mk'\alpha, nk\beta) \quad a_{12} = -e \langle m | v_k^i | n \rangle \delta_{k',k-q} \delta_{\alpha\beta} \quad b_{21} = -e \langle n | v_k^j | m \rangle \delta_{k',k-q} \delta_{\alpha\beta}$$

m, n : バンド指標

$$\Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = -2e^2 \sum_{k,mn} \frac{\langle m | v_k^i | n \rangle \langle n | v_k^j | m \rangle [f(\xi_{mk-q}) - f(\xi_{nk})]}{\omega + i\delta + \xi_{mk-q} - \xi_{nk}}$$

恒等式

$$\frac{1}{\omega} \Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega} \Pi_{ij}(\mathbf{q}, 0) + 2e^2 \sum_{k,mn} \frac{\langle m | v_k^i | n \rangle \langle n | v_k^j | m \rangle [f(\xi_{mk-q}) - f(\xi_{nk})]}{\omega + i\delta + \xi_{mk-q} - \xi_{nk}} \frac{1}{\xi_{mk-q} - \xi_{nk}}$$



$$\frac{1}{\omega} \Pi_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow 0, 0) = \frac{n_e e^2}{m\omega} \delta_{ij}$$

$$\frac{1}{\omega} \frac{1}{\omega + \Delta} = \frac{1}{\Delta} \left[ \frac{1}{\omega} - \frac{1}{\omega + \Delta} \right] = \frac{1}{\omega} \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Delta(\omega + \Delta)}$$

$$\sigma_{ij}(0, \omega) = -2ie^2 \sum_{k,mn} \frac{\langle m | v_k^i | n \rangle \langle n | v_k^j | m \rangle [f(\xi_{mk}) - f(\xi_{nk})]}{(\omega + i\delta + \xi_{mk} - \xi_{nk})(\xi_{mk} - \xi_{nk})}$$

光学電気伝導度 (断熱)

通常の光の波長は原子スケールに比べて十分長波長

バンド間遷移が無い場合

$$\Pi_{ij}(\mathbf{q} = 0, \omega \rightarrow 0) = 0 \implies \sigma_{ij}(\mathbf{q} = 0, \omega \rightarrow 0) = \frac{1}{i(\omega + i\delta)} \left[ 0 - \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij} \right] = \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij} \left( \pi\delta(\omega) + \frac{i}{\omega} \right)$$

散乱を考慮 輸送緩和時間

散乱機構がないため発散

$$\delta \rightarrow 1/\tau_{tr}$$



$$\sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0) = \frac{n_e e^2 \tau_{tr}}{m(1 - i\omega\tau_{tr})}$$

Drude公式

## 超伝導体

・ 超伝導相では、秩序の発生によって  $\Pi_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0) \neq \frac{n_e e^2}{m} \delta_{ij}$

・ 特にT=0では、ギャップが存在するために等温と断熱が一致し  $\Pi_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0) = \Pi_{ij}(\mathbf{q} = 0, \omega \rightarrow 0) = 0$



反磁性電流の寄与のみ

$$K_{ii}(0,0) = -\frac{n_e e^2}{mc} \equiv -K_0$$



$$\mathbf{j} = -K_0 \mathbf{A}$$

cf. Londonの仮定

Meissner 効果

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad \mathbf{j} = -K_0 \mathbf{A}$$

Maxwell方程式



$$\nabla^2 A_{\perp} = \frac{4\pi K_0}{c} A_{\perp} \equiv \lambda^{-2} A_{\perp} \quad \text{London方程式}$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi n_e e^2}}$$

磁場侵入長



$$A_{\perp} \propto e^{-r/\lambda}$$

# 摂動論

## 一般論

有限温度の場合のみ扱い、温度グリーン関数だけが登場する  
T=0に特化した摂動論の方法もあるが、実用上は有限温度の結果においてT=0極限を取ればよい

相互作用表示における「時間」発展

cf. 線形応答  $K_0 = H - \mu N$   $H_{\text{int}} = H_{\text{ex}}$  と取り、 $H_{\text{int}}$ の1次まで残した

相互作用表示

$$K = H - \mu N = K_0 + H_{\text{int}}$$

$$A(\tau) \equiv e^{\tau K_0} A e^{-\tau K_0}$$

$$\bar{A}(\tau) = e^{\tau K_0} A^\dagger e^{-\tau K_0} \neq [A(\tau)]^\dagger$$

慣習的に  $A^\dagger(\tau) \equiv \bar{A}(\tau)$

$$e^{-\tau K} \equiv e^{-\tau K_0} U(\tau) \implies \frac{\partial U}{\partial \tau} = -H_{\text{int}}(\tau) U(\tau)$$

$$e^{\tau K} = U^{-1}(\tau) e^{\tau K_0}$$

$$\tilde{A}(\tau) \equiv e^{\tau K} A e^{-\tau K}$$

線形応答の章と表記が異なるので注意

$$\begin{aligned} U(\tau) &= 1 - \int_0^\tau d\tau_1 H_{\text{int}}(\tau_1) U(\tau_1) = 1 - \int_0^\tau d\tau_1 H_{\text{int}}(\tau_1) + \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) U(\tau_2) \\ &= 1 - \int_0^\tau d\tau_1 H_{\text{int}}(\tau_1) + \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) - \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) H_{\text{int}}(\tau_3) + \dots \end{aligned}$$

$$\text{2次の項} \quad \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) = \int_0^\tau d\tau_2 \int_{\tau_2}^\tau d\tau_1 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) = \int_0^\tau d\tau_1 \int_{\tau_2}^\tau d\tau_2 H_{\text{int}}(\tau_2) H_{\text{int}}(\tau_1)$$

$$(0 < \tau_2 < \tau_1 < \tau)$$

$$= \int_0^\tau d\tau_1 \int_{\tau_2}^\tau d\tau_2 T_\tau (H_{\text{int}}(\tau_2) H_{\text{int}}(\tau_1))$$

$$\implies \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) = T_\tau \left( \frac{1}{2!} \int \int_0^\tau d\tau_1 d\tau_2 H_{\text{int}}(\tau_1) H_{\text{int}}(\tau_2) \right)$$

$T_\tau$  演算子を左から「時刻」 $\tau$ の大きい順に並べる (Bose型)

「時間」発展演算子

$$U(\tau) = T_\tau \left[ \exp \left( - \int_0^\tau d\tau' H_{\text{int}}(\tau') \right) \right]$$

$$U(\tau_1, \tau_2) \equiv T_\tau \left[ \exp \left( - \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau' H_{\text{int}}(\tau') \right) \right]$$

$$U(\tau) = U(\tau, 0) \quad U(\tau_1, \tau_2) = U(\tau_1, \tau) U(\tau, \tau_2)$$

大分配関数

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta K}) = Z_0 \frac{\text{Tr} e^{-\beta K_0} U(\beta)}{Z_0} \equiv Z_0 \langle U(\beta) \rangle_0$$

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \frac{\text{Tr} e^{-\beta K_0} (\dots)}{Z_0}$$

$$Z_0 = \text{Tr} e^{-\beta K_0}$$

グリーン関数

$$\Omega = -T \ln Z = \Omega_0 - T \ln \langle U(\beta) \rangle_0$$

$$\begin{aligned} G_{ij}(\tau) &= -\langle T_\tau \tilde{c}_i(\tau) c_j^\dagger \rangle = -\frac{1}{Z} \text{Tr} (T_\tau e^{-\beta K} e^{\tau K} c_i e^{-\tau K} c_j^\dagger) = -\frac{1}{Z} \text{Tr} (T_\tau e^{-\beta K_0} U(\beta) U^{-1}(\tau) e^{\tau K_0} c_i e^{-\tau K_0} U(\tau) c_j^\dagger) \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} (T_\tau e^{-\beta K_0} U(\beta) c_i(\tau) c_j^\dagger) = \frac{-\langle T_\tau U(\beta) c_i(\tau) c_j^\dagger \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \end{aligned}$$

一般にn体グリーン関数に対しても

$$\langle T_\tau \tilde{c}_1(\tau_1) \tilde{c}_2(\tau_2) \dots \tilde{c}_n(\tau_n) \tilde{c}_1^\dagger(\tau'_1) \tilde{c}_2^\dagger(\tau'_2) \dots \tilde{c}_n^\dagger(\tau'_n) \rangle_0 = \frac{\langle T_\tau U(\beta) c_1(\tau_1) c_2(\tau_2) \dots c_n(\tau_n) c_1^\dagger(\tau'_1) c_2^\dagger(\tau'_2) \dots c_n^\dagger(\tau'_n) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}$$

$H_{\text{int}}$  は  $U(\beta)$  を通じてのみ現れる

$$G_{ij}(\tau) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{-1}{\langle U(\beta) \rangle_0} \frac{(-1)^k}{k!} \int \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_k \langle T_\tau H_{\text{int}}(\tau_1) \dots H_{\text{int}}(\tau_k) (c_i(\tau) c_j^\dagger) \rangle_0$$

1体グリーン関数のk次の項

各摂動項は自由な1体グリーン関数の積の和で表される (Wickの定理)

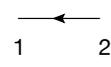
$$G_{0ij}(\tau - \tau') = -\langle T_\tau c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') \rangle_0$$

$$\langle T_\tau H_{\text{int}}(\tau_1) \dots H_{\text{int}}(\tau_k) (c_i(\tau) c_j^\dagger) \rangle_0 \rightarrow \sum_{\mathcal{P}} \text{sgn}(\mathcal{P}) \mathcal{P} \left[ \langle T_\tau c(1) c^\dagger(2) \rangle_0 \langle T_\tau c(3) c^\dagger(4) \rangle_0 \dots \langle T_\tau c(k+1) c^\dagger(k+2) \rangle_0 \right]$$

Wickの定理 cf. Bloch-de Dominicisの定理  $1 \equiv (i, \tau_1) \quad x \equiv (i, \tau), \quad x' \equiv (j, \tau')$

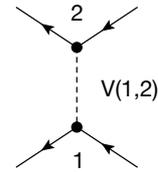
$$\langle T_\tau c(1)c(2)c^\dagger(3)c^\dagger(4) \rangle_0 = \langle T_\tau c(1)c^\dagger(4) \rangle_0 \langle T_\tau c(2)c^\dagger(3) \rangle_0 \mp \langle T_\tau c(1)c^\dagger(3) \rangle_0 \langle T_\tau c(2)c^\dagger(4) \rangle_0 \quad (\text{fermion/boson})$$

$$+ \langle T_\tau c(1)c(2) \rangle_0 \langle T_\tau c^\dagger(3)c^\dagger(4) \rangle_0 \quad \text{通常ゼロ (cf. 超伝導では有限)}$$

$$G_0(1,2) \equiv -\langle T_\tau c(1)c^\dagger(2) \rangle_0 \quad \text{並進対称性のある(一様な)系では、運動量に関して対角的}$$


2体相互作用 (以下、fermionの場合のみ)

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{1,2} V(1,2) c^\dagger(1) c^\dagger(2) c(2) c(1) \quad V(1,2) \equiv V_{ij} \delta(\tau_1 - \tau_2) = V(2,1)$$

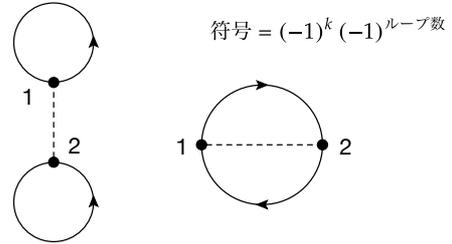


$\langle U(\beta) \rangle_0$  の展開

$$\langle U^{(0)}(\beta) \rangle_0 = 1$$

$$\langle U^{(1)}(\beta) \rangle_0 = -\frac{1}{2} \sum_{1,2} [G_0(1,1)G_0(2,2) - G_0(1,2)G_0(2,1)]$$

$$\vdots \quad (\tau = 0-)$$



1体グリーン関数の展開 [分母のU(β)を除く]

$$\langle U(\beta) \rangle_0 G^{(0)}(x, x') = G_0(x, x') \equiv G_{\text{連結}}^{(0)}(x, x')$$

$$\langle U(\beta) \rangle_0 G^{(1)}(x, x') =$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{1,2} V(1,2) [G_0(x,1)G_0(1,2)G_0(2,x') + (1 \leftrightarrow 2)$$

$$- G_0(x,1)G_0(1,x')G_0(2,2) - (1 \leftrightarrow 2)$$

$$+ G_0(x,x')G_0(1,1)G_0(2,2) - G_0(x,x')G_0(1,2)G_0(2,1)]$$

$$= -\sum_{1,2} V(1,2) [G_0(x,1)G_0(1,2)G_0(2,x') - G_0(x,1)G_0(1,x')G_0(2,2)]$$

$$+ \langle U^{(1)}(\beta) \rangle_0 G_0(x, x')$$

$$\equiv G_{\text{連結}}^{(1)}(x, x') + \langle U^{(1)}(\beta) \rangle_0 G_0(x, x')$$

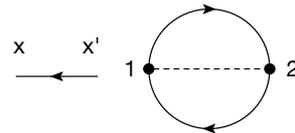
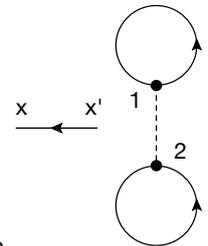
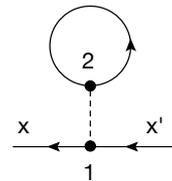
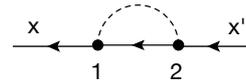
⋮

$$\langle U(\beta) \rangle_0 [G^{(0)} + G^{(1)} + \dots] = \langle 1 + U^{(1)}(\beta) + U^{(2)}(\beta) + \dots \rangle_0 [G^{(0)} + G^{(1)} + \dots]_{\text{連結}} = \langle U(\beta) \rangle_0 G_{\text{連結}}$$

$$\Rightarrow G(x, x') = G_{\text{連結}}(x, x') \equiv -\langle T_\tau U(\beta) c(x) c^\dagger(x') \rangle_{0, \text{連結}}$$

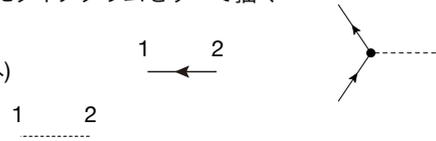
- ・ トポロジ的に同等で、外線と連結したダイアグラムだけを考慮すれば良い
- ・  $1/n!$  の因子は、積分座標の入れ換えの数  $n!$  とキャンセル
- ・ 熱力学ポテンシャル  $\Omega$  (大分配関数  $Z$ ) の場合、外線がないため  $1/n!$  因子は単純にキャンセルしない!

符号 =  $(-1)^k (-1)^{\text{ループ数}}$



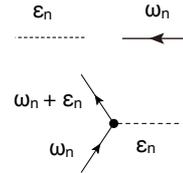
Feynmanダイアグラム規則 部分和を取ることができる(1/n!因子なし) = パーツに分解し、組合わせることができる!

- (1) 2k 個の結節点と2本の外線をもつトポロジ的に同等でない連結したダイアグラムをすべて描く
- 結節点では、2本の実線と1本の点線が交わっている
- (2) すべての実線にグリーン関数  $G_0(1,2)$  を対応させる (矢印は2から1へ)
- (3) 点線には  $-V(1,2)$  を対応させる
- (4) すべての結節点について和 (積分) を取る
- (5) 得られた結果に  $(-1)^F$  をかける。F は閉じた fermion ループの数
- (6) グリーン関数において、同時刻が現れた場合は、 $\tau=-0$  と解釈する



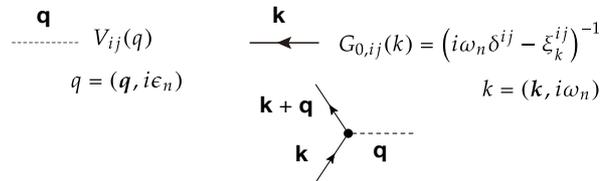
松原振動数表示

- (i) 外線に、外部振動数を割り当てる
- (ii) 実線にfermionの松原振動数を、点線にbosonの松原振動数を対応させる
- (iii) 結節点で、松原振動数の保存を表すKroneckerの $\delta$ をかける
- (iv) 松原振動数の和  $T \sum_n$  をとる



並進対称性がある場合

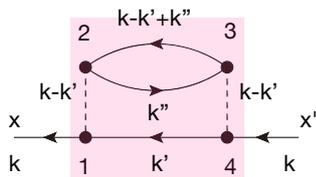
- (a) 外線に、外部運動量を割り当てる
- (b) 実線、点線に運動量を対応させる
- (c) 結節点で、運動量の保存を表すKroneckerの $\delta$ をかける
- (d) 運動量の積分  $\int dp/(2\pi)^3$  [格子系なら $\Sigma_p$ ] をとる



2次項の例

$$T \sum_n \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \equiv \int_k$$

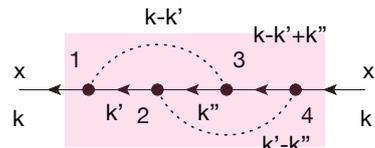
既約



$$-\sum_{1 \sim 4} G_0(x, 1)G_0(1, 4)G_0(4, x')G_0(2, 3)G_0(3, 2)V(1, 2)V(3, 4)$$

$$-G_0^2(k) \int \int_{k', k''} G_0(k')G_0(k - k' + k'')G_0(k'')V^2(k - k')$$

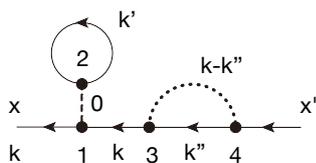
既約



$$\sum_{1 \sim 4} G_0(x, 1)G_0(1, 2)G_0(2, 3)G_0(3, 4)G_0(4, x')V(1, 3)V(2, 4)$$

$$G_0^2(k) \int \int_{k', k''} G_0(k')G_0(k - k' + k'')G_0(k'')V(k - k')V(k' - k'')$$

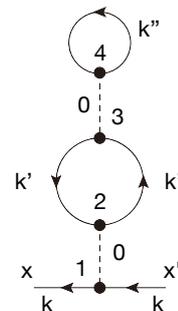
可約



$$-\sum_{1 \sim 4} G_0(x, 1)G_0(1, 3)G_0(3, 4)G_0(4, x')G_0(2, 2)V(1, 2)V(3, 4)$$

$$-G_0^3(k)V(0) \int_{k'} G_0(k') \int_{k''} G_0(k'')V(k - k'')$$

可約



$$\sum_{1 \sim 4} G_0(x, 1)G_0(1, x')G_0(2, 3)G_0(3, 2)G_0(4, 4)V(1, 2)V(3, 4)$$

$$G_0^2(k)V^2(0) \int_{k'} G_0^2(k') \int_{k''} G_0(k'')$$

Dyson方程式 積分 (行列) 方程式

$\square$  = 既約自己エネルギー  $\equiv \Sigma(1, 4)$

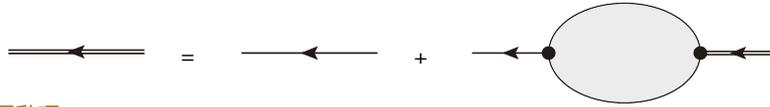
$$G(x, x') = G_0(x, x') + \sum G_0(x, 1)\Sigma(1, 2)G_0(2, x') + \sum G_0(x, 1)\Sigma(1, 2)G_0(2, 3)\Sigma(3, x') + \dots$$

$$= G_0(x, x') + \sum_{1,2} G_0(x, 1)\Sigma(1, 2)G(2, x')$$

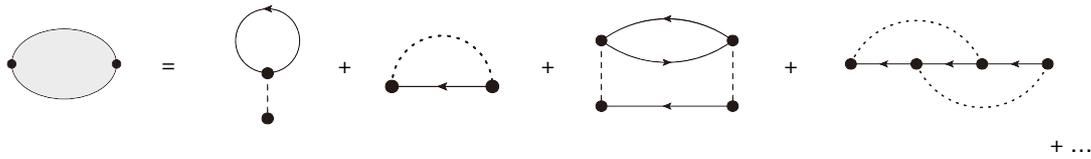
$$G(k) = G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G(k) \implies G^{-1}(x, x') = G_0^{-1}(x, x') - \Sigma(x, x')$$

$$G^{-1}(k) = G_0^{-1}(k) - \Sigma(k)$$

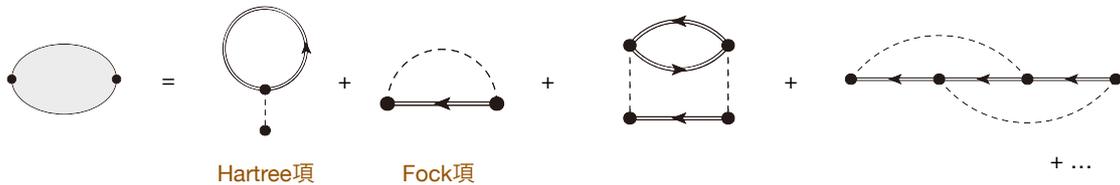
自己エネルギー  
= エネルギー補正



シンプルな摂動項



より高次の摂動項 骨格(スケルトン)ダイアグラム [G<sub>0</sub>ではなくGで表されたダイアグラム]



Phonon (実スカラー-boson場) のFeynman ダイアグラム規則

$$D(1, 2) \equiv -\langle T_\tau \tilde{\varphi}(1)\tilde{\varphi}(2) \rangle$$

$$H_{ph} = \sum_q \omega_q \left( b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{2M\omega_q}} (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} b_q + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} b_q^\dagger) = \tilde{\varphi}(\mathbf{r})$$

$$H_{int} = g \sum_1 \varphi(1) c^\dagger(1) c(1)$$

(1) 2k 個の結節点と2本の外線をもつポロジリーに同等でない連結したダイアグラムをすべて描く

結節点では、2本の実線と1本の波線が交わっている

(2) すべての実線にグリーン関数 G<sub>0</sub>(1,2) を対応させる (矢印は2から1へ)

(3) 波線には -g<sup>2</sup>D<sub>0</sub>(1,2) [D<sub>0</sub>(1,2)はphononグリーン関数] を対応させる

(4) すべての結節点について和 (積分) を取る

(5) 得られた結果に (-1)<sup>F</sup> をかける。F は閉じた fermion ループの数

(6) グリーン関数において、同時刻が現れた場合は、τ=0と解釈する

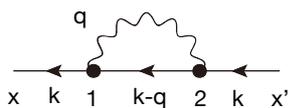
$$D_0(1, 2) = -\langle T_\tau \varphi(1)\varphi(2) \rangle_0$$

$$D_0(q) = -\frac{\omega_q}{\epsilon_n^2 + \omega_q^2}$$

AGDとは因子 ω<sub>q</sub> だけ異なる

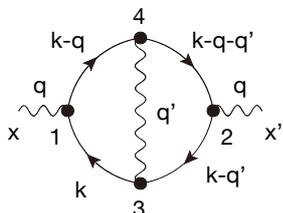
$$V(1, 2) = g^2 D_0(1, 2)$$

例



$$-g^2 \sum_{1,2} G_0(x, 1)G_0(1, 2)G_0(2, x')D_0(1, 2)$$

$$-g^2 G_0^2(k) \int_q G_0(k-q)D_0(q)$$

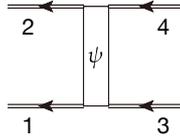


$$-g^4 \sum_{1-4} D_0(x, 1)G_0(1, 3)G_0(3, 2)G_0(2, 4)G_0(4, 1)D_0(2, x')D_0(3, 4)$$

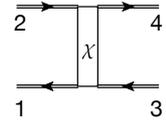
$$-g^4 D_0^2(q) \iint_{q', k} G_0(k)G_0(k-q)G_0(k-q-q')G_0(k-q')D_0(q')$$

2体グリーン関数

$$\psi(1, 2; 3, 4) \equiv \langle T_\tau \bar{c}(1)\bar{c}(2)\bar{c}^\dagger(4)\bar{c}^\dagger(3) \rangle$$

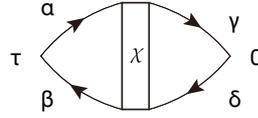


$$\chi(1, 2; 3, 4) \equiv \langle T_\tau \bar{c}(1)\bar{c}^\dagger(2)\bar{c}(4)\bar{c}^\dagger(3) \rangle$$



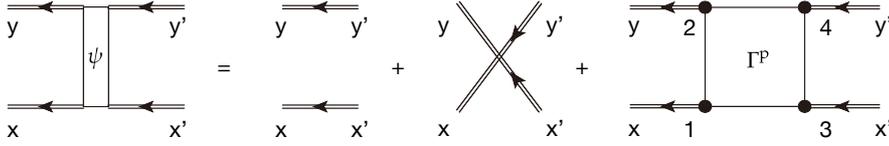
感受率

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(\tau) &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha\beta} b_{\gamma\delta} \psi(\beta\tau, \delta 0; \gamma 0, \alpha\tau) \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha\beta} b_{\gamma\delta} \chi(\beta\tau, \alpha\tau; \gamma 0, \delta 0) \end{aligned}$$



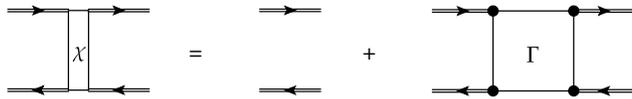
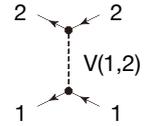
2体グリーン関数の積分方程式

$$\psi(x, y, ; x', y') = G(x, x')G(y, y') - G(x, y')G(y, x') - \sum_{1 \sim 4} G(x, 1)G(y, 2)G(3, x')G(4, y')\Gamma^P(1, 2; 3, 4)$$



$\Gamma^P(1, 2; 3, 4)$  完全バーテックス (有効相互作用)

上の式を通じて $\Gamma^P$ を定義した



$$\chi(x, y, ; x', y') = -G(x, x')G(y, y) - \sum_{1 \sim 4} G(x, 1)G(2, y)G(3, x')G(y', 4)\Gamma(1, 2; 3, 4)$$

完全バーテックスを既約バーテックスを用いて分解

3通りの異なる分解の仕方がある

PH表示 PP表示

$$\Gamma(1, 2; 3, 4) \equiv \Gamma^P(1, 4; 2, 3)$$

(a) PP (Cooper) チャンネル



超伝導不安定性

$$\begin{aligned} \Gamma^P(1, 2; 3, 4) &= \Gamma^{0P}(1, 2; 3, 4) + \sum_{5 \sim 8} \Gamma^{0P}(1, 2; 5, 6)G(5, 7)G(6, 8)\Gamma^P(7, 8, 3, 4) \\ \Gamma^P(1, 2; 3, 4) &= \Gamma^{0P}(1, 2; 3, 4) - \frac{1}{2} \sum_{5 \sim 8} \Gamma^{0P}(1, 2; 5, 6)G(5, 7)G(6, 8)\Gamma^P(7, 8, 3, 4) \end{aligned}$$

(b) PH (Landau) チャンネル



ゼロ音波、密度波

$$\begin{aligned} \Gamma(1, 2; 3, 4) &= \Gamma^0(1, 2; 3, 4) + \sum_{5 \sim 8} \Gamma^0(1, 2; 5, 6)G(5, 7)G(6, 8)\Gamma(7, 8, 3, 4) \\ \Gamma(1, 2; 3, 4) &= \Gamma^0(1, 2; 3, 4) + \sum_{5 \sim 8} \Gamma^0(1, 2; 5, 6)G(5, 7)G(6, 8)\Gamma(7, 8, 3, 4) \end{aligned}$$

(c) PH (Peierls) チャンネル



Kohn異常、Peierls転移

$$\begin{aligned} \Gamma(1, 2; 3, 4) &= \bar{\Gamma}^0(1, 2; 3, 4) + \sum_{5 \sim 8} \bar{\Gamma}^0(1, 5; 3, 7)G(5, 6)G(6, 7)\Gamma(6, 2, 8, 4) \end{aligned}$$

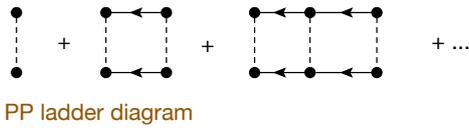
Bethe-Salpeter方程式

(2体版Dyson方程式)

$$\Gamma(1, 2; 3, 4) = \bar{\Gamma}^0(1, 2; 3, 4) + \sum_{5 \sim 8} \bar{\Gamma}^0(1, 5; 3, 7)G(5, 6)G(6, 7)\Gamma(6, 2, 8, 4)$$

例：既約バーテックス = bare相互作用  $\Gamma^0(1, 2; 3, 4) = \Gamma^{0P}(1, 4; 2, 3) = -\bar{\Gamma}^0(1, 3; 2, 4) = V(1, 3)\delta(1, 2)\delta(3, 4)$

(a) PP (Cooper) チャンネル



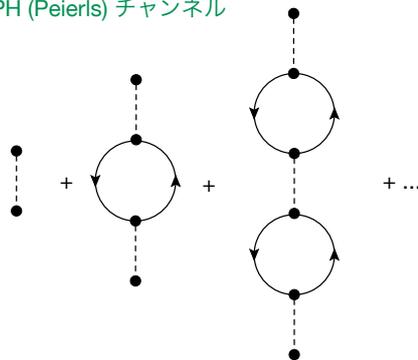
PP ladder diagram

(b) PH (Landau) チャンネル



PH bubble diagram

(c) PH (Peierls) チャンネル



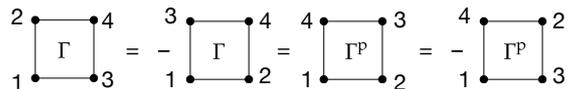
- ・ (a), (b), (c) で生成されるダイアグラムが異なる (近似の欠陥)
- ・ 厳密な既約バーテックスを用いれば、同じ完全バーテックスが得られる (事実上は不可能)
- ・ 適切なチャンネルで見れば、発達する揺らぎを捉えられる

Crossing対称性 fermionの反交換関係より導かれる対称性

$$\sum_{1 \sim 4} \Gamma(1, 2; 3, 4) c^\dagger(1) c(2) c^\dagger(4) c(3) = - \sum_{1 \sim 4} \Gamma(1, 3; 2, 4) c^\dagger(1) c(2) c^\dagger(4) c(3) = \sum_{1 \sim 4} \Gamma^P(1, 4; 2, 3) c^\dagger(1) c^\dagger(2) c(4) c(3)$$



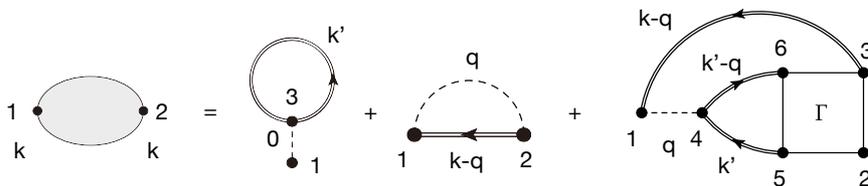
$$\Gamma(1, 2; 3, 4) = -\Gamma(1, 3; 2, 4) = \Gamma^P(1, 4; 2, 3)$$



既約バーテックスの選び方によっては満たされない (e.g. RPA, FLEX, ...)

Parquet近似：Crossing対称性を満たすような既約バーテックスを選ぶための近似法

自己エネルギーを完全バーテックスを用いて表す

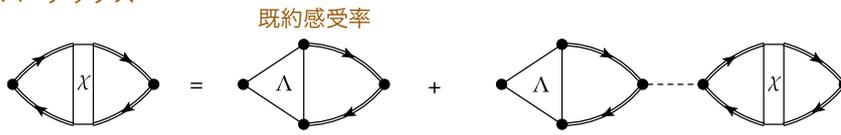


$$\Sigma(1, 2) = \sum_3 V(1, 3) G(3, 3) \delta(1 - 2) - V(1, 2) G(1, 2) - \sum_{3 \sim 6} V(1, 4) G(1, 3) G(4, 5) G(6, 4) \Gamma(5, 6; 2, 3)$$

$$\Sigma(k) = V(0) \int_{k'} G(k') - \int_q V(q) G(k - q) - \iint_{k', q} V(q) G(k - q) G(k') G(k' - q) \Gamma(k', k' - q; k, k - q)$$



3点バーテックス

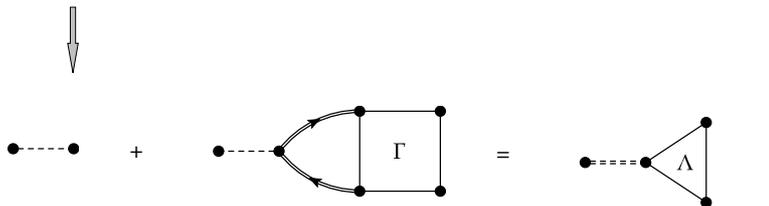


$$\chi(1;2) = - \sum_{3,4} \Lambda(1;3,4)G(3,2)G(2,4) + \sum_{3\sim 6} \Lambda(1;3,4)G(3,5)G(5,4)V(5,6)\chi(6,2)$$

有効相互作用



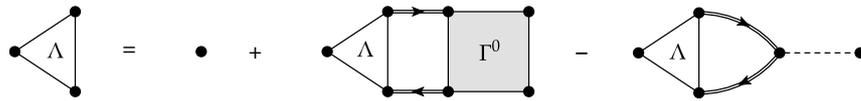
$$W(1;2) = V(1,2) + \sum_{3\sim 6} V(1,3)\Lambda(3;4,5)G(4,6)G(6,5)W(6,2)$$



バーテックス補正  
= 相互作用補正 (波動関数の歪み)

$$V(1,2)\delta(2-3) + \sum_{4\sim 6} V(1,4)G(4,5)G(6,4)\Gamma(5,6;2,3) = \sum_4 W(1,4)\Lambda(4;2,3)$$

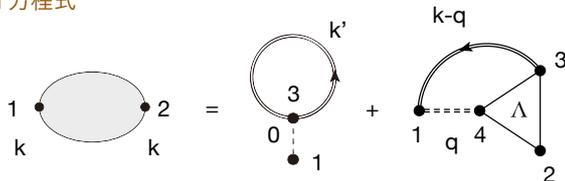
3点バーテックスと4点既約バーテックスの関係



可約部分を取り除くため

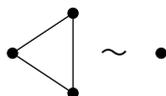
$$\Lambda(1;2,3) = \delta(1-2)\delta(1-3) + \sum_{4\sim 7} \Lambda(1;4,5)G(4,6)G(7,5) \left( \Gamma^0(6,7;2,3) - \delta(6-7)\delta(2-3)V(6,2) \right)$$

Hedin 方程式



$$\Sigma(1,2) = \sum_3 V(1,3)G(3,3)\delta(1-2) - \sum_{3,4} W(1,4)G(1,3)\Lambda(4;2,3)$$

GW近似



one-shot GW



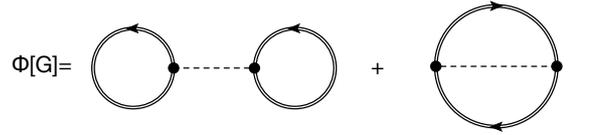
cf. RPA近似

自由エネルギー汎関数

Luttinger-Ward汎関数 閉じた連結スケルトン・ダイアグラム

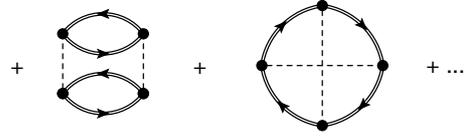
自由エネルギー汎関数 (Gの汎関数)

$$\Omega[G] = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln(-G^{-1}) + \frac{1}{\beta} \text{Tr}(1 - G_0^{-1}G) + \Phi[G]$$



自由エネルギー汎関数 (Gの汎関数)

$$\Sigma[G] = \beta \frac{\delta \Phi}{\delta G} \quad \text{G 線を1本取り除く操作に対応}$$



自由エネルギー汎関数の鞍点 = 熱平衡の自由エネルギー

$$\frac{\delta \Omega}{\delta G} = \frac{1}{\beta} (G^{-1} - G_0^{-1} + \Sigma) = 0$$

- ・ Dyson方程式を満たす
- ・ 熱力学的に安定であることが保証される
- ・ 系統的な近似の構成法

例: Hartree-Fock近似 (最初の2項 [1次項] を残す)

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma_{\text{HF}}$$



Σ の汎関数へ Legendre 変換  $\Phi[G] = \Theta[\Sigma] + \frac{1}{\beta} \text{Tr}(G\Sigma)$

$$\Omega[\Sigma] = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln(\Sigma - G_0^{-1}) + \Theta[\Sigma]$$

cf. 自己エネルギー汎関数法, Eliashberg方程式

$$G[\Sigma] = -\beta \frac{\delta \Theta}{\delta \Sigma} \quad \frac{\delta \Omega}{\delta \Sigma} = -\frac{1}{\beta} ((\Sigma - G_0^{-1})^{-1} + G) = 0$$

M. Potthoff, Europhys. J. B **32** 429 (2003); B **36** 335 (2003).  
 HK et al., Phys. Rev. B **85** 174528 (2012).

# グリーン関数の例

## 多成分に対するグリーン関数法

$(\mathbf{k}, i\omega_n)$  はよい量子数であり、グリーン関数は対角的、その他の量子数  $m, n$  に関しては行列として扱えば良い

### 2軌道 Hubbard模型 ( $U=0$ , スピンレス)

$$H = \sum_{kmn} \xi_k^{mn} c_m^\dagger c_n = \sum_k \begin{pmatrix} c_{1k}^\dagger & c_{2k}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k^{11} & \xi_k^{12} \\ \xi_k^{12*} & \xi_k^{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1k} \\ c_{2k} \end{pmatrix}$$

$$G(\mathbf{k}, z) = \begin{pmatrix} z - \xi_k^{11} & -\xi_k^{12} \\ -\xi_k^{12*} & z - \xi_k^{22} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{D} \begin{pmatrix} z - \xi_k^{22} & \xi_k^{12} \\ \xi_k^{12*} & z - \xi_k^{11} \end{pmatrix} \quad D = \begin{vmatrix} z - \xi_k^{11} & -\xi_k^{12} \\ -\xi_k^{12*} & z - \xi_k^{22} \end{vmatrix} = (z - \xi_k^+)(z - \xi_k^-)$$

$$\xi_k^\pm = \frac{1}{2} \left[ \xi_k^{11} + \xi_k^{22} \pm \sqrt{(\xi_k^{11} - \xi_k^{22})^2 + 4|\xi_k^{12}|^2} \right] \quad \text{結合(反結合)軌道の分散関係}$$

$$G^{11}(\mathbf{k}, z) = \frac{a_{k+}^{11}}{z - \xi_k^+} - \frac{a_{k-}^{11}}{z - \xi_k^-} \quad G^{22}(\mathbf{k}, z) = \frac{a_{k+}^{22}}{z - \xi_k^+} - \frac{a_{k-}^{22}}{z - \xi_k^-}$$

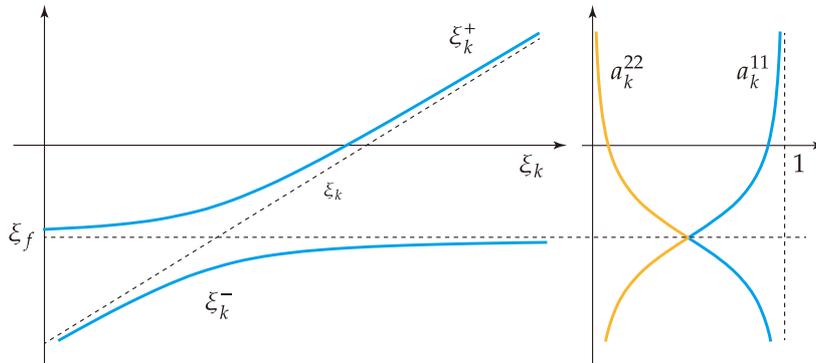
$$a_{k+}^{11} = a_{k-}^{22} = \frac{1}{2} \frac{\xi_k^{11} - \xi_k^{22} + \sqrt{(\xi_k^{11} - \xi_k^{22})^2 + 4|\xi_k^{12}|^2}}{\sqrt{(\xi_k^{11} - \xi_k^{22})^2 + 4|\xi_k^{12}|^2}}$$

軌道(1 or 2)における結合(反結合)軌道の重み

$$a_{k-}^{11} = a_{k+}^{22} = \frac{1}{2} \frac{\xi_k^{22} - \xi_k^{11} + \sqrt{(\xi_k^{11} - \xi_k^{22})^2 + 4|\xi_k^{12}|^2}}{\sqrt{(\xi_k^{11} - \xi_k^{22})^2 + 4|\xi_k^{12}|^2}}$$

e.g. 周期Anderson模型  $\xi_k^{11} = \xi_k, \xi_k^{22} = \xi_f, \xi_k^{12} = V_k \quad U = 0$

$$\xi_k^\pm = \frac{1}{2} \left[ \xi_k + \xi_f \pm \sqrt{(\xi_k - \xi_f)^2 + 4|V_k|^2} \right]$$



不純物Anderson模型 (U=0, スピンレス)

$$H = \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k + \xi_f f^\dagger f + \sum_k (v_k f^\dagger c_k + \text{h.c.})$$

$$v_k \equiv V_k / \sqrt{N}$$

$$G(z) = \begin{pmatrix} z - \xi_f & -v_{k_1} & -v_{k_2} & \cdots \\ -v_{k_1}^* & z - \xi_{k_1} & 0 & \cdots \\ -v_{k_2}^* & 0 & z - \xi_{k_2} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}^{-1}$$

f 成分 (1,1) のみ取り出すと

$$G_f(z) = \frac{1}{z - \xi_f - \Delta(z)} \quad \Delta(z) \equiv \sum_k \frac{|v_k|^2}{z - \xi_k}$$

$$G_f(z) = \frac{1}{z - \xi_f} + \frac{v_k}{z - \xi_f} \frac{v_k^*}{z - \xi_k} \frac{1}{z - \xi_k}$$

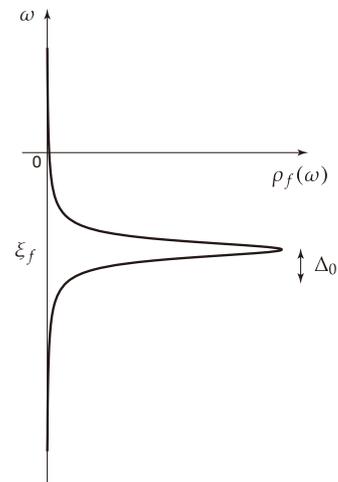
一定状態密度の場合

$$\Delta(z) \sim \rho_F \langle |v_k|^2 \rangle \int d\xi \frac{1}{z - \xi} = -\rho_F \langle |v_k|^2 \rangle \log(z - \xi) \Big|_{-\infty}^{\infty}$$

$$= -\pi \rho_F \langle |v_k|^2 \rangle i \quad (\text{Im } z > 0)$$

$$\equiv -\Delta_0 i$$

$$\rho_f(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_f(\omega + i\delta) = \frac{\Delta_0 / \pi}{(\omega - \xi_f)^2 + \Delta_0^2}$$



多体効果と準粒子 (Hubbard模型)

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

$$z_k = \left( 1 - \frac{\partial \Sigma^{R'}}{\partial \omega} \Big|_{k_F, 0} \right)^{-1} \quad \text{繰り込み因子}$$

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \xi_k - \Sigma^R(k, \omega)}$$

繰り込まれた分散関係

$\omega=0$  のまわりで自己エネルギーを展開

$$\tilde{\xi}_k = z_k \left[ \xi_k + \Sigma^{R'} + \frac{\partial \Sigma^{R'}}{\partial k_F} \cdot (k - k_F) \right]$$

$$\Sigma^R(k, \omega) \sim \Sigma^{R'}(k_F, 0) + \frac{\partial \Sigma^{R'}}{\partial \omega} \Big|_{k_F, 0} \omega + \frac{\partial \Sigma^{R'}}{\partial k} \Big|_{k_F, 0} (k - k_F) + i\Sigma^{R''}(k_F, \omega)$$

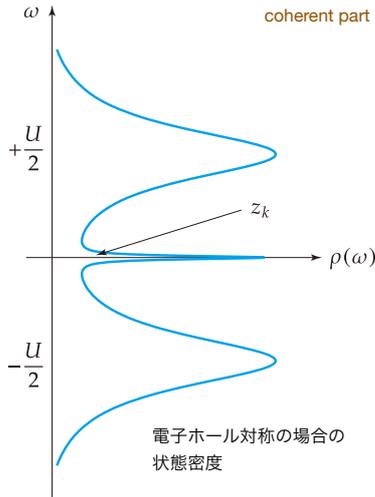
$$\gamma_k = -z_k \Sigma^{R''} \quad \text{準粒子寿命の逆数}$$

$$\Rightarrow G^R(k, \omega) = \frac{z_k}{\omega - \tilde{\xi}_k + i\gamma_k} + G_{inc}^R(k, \omega)$$

極付近の寄与  
coherent part

極から離れた寄与  
incoherent part

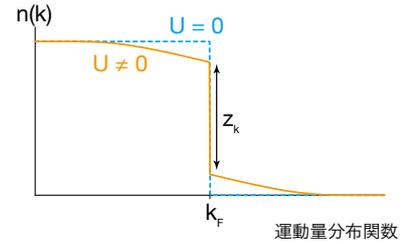
$$n(k) = \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle \quad z_{k_F} = n(k_F - 0) - n(k_F + 0)$$



$$A_{coh}(k, \omega) = \frac{z_k}{\pi} \frac{\gamma_k}{(x - \tilde{\xi}_k)^2 + \gamma_k^2}$$

$$\int d\omega A_{coh}(k, \omega) = z_k$$

$$\int d\omega A_{inc}(k, \omega) = 1 - z_k$$



$$-\frac{\partial \Sigma^{R'}}{\partial \omega} \gg 1 \Rightarrow z_k \ll 1 \quad \text{大きな有効質量}$$

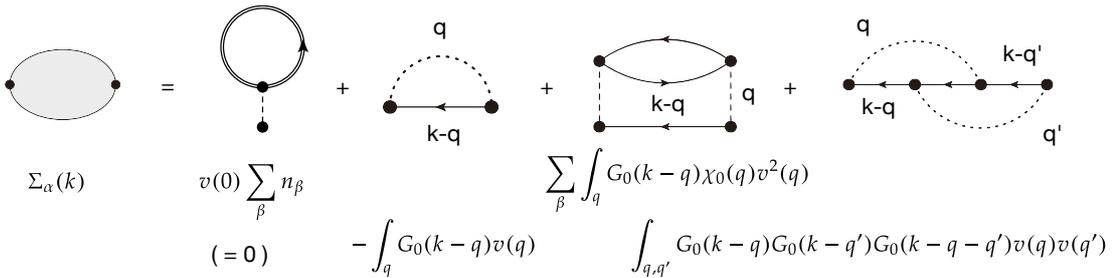
$$\frac{\partial \Sigma^{R'}}{\partial \omega} > 1 \Rightarrow -\Sigma^{R''} \text{ は } \omega \sim 0 \text{ にピーク構造} \\ \text{擬ギャップ構造}$$

二次摂動

電子ガス

$$G_\alpha(k) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k + \mu - \Sigma_\alpha(k)}$$

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{kk'\alpha\beta} \sum_{q \neq 0} v(q) c_{k\alpha}^\dagger c_{k'-q\beta}^\dagger c_{k'\beta} c_{k-q\alpha}$$



$$\text{Loop} \rightarrow n_\alpha = \int_{k'} G(k') \quad \text{スピンあたりの粒子数密度 (最低次)}$$

$$\text{Ladder} \rightarrow \chi_0(q) = - \int_k G_0(k)G_0(k+q) \quad \text{Lindhard関数}$$

Hubbard模型

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



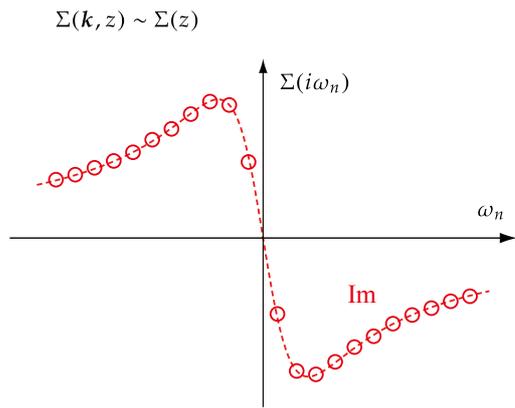
$$\Sigma_\alpha(k) = U n_{-\alpha} + U^2 \int_q G_0(k-q)\chi_0(q)$$

Hartree項は化学ポテンシャルに繰り込むことができる

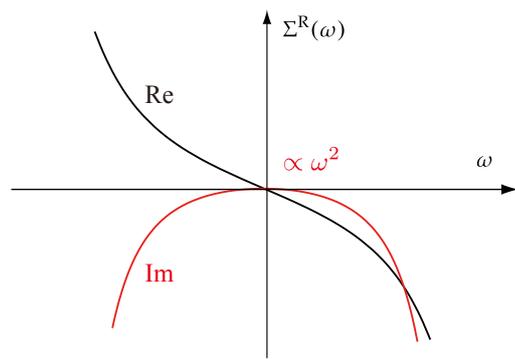
$$\mu' \equiv \mu - \Sigma_{Hartree}$$

多軌道の場合は単純に繰り込むことはできない

局所自己エネルギー (電子ホール対称の場合)



Fermi液体の典型的な振る舞い



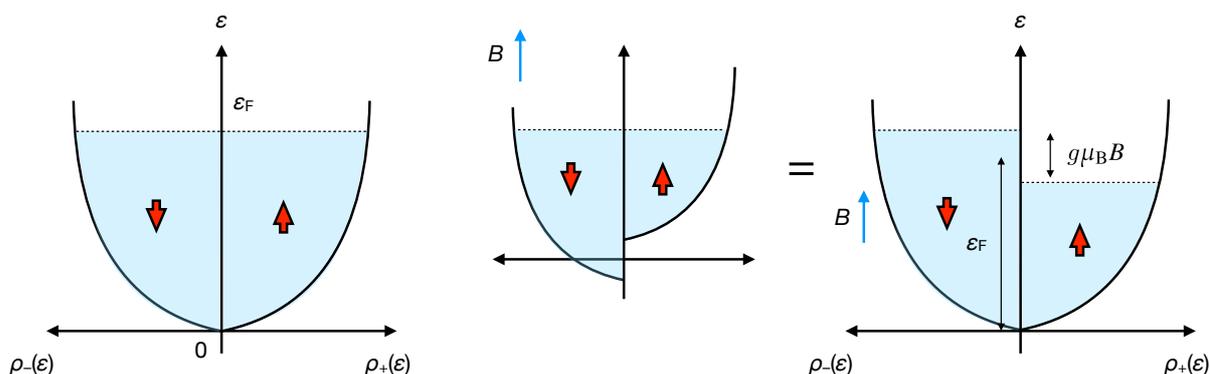
# 磁性

## 自由電子の磁性 (スピン常磁性)

Pauli常磁性  $H = \sum_{k\alpha} \left( \xi_k \delta_{\alpha\beta} + \frac{g}{2} \mu_B \sigma_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{B} \right) c_{k\alpha}^\dagger c_{k\beta}$

スピンあたりのFermi準位での  
状態密度

$$\rho_F = \frac{3N}{4\epsilon_F} = \frac{Vm}{2\pi^2} \sqrt{2m\epsilon_F}$$



Fermi 縮退

$$N_{\text{eff}} \sim \frac{T}{\epsilon_F} N \quad \text{活性な自由度の数}$$

Fermi準位付近の  
少数の電子のみ寄与する

$$\frac{g\mu_B B}{\epsilon_F} \sim 10^{-5} \quad (B = 10 \text{ T})$$

電子比熱  $E \sim N_{\text{eff}} \times T = \frac{N}{\epsilon_F} T^2 \sim \rho_F T^2$

$$\Rightarrow C \sim \rho_F T \quad \text{温度に比例}$$

磁化率  $M \sim N_{\text{eff}} \times \frac{(g\mu_B/2)^2}{T} B = (g\mu_B/2)^2 \frac{N}{\epsilon_F} B \sim \mu_B^2 \rho_F B$

キュリー則

$$\Rightarrow \chi_{\text{Pauli}} \sim \mu_B^2 \rho_F \quad \text{Pauli帯磁率 (温度によらない)}$$

アルカリ金属

$$\gamma = \frac{2\pi^2 k_B^2}{3} \rho_F \sim 1 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}^2$$

$$\chi_{\text{Pauli}} = 2\mu_B^2 \rho_F \sim 10^{-4} \text{ cm}^3/\text{mol}$$

自由電子の反磁性 (軌道運動効果)

古典論

調和ポテンシャルと磁場 ( $\mathbf{B} \parallel z$ ) の下で

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -2\omega_L \dot{y} - \omega_0^2 x & x(t) &= R \cos(-\omega_2 t) + r_0 \cos(\omega_1 t) \\ \ddot{y} &= 2\omega_L \dot{x} - \omega_0^2 y & y(t) &= R \sin(-\omega_2 t) + r_0 \sin(\omega_1 t) \end{aligned}$$

$$mv_x(t) = -m\omega_1 r_0 \sin(\omega_1 t) - m\omega_2 R \sin(\omega_2 t)$$

$$mv_y(t) = m\omega_1 r_0 \cos(\omega_1 t) - m\omega_2 R \cos(\omega_2 t)$$

中心座標  $X = R \cos(-\omega_2 t) \quad Y = R \sin(-\omega_2 t)$

サイクロトロン運動量  $K_x = -m\omega_1 r_0 \sin(\omega_1 t)$   
 $K_y = m\omega_1 r_0 \cos(\omega_1 t)$

エネルギー

$$E = m\omega(r_0^2 \omega_1 + R^2 \omega_2) = \frac{\omega}{m\omega_1} (K_x^2 + K_y^2) + m\omega_2 (X^2 + Y^2)$$

角運動量

$$\ell_z = m\omega(r_0^2 - R^2) = \frac{\omega}{m\omega_1} (K_x^2 + K_y^2) - m\omega(X^2 + Y^2)$$

対称ゲージと正準運動量を用いて表すと

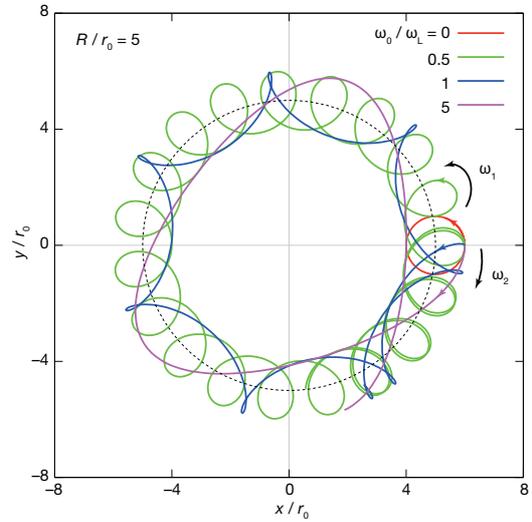
$$X = \frac{1}{2} \left( x - \frac{p_y}{m\omega} \right) \quad Y = \frac{1}{2} \left( y + \frac{p_x}{m\omega} \right) \quad K_x = \frac{\omega_1}{2\omega} (p_x - m\omega y) \quad K_y = \frac{\omega_1}{2\omega} (p_y + m\omega x)$$

$\omega_0$  調和振動子の固有振動数

$$\omega_L = \frac{eB}{2mc} \quad \text{Larmor反磁性}$$

$$\omega_1 = \omega + \omega_L$$

$$\omega_2 = \omega - \omega_L \quad \omega = \sqrt{\omega_L^2 + \omega_0^2}$$



初期座標 ( $X_0 + r_0, Y_0$ ) は任意

量子論

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x^2 + y^2) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) + \omega_L \ell_z$$

中心座標演算子  $X = \frac{1}{2} \left( x - \frac{p_y}{m\omega} \right) \quad Y = \frac{1}{2} \left( y + \frac{p_x}{m\omega} \right) \quad [X, Y] = \frac{i}{2m\omega}$   
 サイクロトロン運動量  $K_x = \frac{\omega_1}{2\omega} (p_x - m\omega y) \quad K_y = \frac{\omega_1}{2\omega} (p_y + m\omega x) \quad [K_x, K_y] = -\frac{im\omega_1^2}{2\omega}$

$$H = \frac{\omega}{m\omega_1} (K_x^2 + K_y^2) + m\omega_2 (X^2 + Y^2)$$

昇降演算子  $a = i \sqrt{\frac{\omega}{m\omega_1^2}} (K_x - iK_y) \quad b = i \sqrt{m\omega} (X + iY) \quad [a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$   
 $\ell_z = a^\dagger a - b^\dagger b$

$$H = \omega_1 \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + \omega_2 \left( b^\dagger b + \frac{1}{2} \right) \quad |n, m\rangle = \frac{C}{\sqrt{n!m!}} (a^\dagger)^n (b^\dagger)^m |0, 0\rangle$$

固有状態と固有エネルギー ( $n, m$  は非負の整数)  $E_{n,m} = \omega_1 \left( n + \frac{1}{2} \right) + \omega_2 \left( m + \frac{1}{2} \right) \quad \ell_z |n, m\rangle = (n - m) |n, m\rangle$

角運動量の固有状態にもなっている

Larmor反磁性 基底状態

$$\mu_{\text{dia}} = -\frac{\partial E_{0,0}}{\partial B} = -\frac{\omega_L^2}{E_{0,0} B} = -\frac{e^2 \langle r_\perp^2 \rangle}{4mc^2} B$$

$$\langle r_\perp^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{2}{m} \frac{\partial E_{0,0}}{\partial \omega_0^2} = \frac{1}{mE_{0,0}}$$



$B = 0$  2次元調和振動子  $H = \omega_0 (a^\dagger a + b^\dagger b + 1)$

$\omega_0 = 0$  調和ポテンシャルなし  $H = \omega_c \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$

サイクロトロン振動数  $\omega_c = 2\omega_L$  Landau準位

$m$  (中心座標)に関する縮退あり

波動関数  $\omega_0 \equiv 0$

$$z = \frac{1}{2l_B}(x - iy) \quad z^* = \frac{1}{2l_B}(x + iy) \quad \frac{\partial}{\partial z} = il_B(p_x + ip_y) \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = il_B(p_x - ip_y)$$

磁気長 (サイクロトロン半径)  $l_B = \sqrt{\frac{c}{eB}}$   
 $l_B \approx 81 \text{ \AA} \quad (B=10 \text{ T})$

$$\begin{pmatrix} a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z + \frac{\partial}{\partial z^*} \right) & a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z^* + \frac{\partial}{\partial z} \right) & b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} b e^{-|z|^2} = 0 \\ [b^\dagger, z] = 0 \\ -\frac{\partial}{\partial z^*} e^{-|z|^2} = z e^{-|z|^2} \end{pmatrix}$$

$$|n, m\rangle = \frac{C}{\sqrt{2^m n! m! l_B^m}} (a^\dagger)^n \left[ r^m e^{-im\theta} e^{-r^2/4l_B^2} \right]$$

最低Landau準位  $|0, m\rangle = \frac{C}{\sqrt{2^m m! l_B^m}} r^m e^{-im\theta} e^{-r^2/4l_B^2}$

$$r_{\max} \sim \sqrt{2m} l_B$$

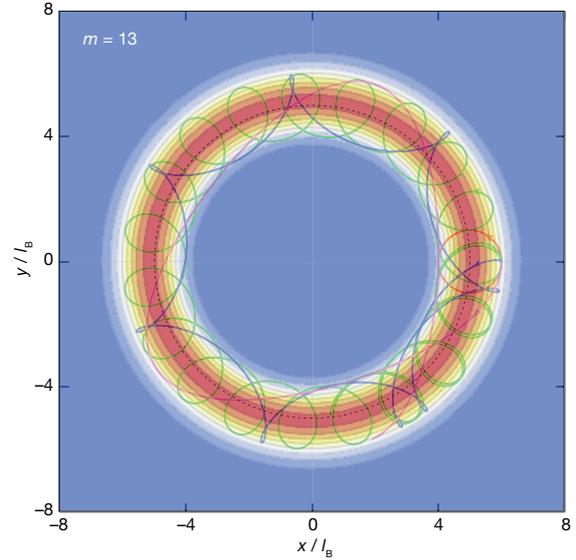
縮退度  $R \gg l_B$   $R$ : 系のサイズ (半径)

$$r_{\max} \leq R$$

$$n_L = m_{\max} = \frac{1}{2} \left( \frac{R}{l_B} \right)^2 = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad \text{磁束量子の本数}$$

$$\Phi = \pi R^2 B$$

磁束量子  $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} = 2.07 \times 10^{-7} \text{ G cm}^2$

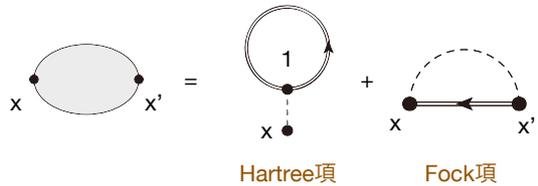


# Hartree-Fock近似

$$H = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}') v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\beta}(\mathbf{r}') \psi_{\alpha}(\mathbf{r})$$

Hartree-Fock 近似  $v(x - x') = v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau')$

- ・ 時間の遅れを伴わない
- ・ 非局所的



有効1体ハミルトニアン  $h_0 \quad \int d\mathbf{r}_1 h_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \phi_k(\mathbf{r}_1) = \xi_k \phi_k(\mathbf{r})$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \sum_k \frac{\phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}')}{i\omega_n - \xi_k} \quad G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau = 0_-) = T \sum_n G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) e^{i\omega_n 0_-} = \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) \phi_k^*(\mathbf{r}') f(\xi_k) \equiv \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

粒子数密度  $n(\mathbf{r}) \equiv 2\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$

HF近似における自己エネルギー

$$\Sigma_{\alpha}(x, x') = \delta(x - x') \sum_{\beta} \iint d\mathbf{r}_1 d\tau_1 v(x - x_1) G_{\beta}(x_1, x_1) - v(x - x') G_{\alpha}(x, x') \equiv \delta(\tau - \tau') \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int d\mathbf{r}_1 v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) n(\mathbf{r}_1) - v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

自己無撞着方程式  
(Hartree-Fock)

$$h(\mathbf{r}) \rightarrow h_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = h(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

$$\int d\mathbf{r}_1 h_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \phi_k(\mathbf{r}_1) = \xi_k \phi_k(\mathbf{r})$$

1体近似のうちで自由エネルギーが最低となる解が得られる

平均場近似

$$A = \langle A \rangle + (A - \langle A \rangle)$$

平均値      ゆらぎ     $\delta A$

$$AB = \{\langle A \rangle + (A - \langle A \rangle)\} \{\langle B \rangle + (B - \langle B \rangle)\}$$

$$\sim \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle (B - \langle B \rangle) - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (\delta A \delta B \sim 0)$$

$$\begin{aligned} \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\beta(\mathbf{r}')\psi_\alpha(\mathbf{r}) &\sim \left\{ \langle \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\beta(\mathbf{r}') \rangle - \langle \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r}') \rangle \langle \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\alpha(\mathbf{r}) \rangle + (\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{r}') \right\} \\ &\quad - \left\{ \langle \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\beta(\mathbf{r}') \rangle - \langle \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r}') \rangle \langle \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\alpha(\mathbf{r}) \rangle \right\} \\ \Downarrow \\ &= \left\{ \frac{1}{2} n(\mathbf{r}) \psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}') \psi_\beta(\mathbf{r}') - \delta_{\alpha\beta} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}') \psi_\alpha(\mathbf{r}) + (\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{r}') \right\} - \left[ \frac{1}{4} n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') - \delta_{\alpha\beta} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \right] \end{aligned}$$

非局所的な1体ハミルトニアン

$$H_{\text{HF}} = \sum_\alpha \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) h_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_\alpha(\mathbf{r}') + C \quad C = -\frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') - 2\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r})]$$

$$= \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + C \quad \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) c_{k\alpha} \quad = -\frac{1}{2} \sum_{1 \sim 4} V_{12;34} (4\delta_{13}\delta_{24} - 2\delta_{14}\delta_{23}) f(\xi_1) f(\xi_2)$$

自由エネルギー

$$\Omega_{\text{HF}} = -2T \sum_k \ln(1 + e^{-\beta \xi_k}) + C$$

$$V_{12;34} \equiv \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_1(\mathbf{r}) \phi_2(\mathbf{r}') \phi_3^*(\mathbf{r}) \phi_4^*(\mathbf{r}')$$

平均場ポテンシャル中を運動する粒子のエネルギー

$$\epsilon_k = \xi_k + \mu$$

イオン化エネルギー ( $T=0$ )

$$E_N - E_{N-1} (k \text{ を除く}) = \sum_{k\alpha} \xi_k \theta(-\xi_k) - \sum_{k\alpha}^{\neq k} \xi_k \theta(-\xi_k) + \mu + C - C' = \epsilon_k \quad (C \sim C')$$

Koopmansの定理

# 平均場近似

Hubbard模型の強磁性

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{U}{N} \sum_{kk'} \sum_{q \neq 0} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'-q\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{k-q\uparrow}$$

強磁性平均場

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{4} [(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})] \equiv \frac{1}{4} (n_i^2 - m_i^2) \quad \begin{aligned} n_i &= n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \\ m_i &= n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} \end{aligned}$$

磁性については引力！

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = -\frac{1}{4} [2m_i m - m^2 + (m_i - m)^2] + \frac{1}{4} n_i^2 \quad \begin{aligned} &\text{平均磁化} \\ m &= \langle m_i \rangle \end{aligned}$$

揺らぎの2乗を無視して

$$\sim -\frac{m}{2} m_i + \text{const.} = -\frac{m}{2} \sum_{k\sigma} \sigma c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \text{const.}$$

$$H_{MF} = \sum_{k\alpha} (\xi_k - \alpha B_{\text{eff}}) c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \quad B_{\text{eff}} = \frac{Um}{2}$$

$$G_\alpha(k, i\omega_n) = (i\omega_n - \xi_k + \alpha B_{\text{eff}})^{-1}$$

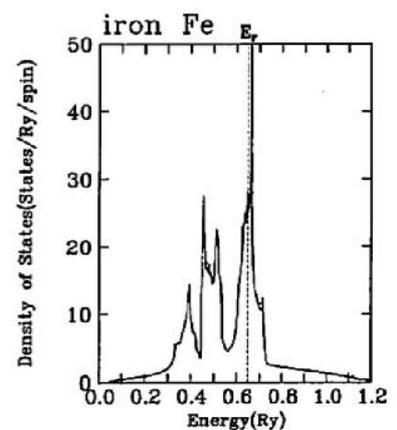
nに関する平均場は  
化学ポテンシャルに  
繰り込んだものとする

平均場方程式

$$m = \langle m_i \rangle = \frac{T}{N} \sum_n \sum_{k\alpha} \alpha \langle c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k T \sum_n e^{i\omega_n 0^+} (G_\uparrow(k, i\omega_n) - G_\downarrow(k, i\omega_n))$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k (f(\xi_k - B_{\text{eff}}) - f(\xi_k + B_{\text{eff}})) \quad \sim \int d\xi \rho(\xi) \left( -\frac{\partial f}{\partial \xi} \right) 2B_{\text{eff}} \sim \rho_F U m \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} &\text{Stoner条件} \\ &\rho_F U > 1 \end{aligned}$$

T=0

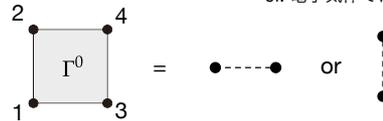


- ・Uがバンド幅程度より大きい
- ・Fermi準位での状態密度が大きい

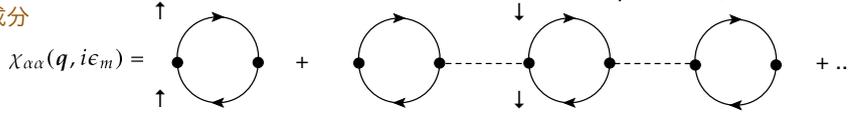
乱雑位相近似 (RPA: Random Phase Approximation)

cf. 電子気体では高密度の場合により近似

PH (Landau) チャンネル でBethe-Salpeter方程式を解く



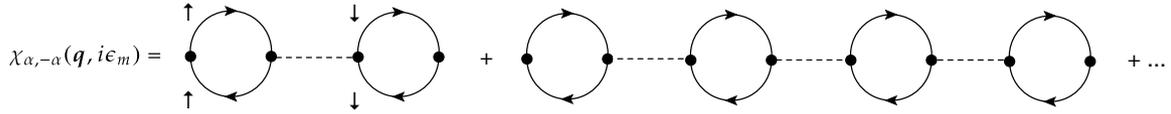
縦成分



$$\chi_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}, i\epsilon_m) = \chi_0(q) + U^2 \chi_0^3(q) + U^4 \chi_0^5(q) + \dots = \frac{\chi_0(q)}{1 - U^2 \chi_0^2(q)}$$

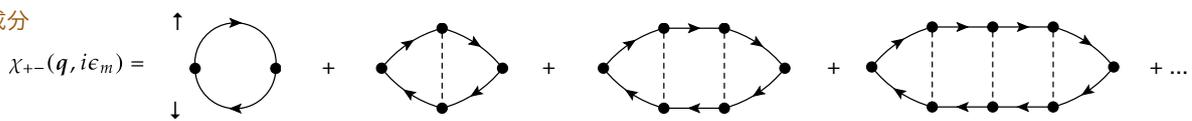
揺らぎがコヒーレントな波  $\mathbf{q}$  として伝わる

乱雑な位相はキャンセルして消える



$$\chi_{\alpha,-\alpha}(\mathbf{q}, i\epsilon_m) = -U \chi_0^2(q) - U^3 \chi_0^4(q) - \dots = \frac{-U \chi_0^2(q)}{1 - U^2 \chi_0^2(q)}$$

横成分



$$\chi_{+-}(\mathbf{q}, i\epsilon_m) = \chi_0(q) + U \chi_0^2(q) + U^2 \chi_0^3(q) + U^3 \chi_0^4(q) + \dots = \frac{\chi_0(q)}{1 - U \chi_0(q)}$$

$$\chi_{\text{ch}}(q) = 2(\chi_{\alpha\alpha}(q) + \chi_{\alpha,-\alpha}(q)) = \frac{2\chi_0(q)}{1 + U\chi_0(q)} \quad \text{cf. 誘電率、プラズマ振動} \quad \langle\langle (n_{i\uparrow} \pm n_{i\downarrow}); (n_{i\uparrow} \pm n_{i\downarrow}) \rangle\rangle = 2(\chi_{\alpha\alpha}(q) \pm \chi_{\alpha,-\alpha}(q))$$

$$\chi_{\text{sp}}(q) = 2(\chi_{\alpha\alpha}(q) - \chi_{\alpha,-\alpha}(q)) = \frac{2\chi_0(q)}{1 - U\chi_0(q)} = 2\chi_{+-}(q) \quad \text{SU(2)対称性}$$

Stoner条件  $\rho_F U > 1$

$$\chi_{\text{sp}}^{\text{R}}(q \rightarrow 0, \omega = 0) = \frac{2\chi_0^{\text{R}}(0, 0)}{1 - U\chi_0^{\text{R}}(0, 0)} \sim \frac{2\rho_F}{1 - \rho_F U} \quad \text{Stoner因子} \quad 1/(1 - \rho_F U)$$

有限温度で帯磁率が発散する

T=0 降温とともに  $\chi_0(0, 0)$  は増大し、 $\rho_F$  に近づく

平均場とRPA

自由電子  $\frac{m}{2} = \chi_0^{\text{R}}(0, 0)B$

平均場中の電子  $\frac{m}{2} = \chi_0^{\text{R}}(0, 0)B_{\text{eff}} = \chi_0^{\text{R}}(0, 0) \left( B + \frac{Um}{2} \right) \implies \chi^{\text{R}}(0, 0) = \frac{m}{B} = \frac{2\chi_0(0, 0)}{1 - U\chi_0(0, 0)}$

$\chi_0^{\text{R}}(q, 0)$  が最大となる波数ベクトル  $\mathbf{Q}$  で磁気秩序が発生する

T=T<sub>c</sub> で  $\chi^{\text{R}}(\mathbf{Q}, 0)$  が発散

自由電子  $\mathbf{q}=0$  で最大 (cf. Lindhard関数)

Hubbard模型 (正方格子)  $\mathbf{q}=(\pi/a, \pi/a)$  で最大 (反強磁性)

RPAの欠点

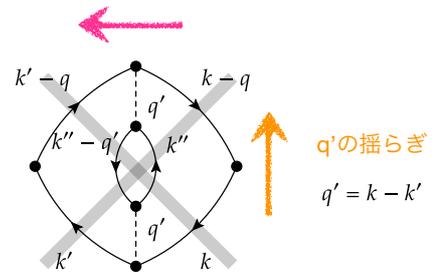
右のようなダイアグラム等は無視されている



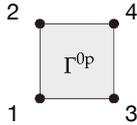
コヒーレントな揺らぎのみが過大評価されている  
高すぎる転移温度

モード・モード結合

qの揺らぎ



相互作用の繰り込み



T行列近似

低密度、ハードコアポテンシャルに対して有効

$$\Gamma^P(k, q - k; k', q - k') = U - U^2 \psi_0(q) + U^3 \psi_0^2(q) - \dots = \frac{U}{1 + U \psi_0(q)} \sim \frac{U}{1 + U \rho_F} \equiv U_{\text{eff}}$$

金森理論

RPAの結果においてUをU<sub>eff</sub>に置き換える



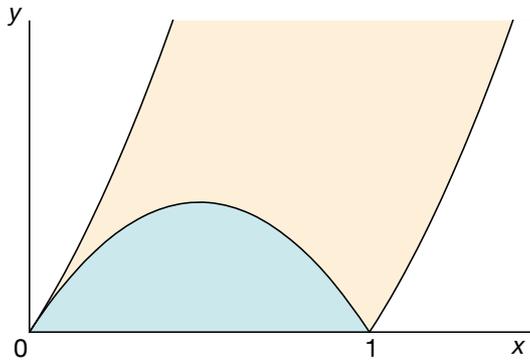
Stoner条件は以下のようになり、満足することは困難

$$\rho_F U_{\text{eff}} = \frac{\rho_F U}{1 + \rho_F U} > 1$$

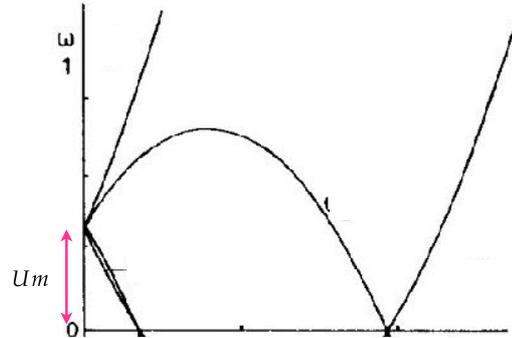
強磁性の発現にはFermi準位近傍でピーク的な状態密度が必要

横帯磁率

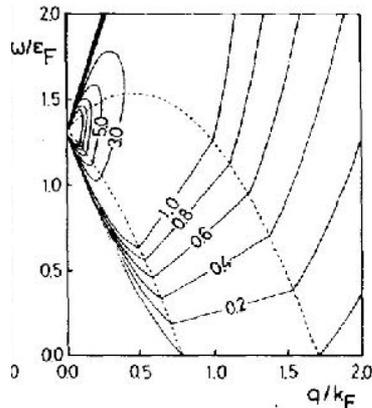
Stoner励起 (常磁性相)



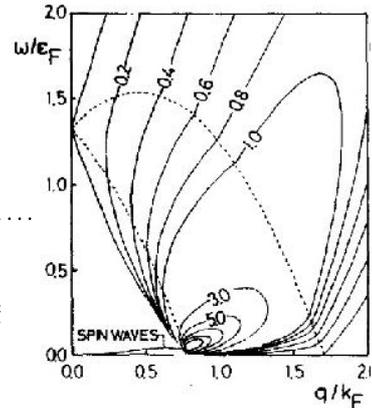
Stoner励起 (強磁性相)



Stoner励起強度 (強磁性相)



RPA 励起強度 (強磁性相)



スピン波の分散

$$\omega(q) = Dq^2 + \dots$$

Landau減衰

### Hubbard模型の反強磁性

$\xi_{k+Q} = -\xi_k$  を満たすものとする

Aサイト  $B_{\text{eff}}^A = \frac{Um_s}{2} \equiv \Delta$

Bサイト  $B_{\text{eff}}^B = -\Delta$

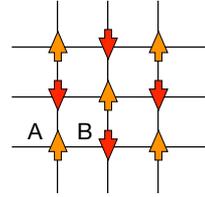
$\langle m_A \rangle = m_s$

$\langle m_B \rangle = -m_s$

まとめて

$B_{\text{eff}}^i = \Delta e^{iQ \cdot r_i}$

$Q = (\pi/a, \pi/a)$  等



$$\left( \begin{array}{l} -\sum_i B_{\text{eff}}^i m_i = -\Delta \sum_{k\sigma} \sigma c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} \\ \sum_k (\dots) = \sum_k^{\text{MBZ}} (\dots) + \sum_k^{\text{MBZ}} (\dots)_{k \rightarrow k+Q} \\ = -\Delta \sum_{k\sigma} \sigma (c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} + c_{k+Q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) \end{array} \right) \left( \begin{array}{l} \sum_i e^{iQ \cdot r_i} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = \sum_i e^{iQ \cdot r_i} \sum_k e^{ik \cdot r_i} c_{k\sigma}^\dagger \sum_{k'} e^{-ik' \cdot r_i} c_{k'\sigma} \\ = \sum_{k,k'} \delta_{k',k+Q} c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma} = \sum_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} \end{array} \right)$$

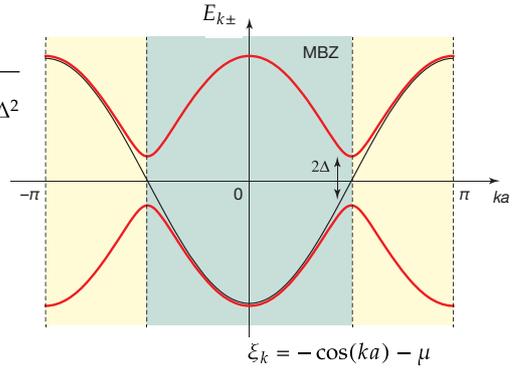
$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger \ c_{k+Q\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} \xi_k & -\sigma\Delta \\ -\sigma\Delta & \xi_{k+Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ c_{k+Q\sigma} \end{pmatrix}$$



$$E_{k\pm} = \frac{\xi_k + \xi_{k+Q}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_k - \xi_{k+Q}}{2}\right)^2 + \Delta^2} = \pm \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}$$

グリーン関数

$$G_\sigma(\mathbf{k}, z) = \begin{pmatrix} z - \xi_k & \sigma\Delta \\ \sigma\Delta & z - \xi_{k+Q} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{(z - E_{k+})(z - E_{k-})} \begin{pmatrix} z - \xi_{k+Q} & -\sigma\Delta \\ -\sigma\Delta & z - \xi_k \end{pmatrix}$$



### 平均場方程式

$$m_s = \frac{1}{N} \sum_{i\sigma} e^{iQ \cdot r_i} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sigma \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma} \rangle = \frac{\Delta}{N} \sum_k \frac{\tanh(\beta E_{k+}/2)}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}}$$

一般には、粒子数密度と化学ポテンシャルの関係式も合わせて解く必要がある

$$n = \frac{T}{N} \sum_{k\sigma} G_\sigma^{11}(k, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+}$$

$\xi_{k+Q} = -\xi_k$  の時、 $n=1$

### RPAによる横感受率 (反強磁性相)

$$\hat{\chi}_0(q) = -\int_k \hat{G}(k) \hat{G}(k+q) \quad \hat{\chi}_{+-}^{-1}(q) = \hat{\chi}_0^{-1}(q) - U\hat{I}$$

$$\chi_{+-}(q) = \frac{1}{D_q} \begin{pmatrix} \chi^{11}(q) & \chi^{12}(q) \\ \chi^{12}(q) & \chi^{11}(q+Q) \end{pmatrix}$$

$$D_q = [1 - U\chi_0^{11}(q)][1 - U\chi_0^{11}(q+Q)] - [U\chi_0^{12}(q)]^2$$

$$\chi^{11}(q) = \chi_0^{11}(q) (1 - U\chi_0^{11}(q+Q)) + U[\chi_0^{12}(q)]^2$$

$$\chi^{12}(q) = \chi_0^{12}(q)$$

平均場方程式

$$1 = U\chi_0^{11}(Q, 0)$$

cf. 保存近似

$T > T_N \quad \chi_0^{12}(q) = 0$

$T < T_N \quad \chi_0^{12}(Q, 0) = 0 \implies \chi_{+-}^{11}(Q, 0) = \frac{\chi_0^{11}(Q, 0)}{1 - U\chi_0^{11}(Q, 0)} = \infty$

$$\chi_{+-}^{11}(q) = \frac{\chi_0^{11}(q)}{1 - U\chi_0^{11}(q)}$$

集団励起

$$D_q^R = 0 \implies \omega(q)$$

### 平均場近似

- ・高次元ほど揺らぎが小さく、良い近似
- ・低温では熱揺らぎが小さく、良い近似 (量子揺らぎが重要でなければ)
- ・磁化率の温度依存性が正確ではない
- ・転移温度が一桁ほど高く評価される

正方格子Hubbard模型 ( $U \gg t$ ) では  $\omega(q) = \sqrt{K(q)K(q+Q)}$

$$K(q) = \frac{4t^2}{U} [\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + 2]$$

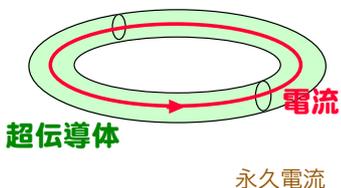
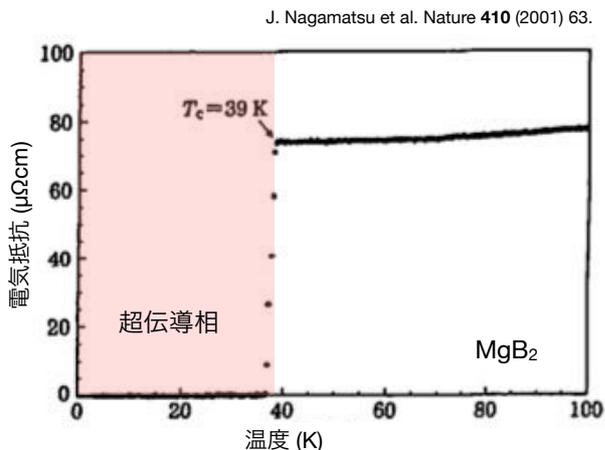
$$\text{Im} \chi_{+-}^{R,11}(\omega) = \frac{\pi}{2} \delta(\omega - \omega(q)) \sqrt{\frac{K(q+Q)}{K(q)}} \quad q = Q \text{ で発散}$$

# 超伝導

## 概観

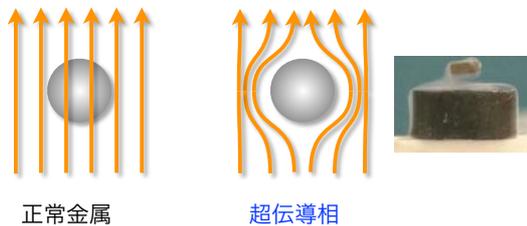
# 超伝導現象

## ゼロ抵抗



## Meissner効果

磁場は履歴によらず超伝導体に侵入できない

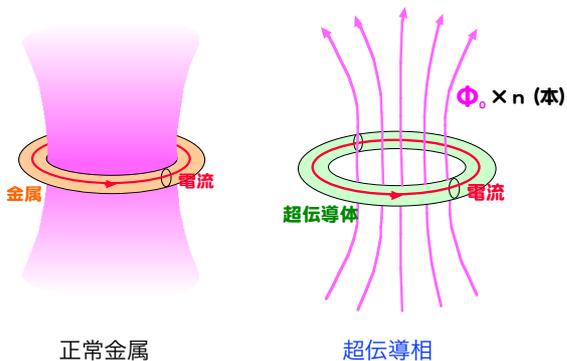


$$B = H + 4\pi M = 0$$

完全反磁性  $\chi = \frac{M}{H} = -\frac{1}{4\pi}$

## 磁束の量子化

超伝導リングを通過する磁束密度は磁束量子を単位として量子化される



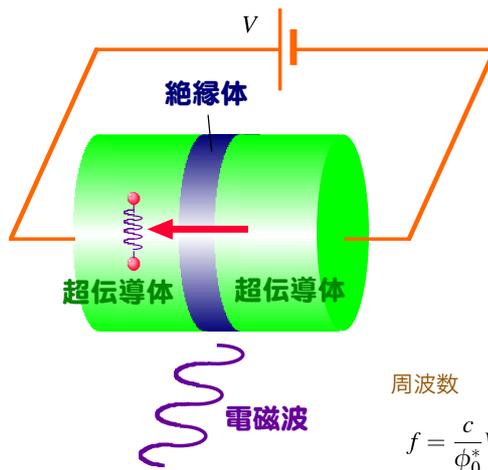
磁束量子 (超伝導)

$$\phi_0^* = \frac{2\pi\hbar c}{2e} = 2.068 \times 10^{-7} \text{ G cm}^2$$

電子ペアが重要な役割を果たしている証拠

## Josephson効果

絶縁体をトンネル効果によって通過する際量子化された周波数の電磁波を放出



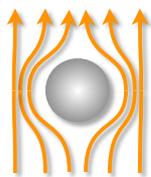
周波数

$$f = \frac{c}{\phi_0^*} V$$

Josephson定数

$$\kappa = \frac{c}{\phi_0^*} = 483593.420 \text{ GHz/V}$$

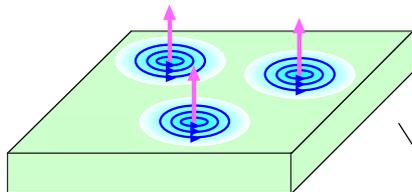
第1種超伝導体



超伝導相

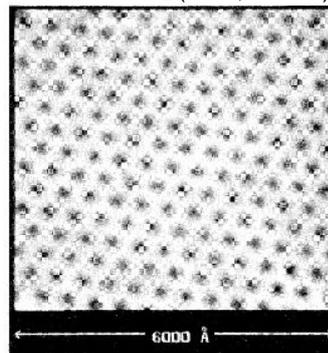
第2種超伝導体 (磁束格子)

磁場は渦糸として超伝導体に侵入  
渦糸は格子を形成



渦糸のまわりには  
超伝導遮蔽電流が流れる

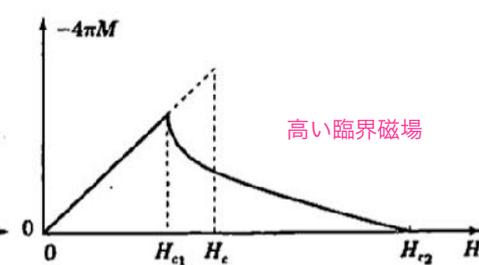
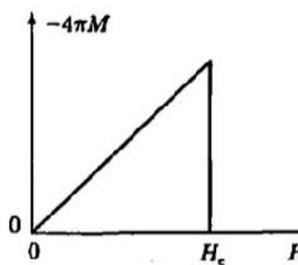
STM像: NbSe<sub>2</sub> (H=1T, T=1.8K)



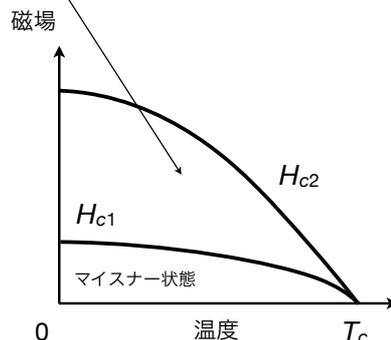
H.F. Hess et al. Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 214.

超伝導領域が大きい

磁場によって壊れる  
超伝導領域が小さい

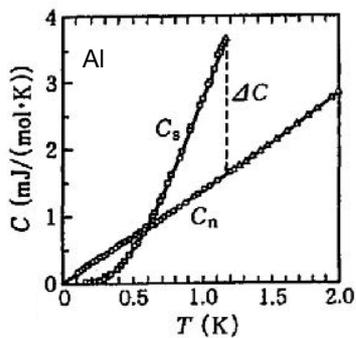


高い臨界磁場

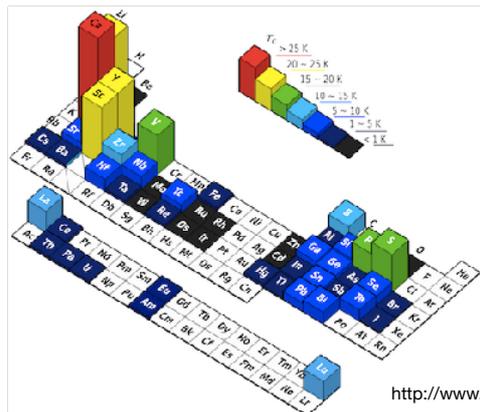


比熱

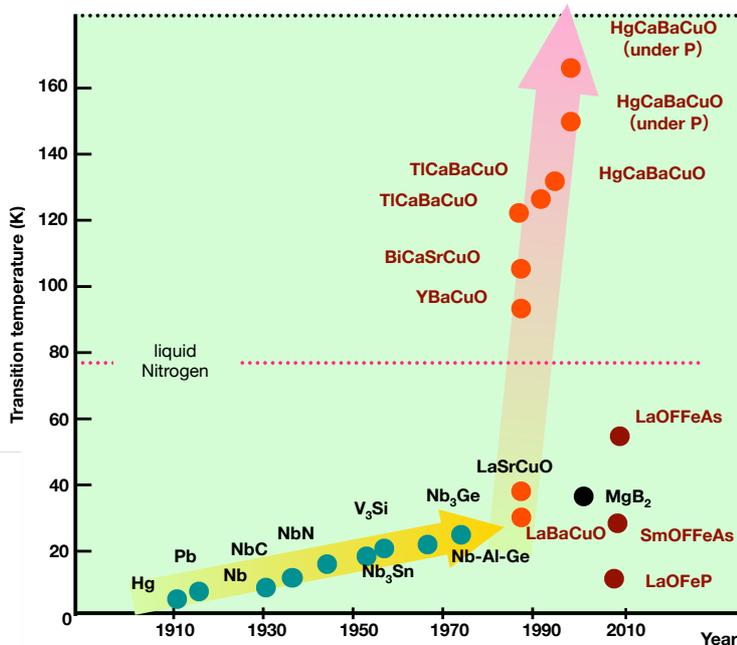
2次相転移  
エネルギーギャップの存在



金属のありふれた基底状態



転移温度



## 簡単な理論的考察

超伝導電子の運動 (密度  $n$ 、電荷  $-e^*$ 、質量  $m^*$ )

$$m^* \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e^* \mathbf{E} \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \mathbf{j} = \frac{ne^{*2}}{m^*} \mathbf{E}$$

完全導体

Maxwell方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c(\nabla \times \mathbf{E}) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \left( \mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} \nabla \times \mathbf{j} \right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} (\nabla \times \mathbf{j}) = \text{const.}$$

Londonの仮定

$$\mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} (\nabla \times \mathbf{j}) = 0$$

$$\text{Maxwell方程式} \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad \Longrightarrow \quad \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \frac{4\pi}{c} (\nabla \times \mathbf{j}) = -\frac{4\pi}{c} \frac{ne^{*2}}{m^*c^2} \mathbf{B}$$

$$\text{左辺} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = -\nabla^2 \mathbf{B} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) = -\nabla^2 \mathbf{B}$$

London方程式

磁場侵入長

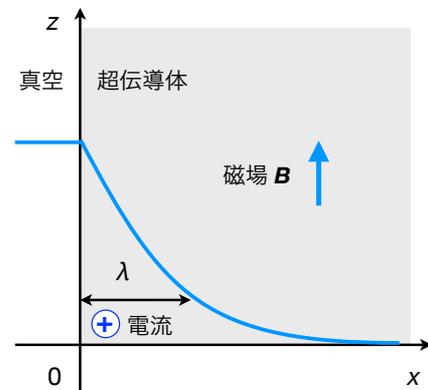
$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B} \quad \lambda = \sqrt{\frac{m^*c^2}{4\pi ne^{*2}}}$$

Meissner効果

$$\frac{d^2}{dx^2} B_z(x) = \frac{1}{\lambda^2} B_z(x)$$

$$B_z(x) = B_z(0) e^{-x/\lambda}$$

$$j_y(x) = \frac{cB_z(0)}{4\pi\lambda} e^{-x/\lambda} \quad \left( \mathbf{j} = \frac{c}{4\pi} (\nabla \times \mathbf{B}) \right)$$



Londonの仮定の意味するところは？

ベクトルポテンシャルに比例する電流

$$\mathbf{B} + \frac{m^*c}{ne^{*2}} (\nabla \times \mathbf{j}) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{j} = -\frac{ne^{*2}}{m^*c} \mathbf{A} \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad \text{Londonゲージ}$$

$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  電荷の保存則

$$\text{cf. 電流密度} \quad \mathbf{j} = -e^* n \mathbf{v} = -\frac{ne^*}{m^*} \mathbf{p} - \frac{ne^{*2}}{m^*c} \mathbf{A}$$

常磁性電流 反磁性電流

超伝導電子の正準運動量は常にゼロ！

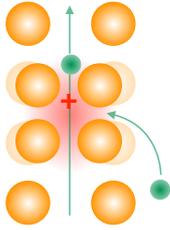
cf. (重心)運動量ゼロにBose凝縮

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad \text{超伝導状態の波動関数は剛性を持っている}$$

# BCS理論の骨組み

## 二大要素 (1957)

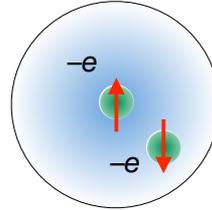
### (1) 電子間の引力の存在 (電子格子相互作用による)



格子振動が電子間の引力を作り出す  
 (a) 電子が格子歪みによる分極を作り出す  
 (b) 分極にもう一つの電子が引き寄せられる



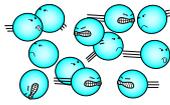
### Cooper対



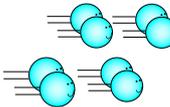
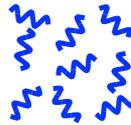
- ・等方的 (s波)
- ・スピンゼロ (一重項)

$$m^* = 2m, e^* = 2e$$

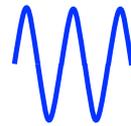
### (2) 電子ペア波動関数の位相のコヒーレンス



正常状態  
インコヒーレント



超伝導状態  
電子対のコヒーレントな運動



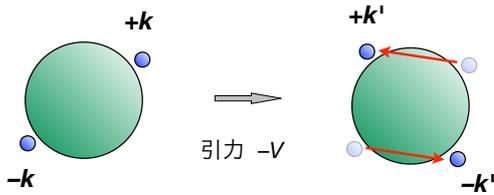
すべての電子対が同じ動き  $\Rightarrow$  巨視的な量子現象

### BCS理論で説明可

- ・2次相転移
- ・エネルギーギャップ
- ・Meissner効果
- ・磁束の量子化
- ・臨界磁場
- ・Josephson効果
- ・etc

## Cooper問題

BCS理論へのブレークスルー：Fermi球の外側においた2電子に引力が働く問題



( $+k\uparrow, -k\downarrow$ )の2体波動関数 (重心運動量ゼロ)

$$\psi_k(r_1, r_2) = e^{ik \cdot (r_1 - r_2)} \times \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$$

軌道部分      スピン部分

2粒子のSchrödinger方程式

$$-\frac{1}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi_k(r_1, r_2) - V \sum_{k'} \psi_{k'}(r_1, r_2) = (E + 2\epsilon_F) \psi_k(r_1, r_2) \quad \Rightarrow \quad \psi_k = \frac{V \sum_{k'} \psi_{k'}}{2\xi_k - E}$$

運動エネルギー

引力による散乱  
(相互作用は等方的)

$E$  は  $\epsilon_F$  からの増加分

$$\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \epsilon_F$$

$$\sum_k \times \Rightarrow 1 = V \sum_k \frac{1}{2\xi_k - E} \sim \lambda \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{1}{2\xi - E} = \frac{\lambda}{2} \ln \left( \frac{E - 2\omega_D}{E} \right) \sim \frac{\lambda}{2} \ln \left( \frac{-2\omega_D}{E} \right)$$

$$\lambda = \rho_F V$$

$$(E \ll \omega_D, \lambda \ll 1)$$

$$\Rightarrow E = -2\omega_D e^{-2/\lambda} \quad \text{電子対は束縛状態を形成 (E < 0)} \quad \text{cf. 1次元系}$$

cf. BCS理論の転移温度  $T_c = \frac{2\omega_D e^\gamma}{\pi} e^{-1/\lambda}$

cf.  $\epsilon_F = 0$  ならば、束縛解を持つ条件は

$\Rightarrow$  Fermi球は無限小の引力に対して不安定

$$\rho(\omega_D) V > 1$$

# BCS理論

## 平均場近似

一般的な2体相互作用

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_q \sum_{k,k'} \sum_{\alpha\beta} V_q(k,k') c_{k\alpha}^\dagger c_{q-k\beta}^\dagger c_{q-k'\beta} c_{k'\alpha}$$

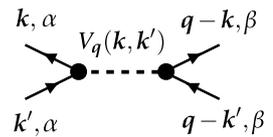
### BCS模型と平均場近似

- $V > 0$  は電子格子相互作用による引力
- 引力が働くエネルギー領域 ( $|\xi_k| < \omega_D$ ) のみ考える
- s波1重項 (重心運動量  $\mathbf{q}=0$ )

$$H_0 = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$$

$$H_{\text{int}} = -V \sum_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

$$V_q(k,k') = \langle k\alpha, q-k\beta | V | k'\alpha, q-k'\beta \rangle$$



### 電子対平均場

粒子数を保存しない特殊な平均場 (後述)

$$c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \sim \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} + c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle - \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle$$

ギャップ関数  $\Delta = V \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = |\Delta| e^{i\theta}$

### Bogoliubov変換

準粒子

$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} - \sum_k (\Delta^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \Delta c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) + V^{-1} |\Delta|^2$$

$$= \sum_k (c_{k\uparrow}^\dagger \ c_{-k\downarrow}) \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta \\ -\Delta^* & -\xi_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_k \xi_k + V^{-1} |\Delta|^2$$

$$\begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & v_k e^{i\theta} \\ -v_k e^{-i\theta} & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k\uparrow} \\ a_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

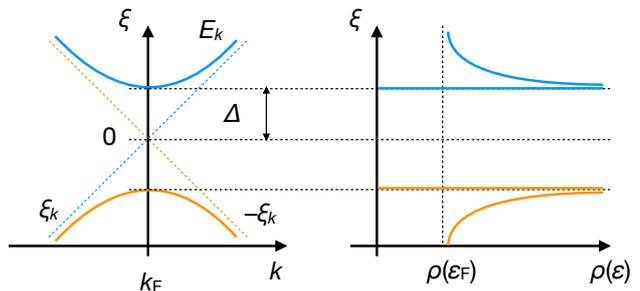
$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad \{a_{k\alpha}, a_{k\beta}^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta}$$

$$\Downarrow \quad u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right)} \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)}$$

$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\alpha} E_k a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + E_0$$

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}$$

$$E_0 = - \sum_k (E_k - \xi_k) + V^{-1} |\Delta|^2$$



準粒子

$$a_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k e^{i\theta} c_{-k\downarrow}^\dagger$$

$$a_{k\downarrow} = u_k c_{k\downarrow} + v_k e^{i\theta} c_{-k\uparrow}^\dagger$$

BCS基底状態 = 準粒子なし

$$a_{k\alpha} |\Phi_\theta\rangle = 0$$

ギャップ方程式

$$\frac{\Delta}{V} = \sum_k u_k v_k \left( 1 - \sum_\alpha \langle a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} \rangle \right) = \Delta \sum_k \frac{\tanh(\beta E_k/2)}{2E_k} \implies \frac{1}{\lambda} = \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh(\beta \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}/2)}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}$$

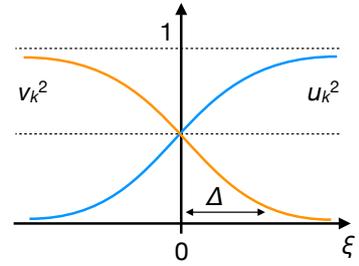
無次元の結合定数  $\lambda = \rho_F V$

正常状態

粒子部分の割合  $u_k = \theta(\xi_k)$

ホール部分の割合  $v_k = \theta(-\xi_k)$

基底状態 = 粒子、ホールなし  
Fermi球



転移温度  $T \rightarrow T_c, |\Delta| \rightarrow 0$  ( $T_c \ll \omega_D$ )

ギャップ方程式  $\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\beta c \omega_D/2} dx \frac{\tanh x}{x} = \ln x \tanh x \Big|_0^{\beta c \omega_D/2} - \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \sim \ln\left(\frac{\beta c \omega_D}{2}\right) + \ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi}\right) = \ln\left(\frac{2\omega_D e^\gamma}{\pi T_c}\right)$

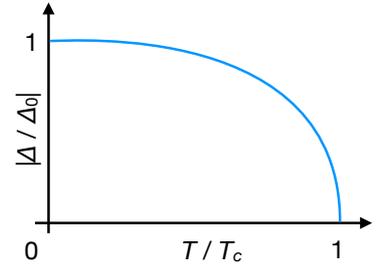
$\implies T_c = \frac{2\omega_D e^\gamma}{\pi} e^{-1/\lambda} \sim 1.13 \omega_D e^{-1/\lambda}$  cf. Cooper問題の束縛エネルギー  $|E| = 2\omega_D e^{-2/\lambda}$

$T=0$   $|\Delta| \rightarrow |\Delta_0|$

ギャップ方程式  $\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\omega_D/|\Delta_0|} dx \frac{1}{\sqrt{x^2+1}} = \ln\left(\frac{\omega_D}{|\Delta_0|} + \sqrt{(\omega_D/|\Delta_0|)^2 + 1}\right) \sim \ln\left(\frac{2\omega_D}{|\Delta_0|}\right)$

$\implies |\Delta_0| = 2\omega_D e^{-1/\lambda}$

物質によらない普遍定数  $\frac{|\Delta_0|}{T_c} = \frac{\pi}{e^\gamma} \sim 1.76$



南部表示

$$C_k^\dagger \equiv (c_{k\uparrow}^\dagger \quad c_{-k\downarrow}) \quad H_{MF} = \sum_k C_k^\dagger \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta \\ -\Delta^* & -\xi_{-k} \end{pmatrix} C_k$$

$$\hat{G}(k, \tau) = -\langle T_\tau C_k(\tau) C_k^\dagger \rangle = \begin{pmatrix} -\langle T_\tau c_{k\uparrow}(\tau) c_{k\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{k\uparrow}(\tau) c_{-k\downarrow} \rangle \\ -\langle T_\tau c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau) c_{k\uparrow}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau) c_{-k\downarrow} \rangle \end{pmatrix}$$

Dyson-Gor'kov方程式

$$\left( \begin{array}{cc} \leftarrow & \rightarrow \\ \rightarrow & \leftarrow \end{array} \right) = \left( \begin{array}{cc} \leftarrow & 0 \\ 0 & \rightarrow \end{array} \right) + \left( \begin{array}{cc} \leftarrow & 0 \\ 0 & \rightarrow \end{array} \right) \left( \begin{array}{cc} 0 & \bullet \Delta \\ \bullet \Delta^* & 0 \end{array} \right) \left( \begin{array}{cc} \leftarrow & \rightarrow \\ \rightarrow & \leftarrow \end{array} \right)$$

$$\hat{G}(k, z) = \begin{pmatrix} z - \xi_k & \Delta \\ \Delta^* & z + \xi_{-k} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{-1}{-z^2 + \xi_k^2 + |\Delta|^2} \begin{pmatrix} z + \xi_k & -\Delta \\ -\Delta^* & z - \xi_k \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} G(k, z) & -F(k, z) \\ -F^+(k, z) & -G(k, -z) \end{pmatrix}$$

$\implies z = \pm \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2} = \pm E_k$  準粒子バンド

ギャップ方程式

$$\Delta = V \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = -V \sum_k T \sum_n F(k, i\omega_n) = V \sum_k T \sum_n \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_k^2 + |\Delta|^2} = \lambda \Delta \int d\xi \frac{\tanh(\beta E_k/2)}{2E_k}$$

$$T \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + x^2} = \frac{\tanh(\beta x/2)}{2x}$$

$$2\pi T \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{\omega_n^p} = \frac{(2^p - 1)\zeta(p)}{(2\pi T)^{p-1}} \quad (p > 1)$$

$$T_c = \frac{2\omega_c e^\gamma}{\pi} e^{-1/\lambda}$$

$$2\pi T \sum_{n=0}^{n_c} \frac{1}{\omega_n} = \ln 4 + \gamma + \psi(n_c + 3/2) \sim \ln\left(\frac{2\omega_c e^\gamma}{\pi T}\right) \quad [\omega_c \equiv 2\pi T n_c]$$

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{T}{T_c} + 2\pi T \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{\omega_n}$$

BCS基底状態 Cooper対の重ね合わせ (粒子数は一定ではない)

変分波動関数  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  (正常状態  $|\Phi_N\rangle$  : Fermi球に電子を詰めた状態に対応)

$$|\Phi_\theta\rangle = \prod_k (u_k + e^{i\theta} v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle$$

ゲージ不変性が破れた状態  
( $c^\dagger \rightarrow e^{i\phi} c^\dagger$  に対して  $|\Phi_\theta\rangle \rightarrow e^{i\alpha} |\Phi_\theta\rangle$  とならない)

平均粒子数  $N' = \langle \Phi_\theta | \hat{N} | \Phi_\theta \rangle = 2 \sum_k v_k^2 \propto N$  注意  
 $N'$  は  $|\xi_k| < \omega_D$  内の電子数 (定数)

揺らぎ  $(\Delta N')^2 = \langle \Phi_\theta | \hat{N}^2 | \Phi_\theta \rangle - N'^2 = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2 \propto N$   $\hat{N} = \sum_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$

$$\frac{\Delta N'}{N'} \sim \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

$N \gg 1$  では揺らぎは無視でき、粒子数は  $N$  に確定していると考えてよい

ペア振幅  $F_k = \langle \Phi_\theta | c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} | \Phi_\theta \rangle = u_k v_k e^{i\theta}$   $F(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \langle \Phi_\theta | \psi_\downarrow(\mathbf{r}') \psi_\uparrow(\mathbf{r}) | \Phi_\theta \rangle = \sum_k F_k e^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = e^{i\theta} \sum_k u_k v_k \equiv \frac{\Delta_0}{V}$$

ギャップ方程式  $E_0 = \langle \Phi_\theta | H | \Phi_\theta \rangle = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 - V \sum_{kk'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} - \frac{V}{4} N'^2$

$$0 = \frac{\partial E_0}{\partial v_k} = 4 \xi_k v_k - 2V \left( \sum_k u_k v_k \right) \left( u_k - \frac{v_k^2}{u_k} \right) \xrightarrow{\xi_k \rightarrow \infty, v_k \rightarrow 0} v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)} \quad u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right)}$$

$$\frac{\Delta_0}{V} = e^{i\theta} \sum_k u_k v_k = \Delta_0 \sum_k \frac{1}{2 \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_0|^2}}$$

$T=0$  の平均場近似は  
BCS基底状態の変分法と等しい  
 $a_{k\alpha} |\Phi_\theta\rangle = 0$  も確認できる

凝縮エネルギー

$$\Delta E = E_0 - E_N = \sum_k \left( \xi_k - \frac{\xi_k}{E_k} \right) - \frac{|\Delta_0|^2}{V} - 2 \sum_{\xi_k < 0} \xi_k = -\rho_F \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{(E_k - \xi_k)^2}{E_k} = -\rho_F |\Delta_0|^2 \int_0^\infty dx \frac{(\sqrt{x^2+1} - x)^2}{\sqrt{x^2+1}} = -\frac{\rho_F |\Delta_0|^2}{2}$$

Cooper対のサイズ

$$|F(\mathbf{r}, 0)| = \sum_k u_k v_k e^{ik \cdot \mathbf{r}} \sim \frac{\sin(k_F r)}{k_F r} K_0(r/\xi_0 \pi) \sim \frac{\sin(k_F r)}{k_F r} \sqrt{\frac{\xi_0 \pi^2}{2r}} e^{-r/\xi_0 \pi} \quad (r \gg \xi_0)$$

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\pi |\Delta_0|} \quad \text{Pippardの長さ}$$

Fermi準位近傍  $|\xi| \lesssim |\Delta_0|$  ( $\Delta k \lesssim |\Delta_0|/\hbar v_F$ ) の状態からなる波束のサイズ

$$\Delta x \sim \frac{1}{\Delta k} = \frac{\hbar v_F}{|\Delta_0|} \sim \frac{\epsilon_F}{|\Delta_0|} k_F^{-1} \sim 10^4 \text{ cm} \quad \Rightarrow \quad \text{多くのペアが重なっている平均場がよい近似}$$

$\xi_0$  : Cooper対のサイズ  
 $\xi$  : コヒーレンス長 (ペア間の相関距離)

$T \ll T_c$  で同程度だが、概念的には別物  
( $T \rightarrow T_c$  で、前者は一定、後者は発散)

非対角長距離秩序

長距離相関      短距離相関

$$1 \text{ 粒子密度行列} \quad \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle B^\dagger(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}') \rangle = \langle B^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \langle B(\mathbf{r}') \rangle + C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad \Rightarrow \quad \langle B^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \langle B(\mathbf{r}') \rangle \neq 0$$

$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$

( $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  のとき  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  は粒子数密度)

Bose-Einstein凝縮を特徴づける概念

BCS基底状態

$$B^\dagger = \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) \quad \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow F(\mathbf{r}, \mathbf{r})^* F(\mathbf{r}', \mathbf{r}') = \frac{|\Delta_0|^2}{V^2}$$

熱力学量

自由エネルギー  $F = -k_B T \ln Z + E_0 = -2k_B T \sum_k \ln \left( \frac{1 + e^{-\beta E_k}}{1 + e^{-\beta |\xi_k|}} \right) - \sum_k (E_k - |\xi_k|) + V^{-1} |\Delta|^2 + F_N$

$0 = \frac{\partial F}{\partial |\Delta|} = 2|\Delta| \left( \frac{1}{V} - \sum_k \frac{\tanh(\beta E_k/2)}{2E_k} \right)$  ギャップ方程式は、自由エネルギーの極小条件と等しい

エントロピー  $S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -2k_B \sum_k [f(E_k) \ln f(E_k) + (1 - f(E_k)) \ln(1 - f(E_k))]$   $T_c$ で連続  
 $\frac{\partial F}{\partial |\Delta|} = 0$  に注意 エントロピーバランス

比熱  $C = T \frac{\partial S}{\partial T} = 2 \sum_k \left[ \frac{E_k^2}{T} - \frac{1}{2} \frac{d|\Delta|^2}{dT} \right] \left( -\frac{\partial f}{\partial E_k} \right)$   $\int_0^{T_c} dT \frac{C}{T} = S(T_c) - S(0) = S(T_c) \rightarrow \int_0^{T_c} dT \frac{C_S}{T} = \int_0^{T_c} dT \frac{C_N}{T}$

$T_c$  近傍 cf. Landau理論

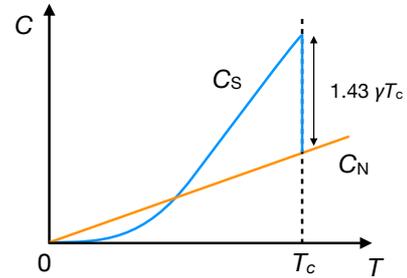
$|\Delta|$ で展開すると  $F = F_N + \frac{a}{2} |\Delta|^2 + \frac{b}{4} |\Delta|^4 + \dots = \rho_F \left[ |\Delta|^2 \ln \frac{T}{T_c} + \frac{7\zeta(3)}{16(\pi k_B T_c)^2} |\Delta|^4 + \dots \right]$   $\zeta(x)$ : リーマンのゼータ関数  
 $a = \alpha(T - T_c)$   $\alpha = \frac{2\rho_F}{T_c}$

$\frac{a}{2} = \frac{1}{V} - \sum_k \frac{\tanh(\beta \xi_k/2)}{2\xi_k} = \rho_F \ln \frac{T}{T_c}$   $b = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{\xi_k^3} \left[ \tanh\left(\frac{\beta \xi_k}{2}\right) - \frac{\beta \xi_k/2}{\cosh^2(\beta \xi_k/2)} \right] = \frac{\rho_F}{4(k_B T)^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{x^3} \left( \tanh x - \frac{x}{\cosh^2 x} \right) = \frac{7\zeta(3)}{4} \frac{\rho_F}{(\pi k_B T)^2}$

比熱  $C_N = \gamma T_c$   $\gamma = \frac{2(\pi k_B)^2 \rho_F}{3}$   $C_S = \frac{a^2 T_c}{2b} = \frac{8(\pi k_B)^2 \rho_F}{7\zeta(3)}$

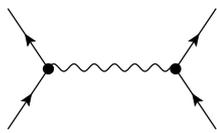
$\frac{C_S - C_N}{\gamma T_c} = \frac{12}{7\zeta(3)} = 1.43$  物質によらない普遍定数

低温  $C \sim 2 \sum_k \frac{E_k^2}{T} \left( -\frac{\partial f}{\partial E_k} \right) = \frac{k_B \rho_F}{(k_B T)^2} \int_0^\infty d\xi \frac{E^2}{\cosh^2(\beta E/2)}$   
 $\sim \frac{4k_B \rho_F |\Delta_0|^2}{(k_B T)^2} e^{-\beta |\Delta_0|} \int_0^\infty d\xi e^{-\beta \xi^2/2|\Delta_0|}$   
 $= 2\sqrt{2\pi} k_B \rho_F |\Delta_0|^{5/2} (k_B T)^{-3/2} e^{-\beta |\Delta_0|}$



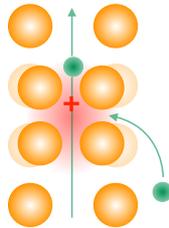
# 異方的超伝導

## 電子格子相互作用と有効引力



$$V(k - k') = g^2 D_0(k - k')$$

$$D_0(q, i\epsilon_m) = -\frac{\omega_q}{\epsilon_m^2 + \omega_q^2}$$



格子振動が電子間の引力を作り出す

- (a) 電子が格子歪みによる分極を作り出す
- (b) 分極にもう一つの電子が引き寄せられる

BCS

$$\epsilon_m \ll \omega_D \quad V(k - k') \sim -\frac{g^2}{\omega_D}$$

強結合効果、遅延効果

$$\lambda \sim 1 \quad \omega_D \sim \epsilon_F^*$$



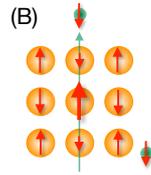
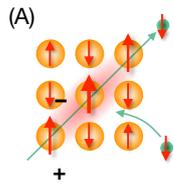
Eliashberg 方程式

$$\begin{pmatrix} \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \leftarrow & 0 \\ 0 & \rightarrow \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \leftarrow & 0 \\ 0 & \rightarrow \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} \end{pmatrix}$$

## 異方的超伝導

### BCSとは異なる引力の起源

例：スピンの揺らぎ (反強磁性秩序の近く)

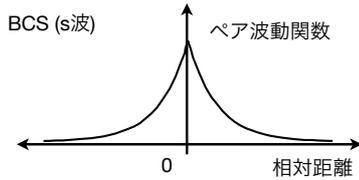


方向に依存した引力

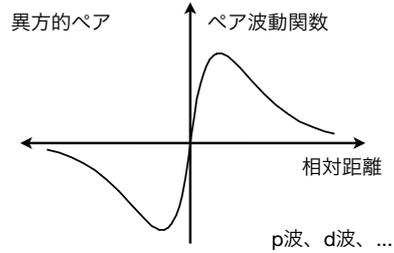
(A) 対角線方向に移動する電子はスピン分極を引き起こし、他の電子を引きつける。

(B) 縦横に移動する電子の作る分極は(A)に比べて弱い

### 局所斥力

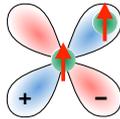


Coulomb 斥力



### 異方的Cooper対

### 新しい自由度をもつ基底状態と励起状態



- ・方向に依存した位相 (ノードの存在)
- ・スピン3重項 (S=1)、1重項 (S=0)

## 平均場近似

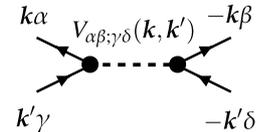
cf. M. Sigrist and K. Ueda: Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 239

$$H_0 = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger c_{-k'\delta} c_{k'\gamma}$$

反交換関係  $V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_{\beta\alpha;\gamma\delta}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_{\alpha\beta;\delta\gamma}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$

エルミート  $V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_{\delta\gamma;\beta\alpha}(-\mathbf{k}', -\mathbf{k})^*$



ギャップ関数  $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = - \sum_{k'\gamma\delta} V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{-k'\delta} c_{k'\gamma} \rangle = -\Delta_{\beta\alpha}(-\mathbf{k}) \quad \Delta_{\alpha\beta}^\dagger(\mathbf{k}) = \Delta_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k})$

$$H_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{k\alpha\beta} \begin{pmatrix} c_{k\alpha}^\dagger & c_{-k\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k \delta_{\alpha\beta} & \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\alpha\beta}^\dagger(\mathbf{k}) & -\xi_{-k} \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\beta} \\ c_{-k\beta}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \sum_{k\alpha\beta} \langle c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger \rangle \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + \sum_k \xi_k$$

### 準粒子ハミルトニアン

$$H_{\text{MF}} = \sum_k \sum_\alpha E_{k\alpha} a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + E_0 \quad E_{k\pm} = \sqrt{\xi_k^2 + D^2(\mathbf{k}) \pm |\mathbf{m}(\mathbf{k})|}$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{k\alpha} E_{k\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{k\alpha\beta} \langle c_{k\alpha}^\dagger c_{-k\beta}^\dagger \rangle \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + \sum_k \xi_k$$

空間反転対称性を仮定 (1重項/3重項に分類可)

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k})(i\sigma^y)_{\alpha\beta} + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot (i\sigma\sigma^y)_{\alpha\beta} \quad \hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) + d_z(\mathbf{k}) \\ -\Delta(\mathbf{k}) + d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

$d$ ベクトル

偶パリティ

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(-\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\text{Tr}[\hat{\Delta}(\mathbf{k})(i\sigma^y)^\dagger]$$

奇パリティ

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -\mathbf{d}(-\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\text{Tr}[\hat{\Delta}(\mathbf{k})(i\sigma\sigma^y)^\dagger]$$

1重項  $\Delta = \frac{1}{2}(\Delta_{\uparrow\downarrow} - \Delta_{\downarrow\uparrow}) \quad (S, S_z) = (0, 0)$

3重項  $\begin{aligned} -d_x + id_y &= \Delta_{\uparrow\uparrow} & (1, +1) \\ d_z &= \frac{1}{2}(\Delta_{\uparrow\downarrow} + \Delta_{\downarrow\uparrow}) & (1, 0) \\ d_x + id_y &= \Delta_{\downarrow\downarrow} & (1, -1) \end{aligned}$

ギャップの大きさ  $\frac{1}{2}\text{Tr}[\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\Delta}(\mathbf{k})] = |\Delta(\mathbf{k})|^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 = D^2(\mathbf{k})$

スピン磁化  $\frac{1}{2}\text{Tr}[\hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{k})\sigma\hat{\Delta}(\mathbf{k})] = i[\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \mathbf{d}^*(\mathbf{k})] + [\Delta(\mathbf{k})\mathbf{d}^*(\mathbf{k}) + \Delta^*(\mathbf{k})\mathbf{d}(\mathbf{k})] = \mathbf{m}(\mathbf{k})$

有限: 非ユニタリー

$$\mathbf{m}(\mathbf{k}) \perp \mathbf{d}(\mathbf{k})$$

代表的なCooper対

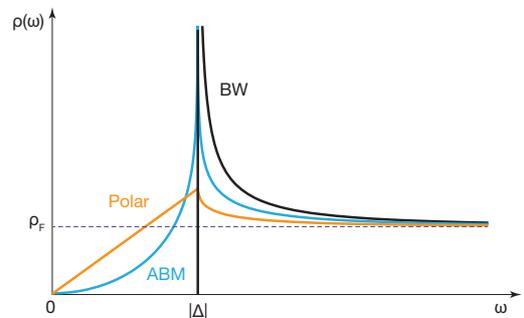
$$\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k_F$$

p波 ( $^3\text{He}$ )

BW (Balian=Werthamer)状態  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta \hat{\mathbf{k}}$

$$D^2(\mathbf{k}) = |\Delta|^2 \quad \text{フルギャップ}$$

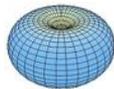
$$\rho(\omega) = \frac{\rho_F |\omega|}{\sqrt{\omega^2 - |\Delta|^2}} \theta(|\omega| - |\Delta|)$$



ABM (Anderson=Brinkman=Morel)状態  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -i\Delta(\hat{k}_y, \hat{k}_x, 0)$   
(Axial状態)

$$D^2(\mathbf{k}) = |\Delta|^2(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) = |\Delta|^2 \sin^2 \theta \quad \text{ポイントノード}$$

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_F |\omega|}{2|\Delta|} \ln \left| \frac{\omega + |\Delta|}{\omega - |\Delta|} \right| \propto \omega^2$$



低温の熱力学量

$$\rho(\omega) \propto \omega^\alpha$$

$$\text{比熱} \quad C \propto \rho_F T^{\alpha+1}$$

Polar状態  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \Delta(0, 0, \hat{k}_z)$

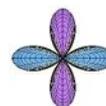
$$D^2(\mathbf{k}) = |\Delta|^2 \hat{k}_z^2 = |\Delta|^2 \cos^2 \theta \quad \text{ラインノード}$$

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_F |\omega|}{|\Delta|} \left[ \frac{\pi}{2} \theta(|\Delta| - |\omega|) + \theta(|\omega| - |\Delta|) \sin^{-1} \left| \frac{\Delta}{\omega} \right| \right] \propto \omega$$



$$\text{縦緩和率} \quad 1/T_1 \propto \rho_F^2 T^{2\alpha+1}$$

d波 (銅酸化物高温超伝導)  $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(\hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2) = \Delta \cos(2\phi) \quad \text{ラインノード}$



### 引力の分解

$$V_{\alpha\beta;\gamma\delta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}''} \left[ V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (i\sigma^y)_{\alpha\beta} (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger + V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (i\sigma^y)_{\alpha\beta} \cdot (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger \right]$$

$$V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_s(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = V_s(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_t(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = -V_t(-\mathbf{k}, \mathbf{k}')$$

### ギャップ方程式

1重項  $\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta(\mathbf{k}') \tanh(\beta E_{\mathbf{k}'}/2)}{2E_{\mathbf{k}'}} \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}$

3重項 (ユニタリー)  $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k}') \tanh(\beta E_{\mathbf{k}'}/2)}{2E_{\mathbf{k}'}} \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}$

BCS  $V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V$   
 $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta$

### 電荷・スピンの揺らぎと有効引力

1重項  $\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\delta} c_{\mathbf{k}'\gamma} (i\sigma^y)_{\alpha\beta} (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta} V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}'\alpha}$

3重項  $\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\delta} c_{\mathbf{k}'\gamma} (i\sigma^y)_{\alpha\beta} \cdot (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta} V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}'\alpha}$

### 電荷密度とスピン密度による2体相互作用

$$H_{\text{int}} = H_c + H_s \quad H_c = -\frac{1}{2} \sum_q I(q) n_q n_{-q} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta} I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}'\alpha}$$

$$H_s = -\frac{1}{2} \sum_q J(q) \sigma_q \cdot \sigma_{-q} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta} [J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 2J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')] c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}'\alpha}$$

$$V_s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{2} \left[ I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2J(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \right]_{\text{even}} = \frac{1}{4} \left[ (I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 3J(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) + (\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}') \right]$$

$$V_t(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{2} \left[ I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2J(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \right]_{\text{odd}} = \frac{1}{4} \left[ (I(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + J(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) - (\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}') \right]$$

cf. パラマグノン理論

N.F. Berk and J.R. Schrieffer, PRL **17** (1966) 433.  
 S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. **50** (1973) 1101.  
 K. Miyake, S. Schmitt-Rink, C.M. Varma, PRB **34** (1986) 6554.  
 D.J. Scalapino, E. Loh and J.E. Hirsch, PRB **34** (1986) 8190.

$$\left( \begin{array}{l} \sigma_{\alpha\gamma} \cdot \sigma_{\beta\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} \\ (i\sigma^y)_{\alpha\beta} (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \\ (i\sigma^y)_{\alpha\beta} \cdot (i\sigma^y)_{\delta\gamma}^\dagger = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \end{array} \right.$$

揺らぎと有効相互作用のRPAによる評価 (Hubbard模型)

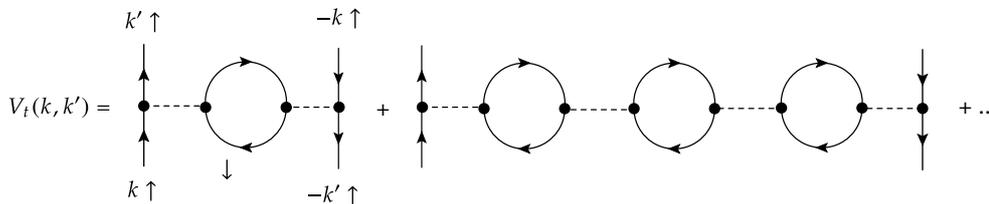
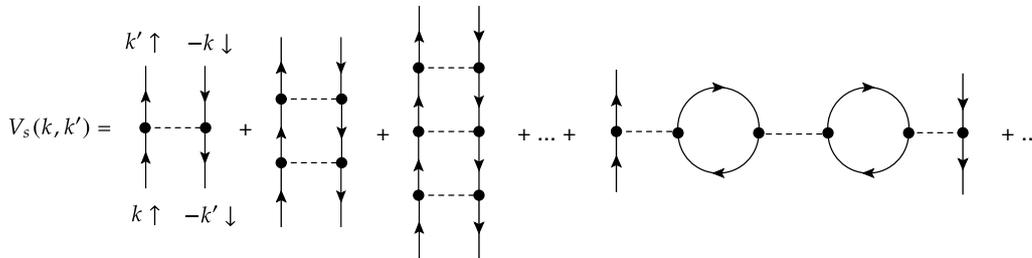
$$I(q) = \frac{U}{2} - U^2 \chi_c(q) \quad J(q) = -\frac{U}{2} - U^2 \chi_s(q)$$

$$\chi_c(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + U\chi_0(q)}$$

$$\chi_s(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - U\chi_0(q)}$$

$$V_s(k, k') = U - \frac{U^2}{2} (\chi_c(k - k') - 3\chi_s(k - k'))_{\text{even}}$$

$$V_t(k, k') = -\frac{U^2}{2} (\chi_c(k - k') + \chi_s(k - k'))_{\text{odd}}$$



遅延効果のないとき 既約表現に分解

$$V(k, k') = - \sum_{\gamma} V_{\gamma} \phi_{\gamma}^*(\hat{\mathbf{k}}) \phi_{\gamma}(\hat{\mathbf{k}})$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{\gamma} \Delta_{\gamma} \phi_{\gamma}(\hat{\mathbf{k}}) \quad \hat{\mathbf{k}} \equiv \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$$

$$\sum_{\hat{\mathbf{k}}} \phi_{\gamma}^*(\hat{\mathbf{k}}) \phi_{\gamma'}(\hat{\mathbf{k}}) = \delta_{\gamma\gamma'}$$

ギャップ方程式 ( $T \sim T_c$ )

$$\Delta_{\gamma} = \lambda_{\gamma} \Delta_{\gamma} \int d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{2\xi}$$

$$\lambda_{\gamma} \equiv \rho_F V_{\gamma}$$

⇒ 対称性  $\gamma$  の  $T_c$

$$T_c^{(\gamma)} = \frac{2\omega_c e^{\gamma}}{\pi} e^{-1/\lambda_{\gamma}}$$

例：3次元立方格子

$$\phi_{A_{1g}} = \sqrt{\frac{2}{3}} (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$$

$$\phi_{E_g} = \cos k_x - \cos k_y \quad \phi_{E_g} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\cos k_x + \cos k_y - 2 \cos k_z)$$

$$\phi_{T_{1u}} = \sqrt{2} \sin k_x \quad \phi_{T_{1u}} = \sqrt{2} \sin k_y \quad \phi_{T_{1u}} = \sqrt{2} \sin k_z$$

singlet

triplet

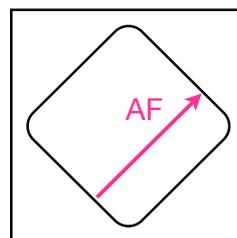
反強磁性揺らぎが優勢な場合

$$V_s(k - k') \sim \frac{3U^2}{2} \chi_s(k - k')$$

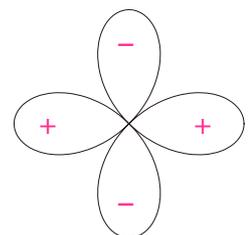
d波のsingletが発現

$$V_t(k - k') \sim -\frac{U^2}{2} \chi_s(k - k')$$

$$g_{A_{1g}} < g_{E_g}$$

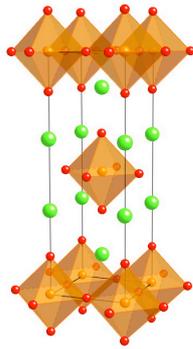


Fermi面のネスティング

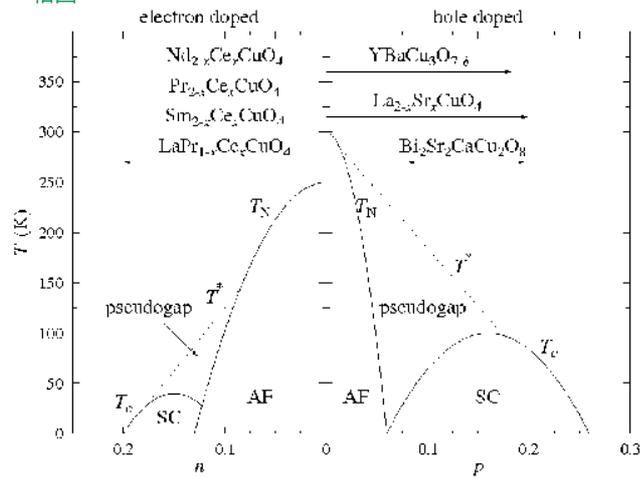


$\cos k_x - \cos k_y$

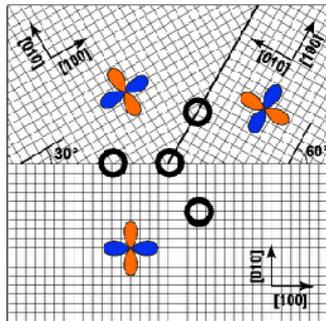
銅氧化物高温超伝導体



相図

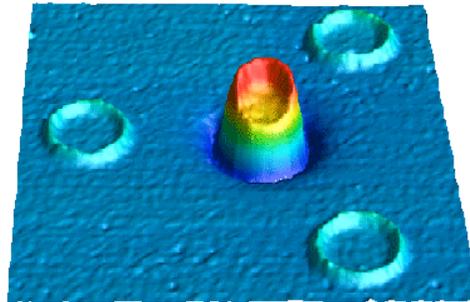


相対位相の検出



YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub>

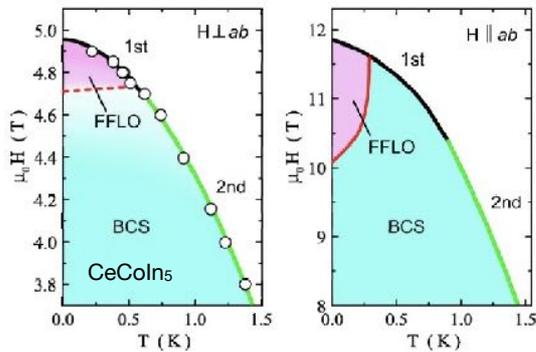
C.C. Tsuei et al. Phys. Rev. Lett. **75** (1994) 593.



- ・スピンの揺らぎ ( $J \sim 10^3$  K)
- ・擬2次元性

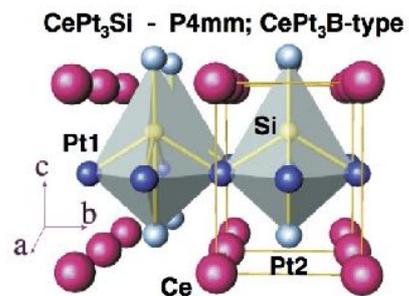
空間変調したペア

K. Kumagai et al.: J. Phys. Conf. Ser. **150** 052135 '09



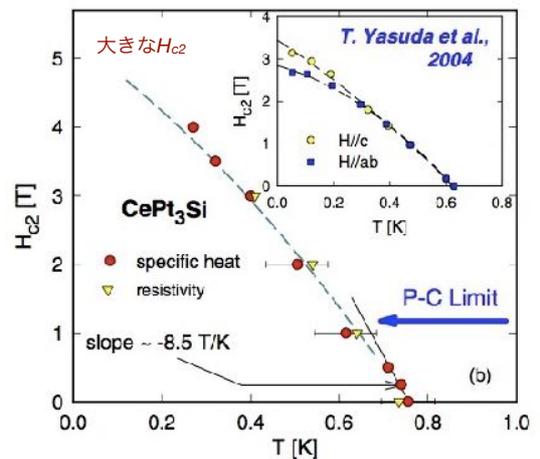
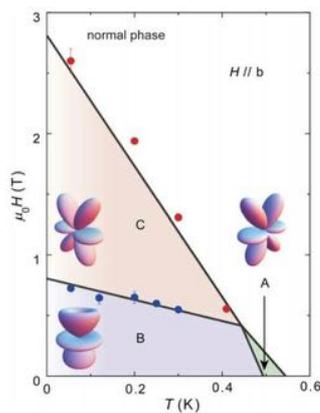
反転対称性がない系

E. Bauer et al.: JPSJ **76** 051009 '07



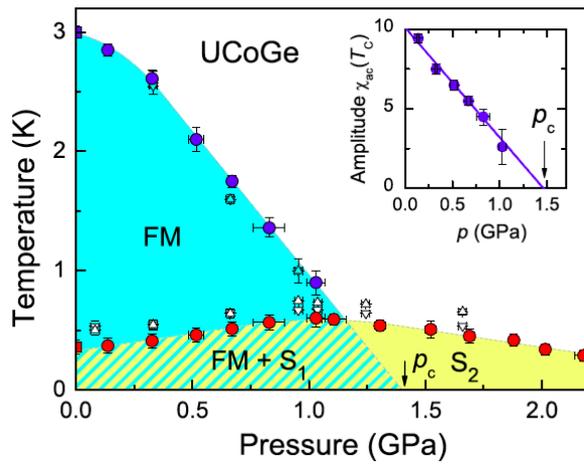
多重相図

Y. Machida et al.: Phys. Rev. Lett. **108** 157002 '12

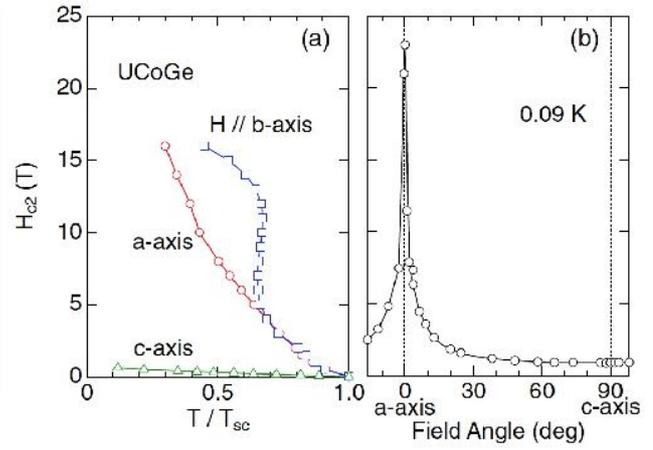


強磁性と共存する超伝導

E. Slooten et al. Phys. Rev. Lett. **103** (2009) 097003.



D. Aoki et al. J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 113709.



- ・異常な異方性
- ・自己誘起磁束格子状態
- ・平行スピンドル

# 電子相關效果

保存近似

# 揺らぎ交換近似 (FLuctuation EXchange : FLEX)

N.E. Bickers et al., PRL **62** (1989) 961.  
N.E. Bickers, D.J. Scalapino, Ann. Phys. **193** (1989) 206.

## Baym-Kadanoff 保存近似

G. Baym, L.P. Kadanoff, Phys. Rev. **124** (1961) 287.  
G. Baym, Phys. Rev. **127** (1962) 1391.

Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons  
(D. Senechal, A.-M. Tremblay, C. Bourbonnais, Springer)

エネルギー、運動量などの保存則を満たす近似法を構成するための一般的処方箋

任意の

Luttinger-Ward汎関数

Hubbard模型  $\Phi[G] =$

自己エネルギー

$$\Sigma[G] = \beta \frac{\delta \Phi}{\delta G}$$



Dyson方程式

既約バーテックス

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G$$

$$\Gamma^0 = \beta \frac{\delta \Sigma}{\delta G}$$



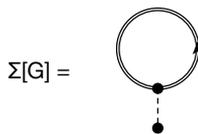
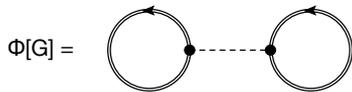
Bethe-Salpeter方程式

$$\chi = \chi_0 + \chi_0 \Gamma^0 \chi$$



近似LW汎関数に対して、自己エネルギー、既約バーテックスを求める。  
Dyson方程式とBethe-Salpeter方程式を解いて求めた  $G, \chi$  は保存則を満たす

RPA



$$\Gamma^0[G] = \bullet \text{---} \bullet$$

$$\Gamma_c^0 = U$$

$$\Gamma_s^0 = -U$$

$$\Gamma_e^{0p} = U$$

$$G(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k - U n/2}$$

$$\chi_c(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + U\chi_0(q)}$$

$$\chi_s(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - U\chi_0(q)}$$

$$\psi(q) = \frac{\psi_0(q)}{1 + U\psi_0(q)}$$

$$n_\sigma = \int_k G_\sigma(k) e^{i\omega_n 0_+}$$

$$\chi_0(q) = - \int_k G(k) G(k-q)$$

$$\psi_0(q) = \int_k G(k) G(q-k)$$

FLEX

$\Phi[G] =$  前ページに挙げたもの

cf. Renormalized RPA (RRPA)  
GW

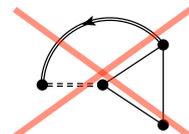
$$\Sigma(k) = \frac{U}{2} n + U^2 \int_q (\chi_c(q) + 3\chi_s(q) - 2\chi_0(q)) G(k-q) - U^2 \int_q (\psi(q) - \psi_0(q)) G(q-k)$$

$\Sigma[G], G$  を自己無撞着に決定し、 $\Gamma^0[G]$  に対するBS方程式を解いて、電荷、スピン、ペア感受率を求める

- 電子間の散乱効果が入り、転移温度は RPA よりも低く抑えられる
- 集団的な揺らぎのみ重視 (バーテックス補正を無視)



Migdal 近似

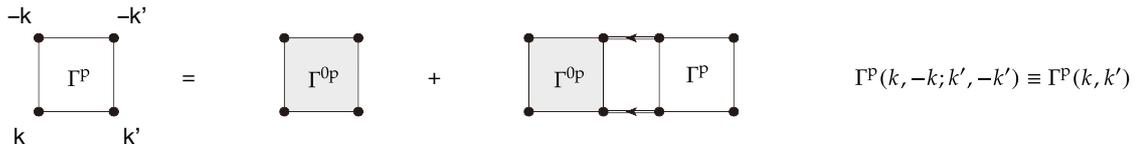


揺らぎによる引力が発達すると、超伝導相関にその影響を取り入れる必要がある

$$\bullet \text{---} \bullet \longrightarrow \Gamma^{0p}[G]$$

超伝導転移

Bethe-Salpeter 方程式 (Cooperチャンネル)



$$\Gamma^P(k, k') = \Gamma^{0P}(k, k') - \frac{1}{2} \int_{k''} \Gamma^{0P}(k, k'') |G(k'')|^2 \Gamma^P(k'', k')$$



転移点近傍では  $\Gamma^P$  が発散的に増大するので、右辺第1項を無視

$$\phi(k) \equiv \Gamma^P(k, k')$$

$$\lambda \phi(k) = \left[ -\frac{1}{2} \int_{k''} \Gamma^{0P}(k, k'') |G(k'')|^2 \right] \phi(k') \quad \lambda = 1 \text{ より転移点が決まる} \quad \text{線形化したギャップ方程式}$$

例：等方的引力  $\frac{1}{2} \Gamma_s^{0P}(k, k') = -V \quad \phi(k) = \Delta$

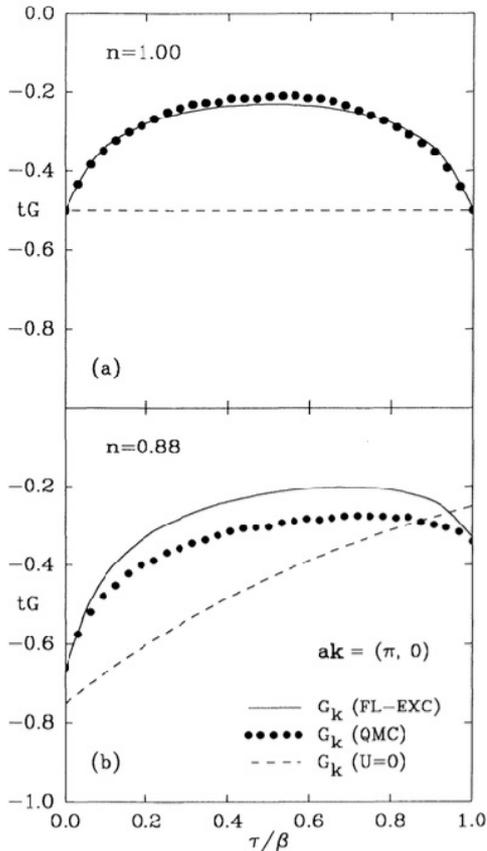
$$\Delta = VT \sum_{kn} \frac{\Delta}{\omega_n^2 + \xi_k^2} = \lambda \Delta \int d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{2\xi} \quad \text{BCSギャップ方程式}$$

例：反強磁性揺らぎ

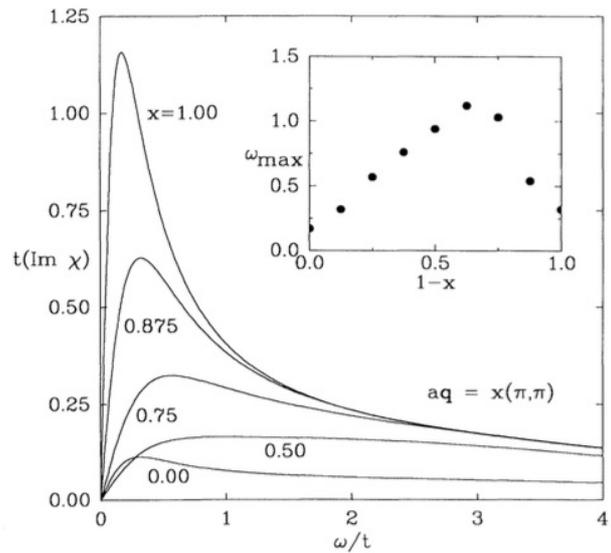
$$\frac{1}{2} \Gamma_s^{0P}(k, k') = -\frac{3U^2}{2} \chi_s(k - k') \quad \frac{1}{2} \Gamma_t^{0P}(k, k') = \frac{U^2}{2} \chi_s(k - k')$$

1体グリーン関数

N.E. Bickers et al., PRL 62 (1989) 961.

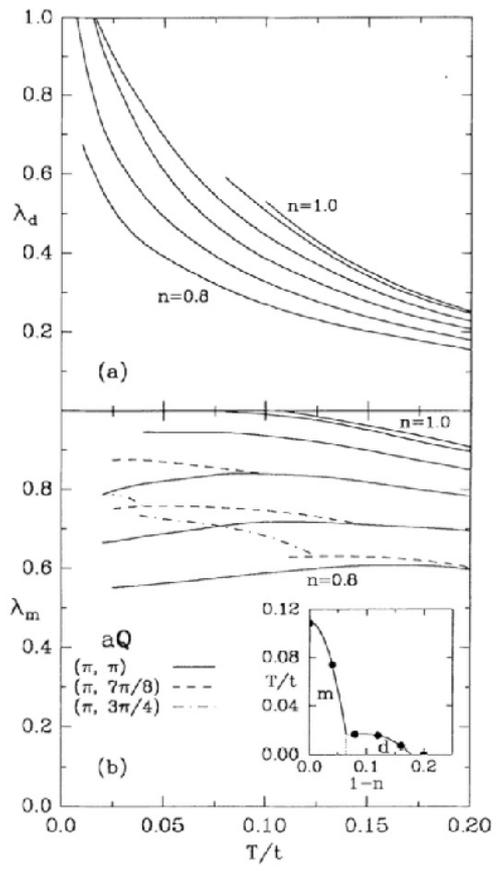


動的スピン感受率



正方格子Hubbard模型

線形ギャップ(BS)方程式の固有値

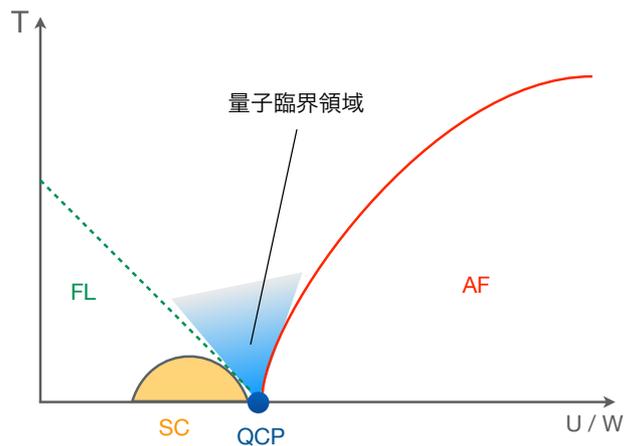


# 揺らぎの 自己無撞着理論

## 相転移の近傍

長距離揺らぎが発達

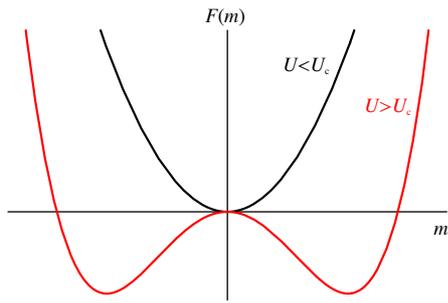
$T_c \sim 0$  近傍  
量子ゆらぎが発達



## 量子臨界点

- ・ Self-Consistent Renormalization (SCR) 理論 (温度依存性に非自明なベキ乗則)
- ・ Gaussian (平均場) 描像 → 古典臨界現象 クロスオーバー (モード・モード結合が重要)

秩序変数  $m$  に関する「自由エネルギー」の展開  $F(m) = \frac{1}{2}a(T)m^2 + um^4$



RPA (平均場)  $a(T) = \chi^{-1}(\mathbf{Q}, 0) = \chi_0^{-1}(\mathbf{Q}, 0) - U$

$$\implies U\chi_0(\mathbf{Q}, 0)\Big|_{T=T_c} = 1$$

$$\left( \begin{array}{l} F(m) = G(h(m)) + mh(m) \quad m = -\frac{\partial G}{\partial h} \\ \chi = -\frac{\partial^2 G}{\partial h^2} \quad \chi^{-1} = \frac{\partial^2 F}{\partial m^2} \end{array} \right)$$

転移点近傍では揺らぎが重要になるはず

GL-Wilson作用 揺らぎの効果を取り入れる

$$e^{-\beta F} = \int \mathcal{D}\varphi e^{-S[\varphi]} \quad \frac{1}{\beta}S[\varphi] = \frac{1}{2} \sum_q \chi^{-1}(q) |\varphi(q)|^2 + u \int dr \varphi^4(r)$$

$$r = (\mathbf{r}, \tau)$$

$$q = (\mathbf{q}, i\epsilon_m)$$

動的指数  $z=3$  (強磁性)

$z=2$  (反強磁性)

有効次元  $d+z$  の  
臨界現象に見える

$$\chi^{-1}(q) = \delta_0 + Aq^2 + \frac{|\epsilon_m|}{\Gamma_q} \quad \Gamma_q = \Gamma|q|^{z-2}$$

(1) 鞍点解 (最小作用、GL)  $\varphi(q) \sim \varphi(\mathbf{Q}, 0) \equiv m$

$$\delta_0 \equiv \chi_0^{-1}(\mathbf{Q}, 0) - U$$

(2) Gaussian近似 ( $u=0$ ) 自由エネルギーに調和振動の補正

cf. 臨界現象の  $\phi^4$  理論

(3)  $u$  摂動

$\delta_0 \rightarrow 0$  強い発散  $d \leq 4$  上部臨界次元 (揺らぎの重要性)

弱い発散  $d \leq 2$  下部臨界次元 (有限温度の相転移)

SCR 理論 守谷-川畑理論

= 準粒子 + 量子臨界揺らぎ

最良Gaussian近似 ( $T_c$ の繰り込み)

$$\chi^{-1}(q) \rightarrow \chi^{*-1}(q) = \delta + Aq^2 + \frac{|\epsilon_m|}{\Gamma_q} \quad \delta: \text{変分パラメータ}$$

Feynmanの変分法

$$F(\delta) = F_0 + \frac{1}{\beta} \langle S(\delta) - S_0 \rangle_0 \geq F_{\text{exact}}$$

$\Downarrow$   $S_0 =$  パラメータ  $\delta$  を用いた Gauss 部分

$$F(\delta) = \frac{1}{2} \int_q \ln \chi^{*-1}(q) + \frac{1}{2} \int_q (\delta_0 - \delta) \chi^*(q) + 3u \left( \int_q \chi^*(q) \right)^2$$

自己無撞着方程式  $\frac{\partial F}{\partial \delta} = 0 \implies \delta(T) = \delta_0 + 12u \int_q \chi^*(q)$

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \frac{\mathcal{D}\varphi e^{-S_0}(\dots)}{\mathcal{D}\varphi e^{-S_0}}$$

cf. Gauss積分

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ax^2/2} = a^{-1/2}$$

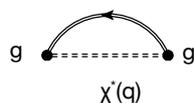
$$\langle x^2 \rangle = a^{-1}$$

$$\langle x^4 \rangle \sim 3 \langle x^2 \rangle^2$$

3次元、反強磁性 [量子臨界点:  $\delta(T=0)=0, T=0$ ]

$$\delta(T) \propto T^{3/2} \quad \text{非自明なべきの存在} \quad \text{cf. } \sim T \text{ (Curie則)}$$

電気抵抗

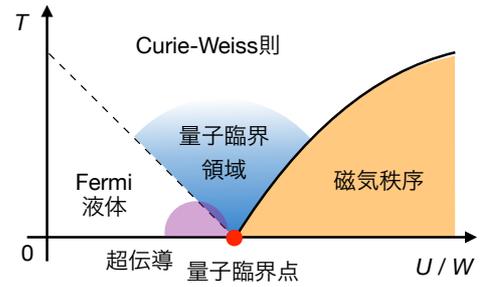


$$-\text{Im} \Sigma(k_F, \omega = 0) \propto g^2 T^{3/2}$$

cf.  $\sim T^2$  (Fermi液体)

量子臨界点  $\delta(0)=0$  における温度依存性

	強磁性 ( $Q=0$ )		反強磁性	
	3次元	2次元	3次元	2次元
$\delta, 1/\chi(\mathbf{Q},0)$	$T^{4/3}$	$-T \ln T$	$T^{3/2}$	$-T \ln  \ln T  / \ln T$
$C/T$	$-\ln T$	$T^{-1/3}$	$c-T^{1/2}$	$-\ln T$
$1/T_1$	$T\chi(\mathbf{Q},0)$	$T\chi^{3/2}(\mathbf{Q},0)$	$T\chi^{1/2}(\mathbf{Q},0)$	$T\chi(\mathbf{Q},0)$
$\rho$	$T^{5/3}$	$T^{4/3}$	$T^{3/2}$	$T$



$T=0$  量子臨界点のまわりの  $\delta(0)$  依存性 (常磁性相)

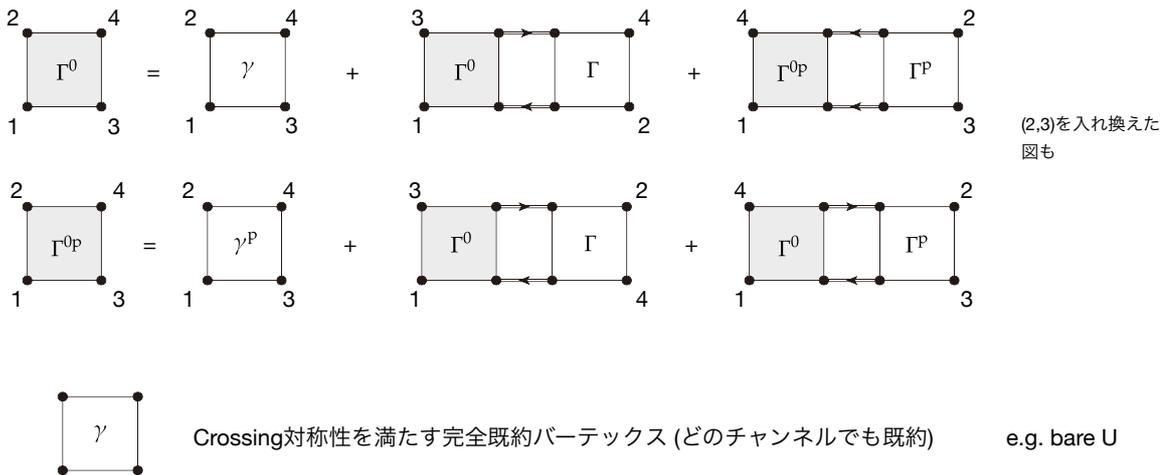
	強磁性 ( $Q=0$ )		反強磁性	
	3次元	2次元	3次元	2次元
$C/T$	$-\ln \delta$	$\delta^{1/2}$	$c-\delta^{1/2}$	$-\ln \delta$
$1/T_1$	$T\chi(\mathbf{Q},0)$	$T\chi^{3/2}(\mathbf{Q},0)$	$T\chi^{1/2}(\mathbf{Q},0)$	$T\chi(\mathbf{Q},0)$
$\rho$	$\delta^{1/2}$	$\delta$	$\delta^{1/2}$	$\delta$

微視的な自己無撞着揺らぎの理論

HK, JPSJ 79 (2010) 094707.

Parquet近似

Crossing対称性を満たすように、既約パーテックスを構成する方法



適当な  $\gamma$  から始めて、Parquet近似に従って既約パーテックス  $\Gamma^{(0)}$  を生成すると、結果的に得られる完全パーテックス  $\Gamma^{(0)}$  はCrossing対称性を満たす

Constant結合近似

BS方程式が解ける

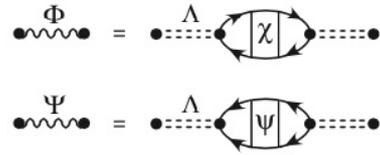
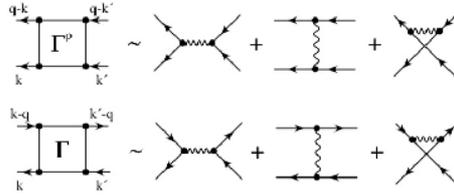
$$\Gamma_c(1,2;3,4) \sim \Lambda_c \quad \Gamma_s(1,2;3,4) \sim -\Lambda_s$$

$$\Gamma_e(1,2;3,4) \sim 2\Lambda_e \quad \Gamma_o(1,2;3,4) \sim 2\Lambda_o = 0$$

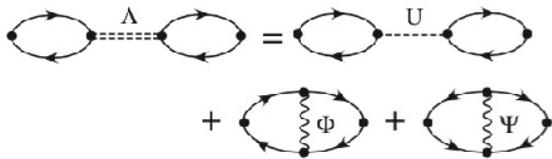
$$\chi_c(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + \Lambda_c \chi_0(q)} \quad \chi_s(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - \Lambda_s \chi_0(q)}$$

$$\psi_e(q) = \frac{\psi_0(q)}{1 + \Lambda_e \psi_0(q)}$$

Parquet方程式



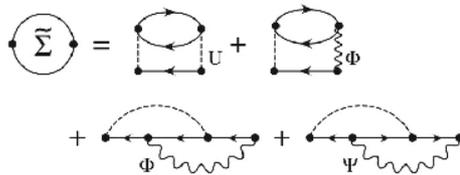
感受率



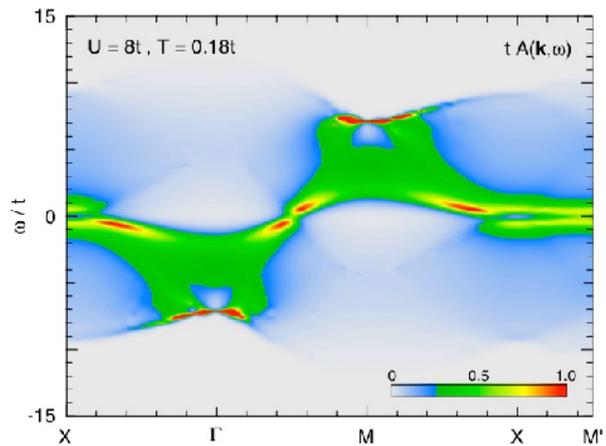
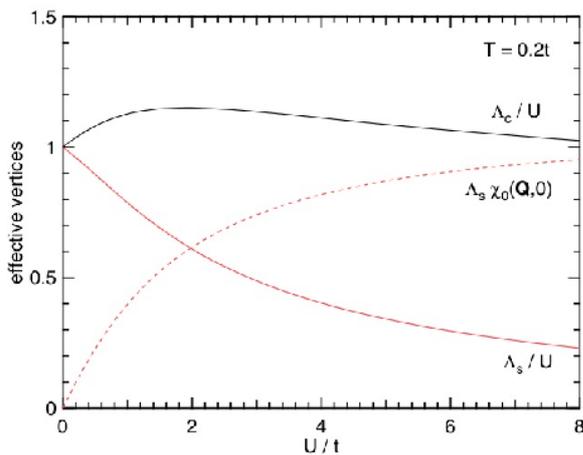
波数平均

Λに対する自己無撞着方程式

自己エネルギー



正方格子 Hubbard模型



- ・有限温度では反強磁性秩序は生じない (Mermin-Wagnerの定理) N.D. Mermin, H. Wagner, PRL 17 (1966) 1133.
- ・スピンチャンネルのバーテックスが抑制される

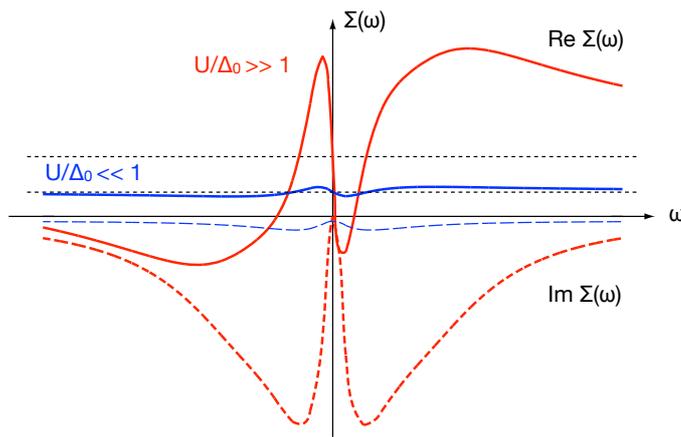
- ・上下部Hubbardバンド
- ・反強磁性揺らぎによる擬ギャップ

量子臨界点近傍では、SCRの臨界指数を再現する

# 動的平均場理論

## 強相関電子系の自己エネルギー

### 不純物Anderson模型



- ・強い振動数依存性 ( $z \ll 1$ )
- ・  $\text{Im } \Sigma(\omega) \sim -\omega^2$

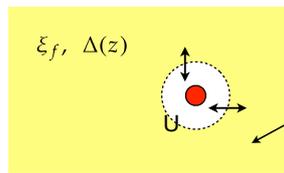
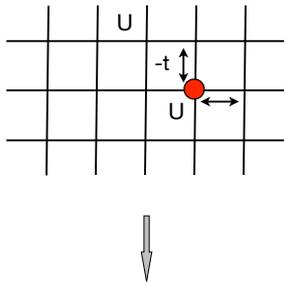
### Hubbard模型 (FL領域)

- ・強い振動数依存性 ( $z \ll 1$ )
- ・  $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \omega) \sim -\omega^2$
- ・弱い波数依存性 (局所的)  $\sim \varepsilon_F^*$  程度



第0近似として  
自己エネルギーの波数依存性を無視 (高温近似)

高次元ほど良い近似



格子系のグリーン関数  $G(k, z) = \frac{1}{z - \xi_k - \Sigma(\omega)}$

局所成分

$$G(z) = \frac{1}{N} \sum_k G(k, z) = \langle G(k, z) \rangle_k$$

$$\equiv \frac{1}{z - \xi_f - \Delta(z) - \Sigma(z)} = \frac{1}{\mathcal{G}^{-1}(z) - \Sigma(z)}$$

$\mathcal{G}(z)$   
cavity  
グリーン関数

有効媒質 (動的平均場)

$$\xi_f = \langle \xi_k \rangle_k$$

$$V^2 = \langle \xi_k^2 \rangle_k - \langle \xi_k \rangle_k^2 \sim W^2$$

有効不純物問題

$$H = \sum_{k\alpha} \xi_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \xi_f \sum_{\alpha} f_{\alpha}^\dagger f_{\alpha} + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\alpha} (V_k c_{k\alpha}^\dagger f_{\alpha} + \text{h.c.})$$

与えられた  $\xi, \Delta(\omega)$  から  $\Sigma(\omega)$  を求める (近藤問題の手法を活用)

有効不純物問題の解法

$$\xi_f, \Delta(z) \Rightarrow \Sigma(z)$$

- 数値繰り込み群 (NRG) R. Bulla et al.: RMP **80** 395 '08
- 数値対角化 A. Georges et al.: RMP **68** 13 '96
- 摂動論 (IPT) H. Kajueter et al.: PRB **53** 16214 '96; M. Potthoff et al.: PRB **55** 16132 '97
- 量子モンテカルロ (Hirsch-Fye QMC) W. von der Linden: Phys. Rep. **220** 53 '92
- 連続時間量子モンテカルロ (CT-QMC) E. Gull et al.: PMP **83** (2011) 349; HK & 大槻純也: 物性研究 **94** 404 '10
- 非交差自己無撞着近似 (NCA) Y. Kuramoto: Z. Phys. B **53** 37 '83; **57** 95 '84

不純物ソルバー：連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC)

E. Gull et al.: PMP **83** (2011) 349; HK & 大槻純也: 物性研究 **94** 404 '10

分配関数の U 展開  $\frac{Z}{Z_0} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \int \int \int_0^{\beta} d\tau_k \dots d\tau_1 P(q_k)$

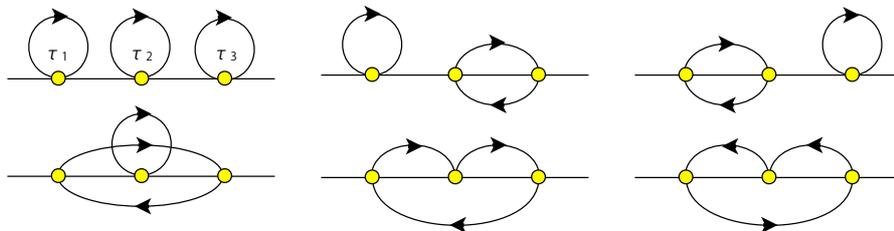
cf. 摂動展開の章

$$P(q_k) = (-U)^k \langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_k) n_{\downarrow}(\tau_k) \dots n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) \rangle_0 = (-U)^k \prod_{\sigma} \det \mathcal{G}_{\sigma}$$

摂動項をランダム・サンプリングする

$$\mathcal{G}_{\sigma}(\tau_i - \tau_j) \equiv (\mathcal{G}_{\sigma})_{ij} \quad \mathcal{G}_{\sigma}(z) = \frac{1}{z - \xi_f - \Delta(z)}$$

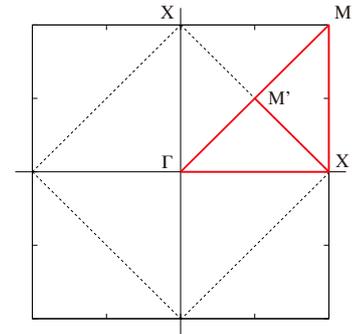
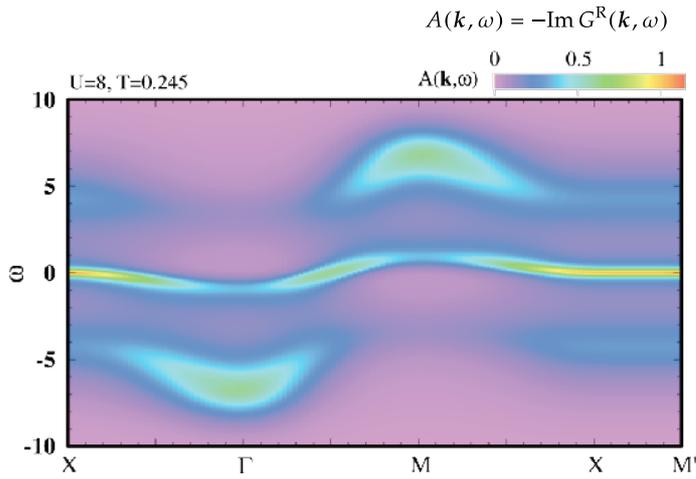
例: k=3の場合



グリーン関数

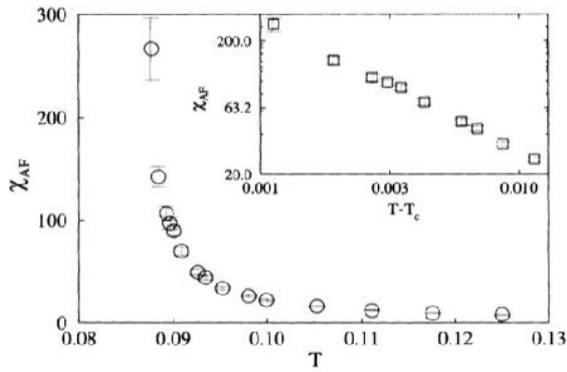
$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n) \left\langle T \sum_{ij} (\mathcal{G}_{\sigma}^{-1})_{ij} e^{i\omega_n(\tau_i - \tau_j)} \right\rangle_{MC} \mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)$$

2次元Hubbard模型 (n=1, U=8t) by IPT (逐次2次摂動)



- ・ 大まかな構造は、よく記述できる
- ・ 上下部Hubbardバンド
- ・ 準粒子バンド

cf. FLEX近似では上下部Hubbardバンドが記述できない



M. Jarrell, PRL **69** (1992) 168.

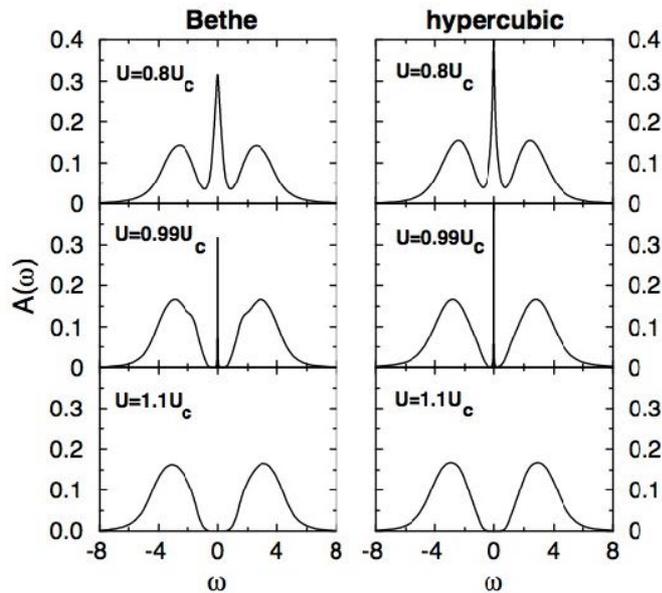
$$\chi_{AF} \propto (T - T_N)^{-1}$$

- ・ 平均場の臨界指数
- ・ 空間相関に関しては、平均場近似のレベル

金属絶縁体 (Mott)転移

R. Bulla, PRL **83** (1999) 136.  
A. Georges, W. Krauth, PRL **69** (1992) 1240.

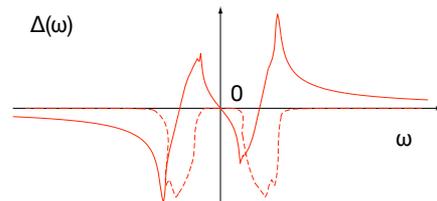
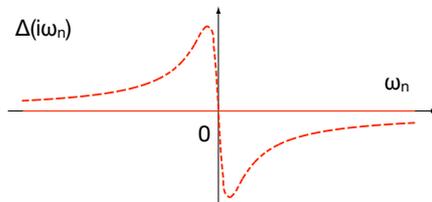
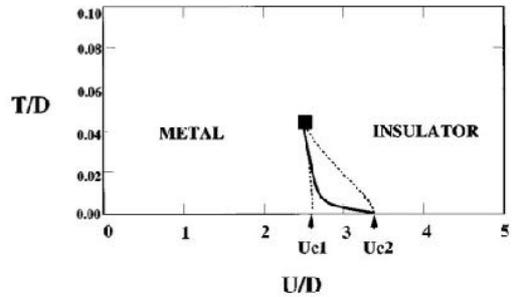
A. Georges et al., RMP **68** (1996) 13.



金属

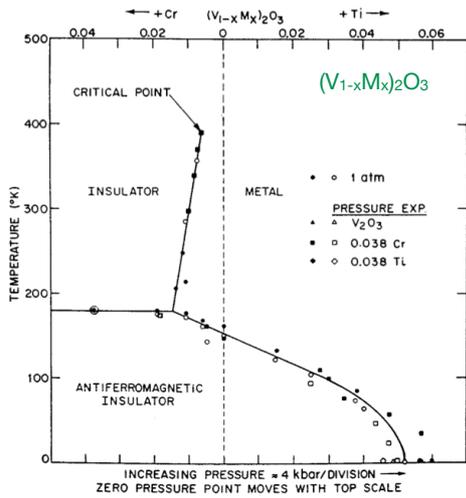


Mott  
絶縁体

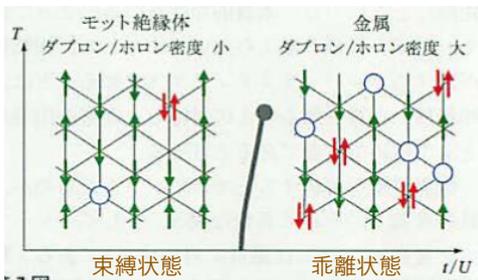


動的平均場では、Mott転移は  $\Delta(\omega=0)=0$  として表現される

Mott転移の臨界性



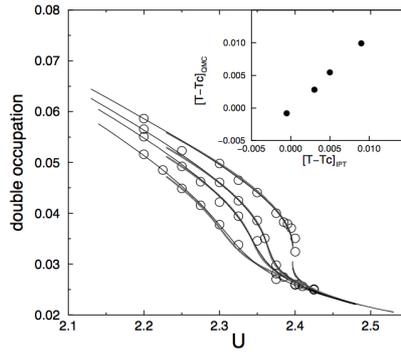
気体・液体転移との類似性



C. Castellani et al., PRL 43 (1979) 1957.

G. Kotliar et al., PRL 84 (2000) 5180.

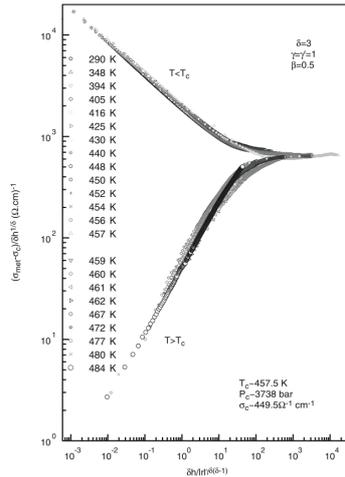
- 秩序変数 ~ 二重占有率
- 3D Isingの臨界指数 (気体・液体転移と同じ)



P. Limelette et al., Science 302 (2003) 89.

電気抵抗の圧力依存性  
ユニバーサルな振る舞い

3D Isingの臨界指数



自己エネルギーの  
波数依存性は重要では無いのか?

cf. κ-BEDT-Cl (有機化合物)  
磁気秩序

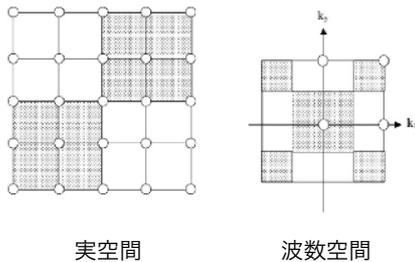
F. Kagawa et al., Nature 436 (2005) 534.

異なる臨界指数

空間相関を取り入れる試み

短距離相関 (クラスター)

$$k = K + p$$



T. Maier et al., RMP 77 (2005) 1027.  
倉本義夫, 清水幸弘, 固体物理 39 (2004) 417.

Dynamical Cluster Approximation (DCA)

$$G(K + p, z) = \frac{1}{z - \xi_{K+p} - \Sigma(K, z)}$$

$$G(K, z) = \frac{N_c}{N} \sum_p G(K + p, z)$$

有効クラスター問題

$$G^{-1}(K, z) = \mathcal{G}^{-1}(K, z) - \Sigma(K, z)$$

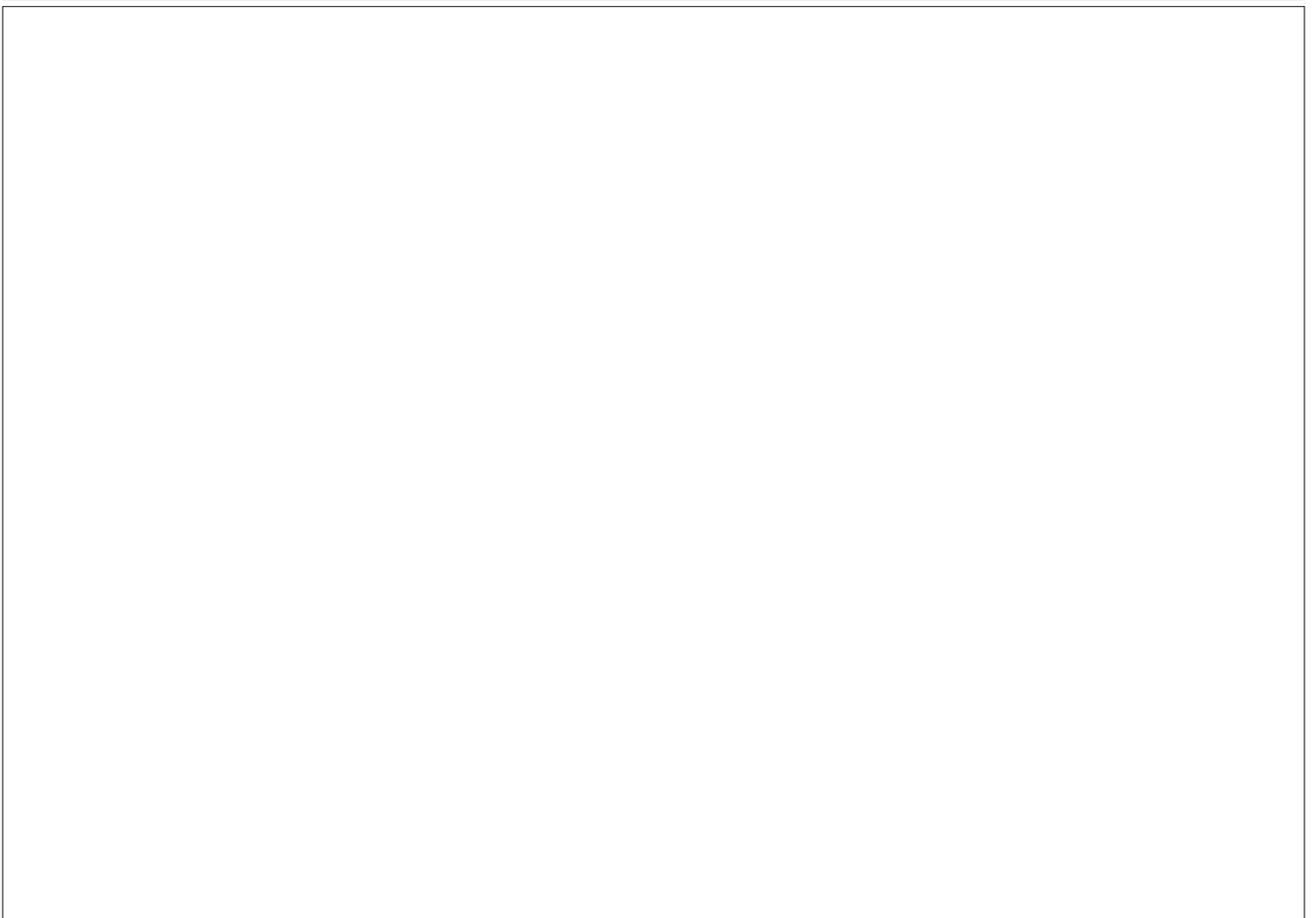
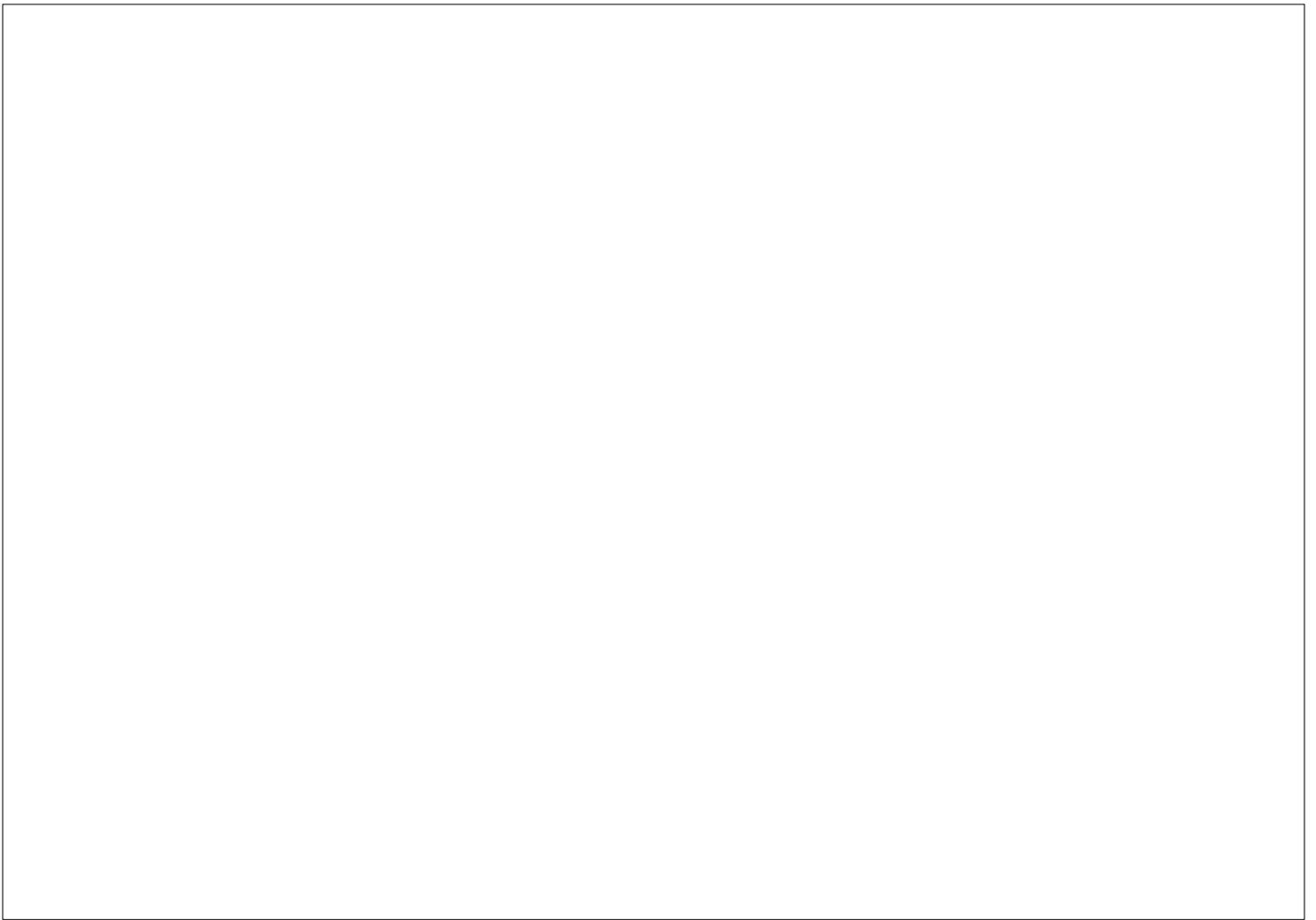
$$G(K, z) \rightarrow \Sigma(K, z)$$

- グリーン関数の解析性が保証される
- 格子の周期性が保たれる
- グリーン関数の波数依存性が不連続

長距離相関

動的平均場近似の結果を基にして、長距離相関をダイアグラム法を用いて取り込む

- 自己エネルギーの2体揺らぎによる表現を利用 HK, JPSJ 75 (2006) 054713.
- Parquet 近似を利用 (DΓA) A. Toschi et al., PRB 75 (2007) 045118; A.A. Katanin et al., PRB 80 (2009) 075104.
- 遍歴自由度を表す仮想的なFermi粒子を導入 (dual fermion) A.N. Rubtsov et al., PRB 77 (2008) 033101; 79 (2009) 045133.



## レポート課題

### 標準レベル

Q1.  $T=0$  における2次元自由電子系のLindhard関数を求めよ。 ヒント：B. Mihaila, arXiv:1111.5337

Q2. 自由Fermi粒子系の自由エネルギーは  $F = - \int_k \log(\xi_k - i\omega_n)$  より求めることができる。  
松原和を参照せよ。

Q3. s波超伝導状態の正常および異常グリーン関数  $G, F$  を次のように表す。係数  $A_k, B_k, C_k, D_k$  を求めよ。

$$G(\mathbf{k}, z) = \frac{A_k}{z - E_k} + \frac{B_k}{z + E_k} \quad F(\mathbf{k}, z) = \frac{C_k}{z - E_k} + \frac{D_k}{z + E_k} \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2} \quad \xi_k = \xi_{-k}$$

Q4. 講義において印象に残ったトピックスについて自分なりの感想を述べて下さい。

### 上級レベル

Q5. 強磁性状態におけるスピン波は長波長領域で  $\omega(q) = Dq^2$  と表される。RPA近似で係数  $D$  を求めよ。

ヒント：磁性物理学 守谷亨 (朝倉書店) 4.1章

Q6. s波超伝導状態に対して、次の感受率の表式を求めよ。 ヒント：コヒーレンス因子

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\epsilon_m) = - \int_k G(\mathbf{k}, i\omega_n) G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\epsilon_m)$$

締切：12月19日(金)までに、黒木先生に提出