

固体物理学 第4回

中島 貞雄

§ 5 Green 関数の摂動展開 (つづき)

次に、 $\langle T|\phi| \rangle_0$ をくり出したと同じような議論で connected graph をまとめることをやる。ひとつの n 次の connected graph を考えると、点の数は $2n$ 個であり、各々に積分変数 $x_1, x_2 \dots x_n, y_1 \dots y_n$ が対応している。ここで、これらの変数 (x_1, \dots, x_n) に或る permutation を行い、また y の方にも全く同じ permutation を行う。するとそのグラフは最初考えたグラフとは頂点の名前のつけ方が変わっただけで、積分してしまえば同じ寄与であるから本質的には同等なグラフである。同様に (x_i, y_i) のとりかえをしても同等なグラフになる。このタイプのおきかえの数は 2^n 、前のタイプのは $n!$ であり、結局同等なグラフの数は $2^n n!$ である。これらは全部同じと考えて区別しないことにし、どれか一つのグラフをとつて、そのグラフから permutation で得られるものは考えない。そして同等でないグラフを各々 $2^n n!$ 倍したものの和が n 次の寄与である。すると摂動展開の係数 $\frac{1}{2^n n!}$ がこれと cancel することがわかるが、とくに $n!$ がおとせることは重要である。

e) エネルギー-運動量表示

実際の計算には、座標時間表示よりもエネルギー-運動量表示の方が簡単である。まず自由電子のグリーン関数と二体力のポテンシャルを Fourier 展開する。グリーン関数は

$$G^{(0)}(x, x') = \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{V\beta} \sum_{\vec{p}} \sum_{\epsilon_n} G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon_n) e^{\frac{i}{\hbar}[\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}') - i\epsilon_n(t-t')]} \quad (41)$$

ただし、 $i\epsilon_n$ の imagenary frequency で $\epsilon_n = \frac{2\pi}{\beta} (n + \frac{1}{2})$ である。すると前に求めたように

$$G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon_n) = \frac{1}{i\epsilon_n - \epsilon_{\vec{p}}} \quad \text{ただし } \epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \mu \quad (42)$$

中島貞雄

またポテンシャルの展開

$$U(x, x') = v(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t')$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \cdot \delta(t - t') \quad (43)$$

で運動量表示のマトリックス要素 $v_{\vec{q}}$ を定義する。

(41), (43) の展開式をグリーン関数の摂動展開のある diagram に対応する項にほおりこむと、積分変数 $(x_1 \cdots x_n)$ は exponential の肩とデルタ関数に入っているだけだから積分を実行することが出来る。その結果、係数は別にして 電子線 --- には $G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon_n)$, 相互作用線 ~~~~ には $v_{\vec{q}}$ が対応する。(41), (43) から来る factor $\frac{1}{V \cdot \beta}$, $\frac{1}{V}$ の個数を考慮すると、 n 次のグラフでは $G^{(0)}$ が $(2n+1)$ 個、 v が n 個含まれるから、結果には $[V^{3n+1} \beta^{2n+1}]^{-1}$ がつくことになる。次に積分 $\int dx_1 dy_1 \cdots dy_n$ から出る factor 保存則を見る。

グラフの一部として図 6 を考える。 (p, ϵ, σ) と書いたのはその電子線の $G^{(0)}$ に入る argument である。するとこの部分に関する積分は次のようになる。

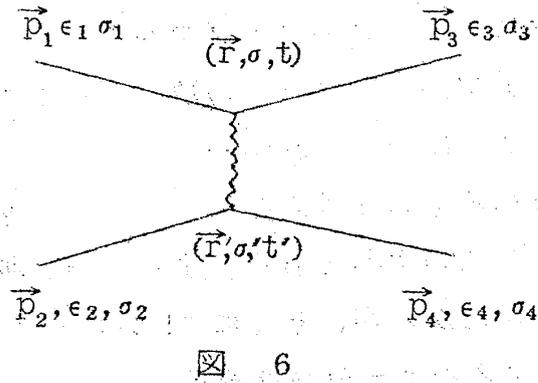


図 6

$$\sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \int_0^{-i\hbar\beta} dt \int_0^{-i\hbar\beta} dt' \delta_{\sigma_1\sigma} \delta_{\sigma\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma'} \delta_{\sigma'\sigma_4} \delta(t-t') e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \times$$

$$\times e^{-\frac{1}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_3) \cdot \vec{r} + \frac{1}{\hbar}(\epsilon_1 - \epsilon_3)t} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar}(\vec{p}_2 - \vec{p}_4) \cdot \vec{r}' + \frac{1}{\hbar}(\epsilon_2 - \epsilon_4)t'}$$

$$= V^2 \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} \delta_{\vec{p}_1, \vec{p}_3 + \vec{q}} \delta_{\vec{p}_2, \vec{p}_4 - \vec{q}} \cdot (i\hbar\beta) \cdot \delta_{\epsilon_1 + \epsilon_2, \epsilon_3 + \epsilon_4} \quad (44)$$

この結果から、エネルギー-運動量、スピンが保存されていることがわかり、 $V^2\beta$ の factor は n 次のグラフでは $[U^{2m} \beta^*]$ になり、前の (41), (43) 式の前の

係数から来る $[V^{3n+1}, \beta^{2n+1}]$ cancel させ、残る factor がわかる。また相互作用の入ったところを図式的に  として書けばすべての (つながつた) 次数

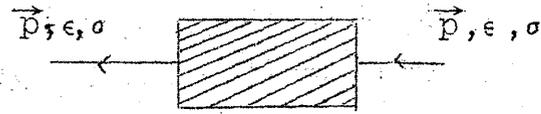


図 7

のグラフは図7のようになり、はじめと終りのエネルギー、運動量、スピンの保存が (44) のくり返しによつて出てくる。そのことから相互作用の入った exact なグリーン関数は Fourier 展開してエネルギー、運動量表示にすると (41) と同じように

$$G(x, x') = \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{V\beta} \sum_{\vec{p}} \sum_{\epsilon_n} G(\vec{p}, i\epsilon_n) e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}') - \epsilon_n(t-t')]} \quad (45)$$

となる。以上の考察から $G(\vec{p}, i\epsilon_n)$ の摂動展開の式を計算することができる。その計算規則は $G(x, x')$ の展開とほとんど同じであるが次に記す。

$$G(\vec{p}, i\epsilon_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \{n\text{ 次の connected graph からの寄与の和}\}$$

であり、 n 次のグラフに対する計算規則は、

- i) $2n$ 個の点をとる。(vertex) 一対ずつを  で結ぶ。(相互作用線)
- ii) $2n+1$ 本の (向きをつけた) 実線を引く。(電子線) うち一本はどこかの vertex から出るもの  で、もう一本はどこかの vertex に入るもの  であり、その他は必ず二つの vertex を結ぶようにする。
- iii) 電子線に $\vec{p}_i, \epsilon_i, \sigma_i$ を与える。相互作用線に \vec{q}_i を与える。但し各 vertex でエネルギー、運動量、スピンの保存するようにする。
 - (a) 独立なエネルギー、運動量ベクトルの数は (但し内線の) n であることがわかる。
 - (b) 外線と連続的に (電子線で) つながっている電子線が、外線と同じスピン σ で閉じた loop での各々のスピン σ' は独立。
- iv) (a) 電子線に $G^{(0)}(\vec{p}_i, i\epsilon_i)$ 、相互作用線に $v_{\vec{q}_i}$ を対応させてそれらの積を作り

中島貞雄

(b) 内線の独立なエネルギー-運動量について和をとる。その和は $\frac{1}{\beta} \sum_{\epsilon_1} \sum_{\sigma_1}$ の意味である。

(c) $(-1)^l (-1)^n$ をかける。或いは(b)で \sum をやめて 2^l をかけてもよい。但し l は閉じた loop の数である。

この規則によつて diagram の寄与が計算できるが、次に簡単な例を示す。

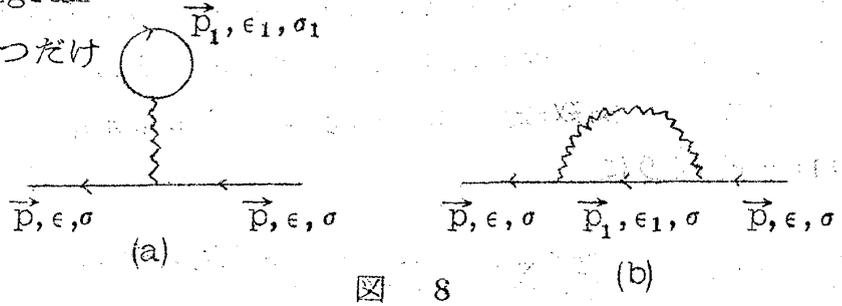
例 $n=1$ 1次の diagram

は図 8 の(a)と(b)の二つだけである。

各々の diagram

からの寄与は規則により次のよ

うになる。



$$\delta G^{(a)}(\vec{p}, \epsilon) = (-1)^2 \frac{2}{V\beta} \sum_{\vec{p}_1} \sum_{\epsilon_1} v_0 G^{(0)}(\vec{p}_1, i\epsilon_1) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \quad (46)$$

$$\delta G^{(b)}(\vec{p}, \epsilon) = (-1) \frac{1}{V\beta} \sum_{\vec{p}_1} \sum_{\epsilon_1} v_{\vec{p}_1 - \vec{p}} G^{(0)}(\vec{p}_1, i\epsilon_1) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \quad (47)$$

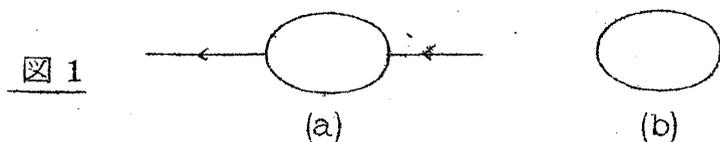
2次、3次と次数が増すにつれて複雑なグラフがたくさんできて、また式もあまり簡単でなくなる。具体的にそれらの計算をすることは後まわしにする。

§ 6 Formal Theory Justification of quasi-particle picture

摂動展開の結果の Green 関数からいろいろの結論を出すことができるが、LANDAU の quasiparticle の考え方を一般的に正当化するにはどうすればよいだろうかという問題がある。実際の金属についてこの問題に対して定量的に信用できる結果が導けるようには理論は未だなっていない。そこでこれから形式論で調べることにする。(実際、Green 関数は形式論に大いに役立つきたのである)

a) 自己エネルギー

Green 関数の摂動展開に出てくるグラフ



は図1 a)のように必ず二本の外線がついているが、その外線を取り去つたもの b) を self-energy 型 (自己エネルギー型) のグラフと呼ぶことにする。これにはもとのグラフに対応していろいろなタイプのものである。例えば $n=1$ では図2の2つであり、 $n=2$ の例を図3に示す。

図2

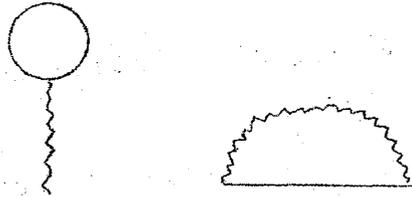
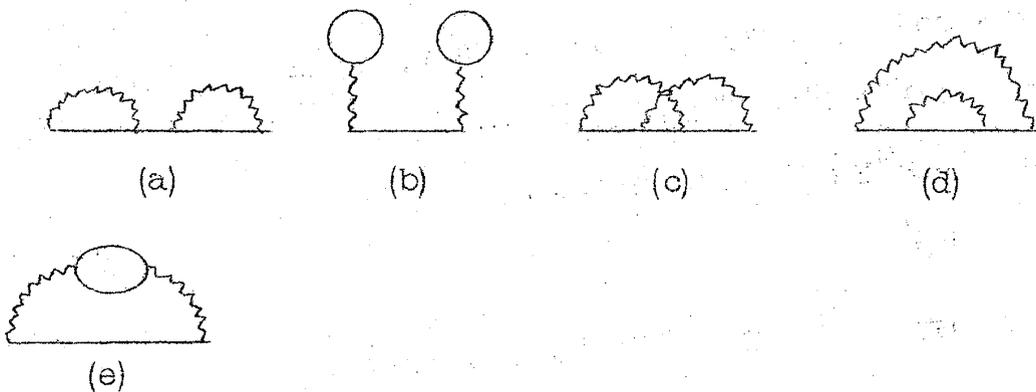


図3



これらを見れば、図3(a), (b)のように低次のもののくりかえしから成るグラフと本質的に新しいタイプの(c)以下のグラフとがあることがわかる。この区別はまた、(a), (b)は内線を一ヶ所切ると2つの connected でない部分にちぎれるが、(c)以下はつながつたままである、と言つてもよい。もつと高次のグラフでも同様に、

1. improper self-energy graph ... 前者・図3の(a), (b)など。
2. proper self-energy graph ... 後者・図3の(c), (d), (e)など。

の2つのタイプに分類できる。

これに従つて Green 関数の展開式で、和をとる順序をとりかえて、最初に proper self-energy part だけを含むグラフからの寄与の和を行い

中島貞雄

$$G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \Sigma(\vec{p}, i\epsilon) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \quad (1)$$

と書く。 $\Sigma(\vec{p}, i\epsilon)$ はこの式で定義してよい。 proper self-energy 型のグラフの和

$$\begin{aligned} \Sigma &= \text{[diagram: circle on wavy line]} + \text{[diagram: wavy line with loop]} + \text{[diagram: wavy line with two loops]} + \text{[diagram: wavy line with three loops]} + \text{[diagram: wavy line with four loops]} + \dots \\ &\equiv \text{[diagram: shaded circle]} \end{aligned} \quad (2)$$

で、"proper self-energy part" 或は簡単に "self-energy" と言ひ、(2) のように書く。

残りのものの和は更に2つの proper self-energy 型のグラフを含むものの和、3つの、4つか... のような順で行ひ、グラフ的に書けば

$$G = \text{[diagram: straight line]} + \text{[diagram: straight line with shaded circle]} + \text{[diagram: straight line with two shaded circles]} + \text{[diagram: straight line with three shaded circles]} + \dots \quad (3)$$

で、これを self-energy Σ をつかつて書き、 $G^{(0)} \Sigma$ でくくれば

$$\begin{aligned} G &= G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G^{(0)} \Sigma G^{(0)} + \dots \\ &= G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma \{ G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G^{(0)} + \dots \} \\ &= G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G \end{aligned} \quad (4)$$

または、この式から $G^{(0)}$ の explicit な形 [5-42] を使い

$$G(\vec{p}, i\epsilon) = \frac{1}{[G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon)]^{-1} - \Sigma(\vec{p}, i\epsilon)} = \frac{1}{i\epsilon - \epsilon_p - \Sigma(\vec{p}, i\epsilon)} \quad (5)$$

と書ける。(4)あるいは(5)から、 Σ の形がわかれば G が求まることになつたが、 G より Σ の方が確かに、余計なくりかえしが無いだけ、すこしは簡単である。また、前にした Green 関数のスペクトル表示を使うと、 Σ の解析性を示すことができる。結果のみ言へば、重要な性質は次のものである。

1) $\Sigma(\vec{p}, i\epsilon)$ は $G(\vec{p}, i\epsilon)$ と同じように、複素平面の上半面および下半面に解析接続できるが、それぞれは一般にはちがつた解析関数になる。

2) 実数軸に上下から近づくと

$$\Sigma(\vec{p}, x \pm i0^+) = a(\vec{p}, x) \mp ib(\vec{p}, x) \quad \text{但し } b(\vec{p}, x) \geq 0 \quad (6)$$

とあらわすことができ、とくにスペクトル関数は

$$\begin{aligned} I(\vec{p}, x) &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{1}{x - \epsilon_{\vec{p}} - a(\vec{p}, x) - ib(\vec{p}, x)} - \frac{1}{x - \epsilon_{\vec{p}} - a(\vec{p}, x) + ib(\vec{p}, x)} \right] \\ &= \frac{2\hbar b(\vec{p}, x)}{[x - \epsilon_{\vec{p}} - a(\vec{p}, x)]^2 + [b(\vec{p}, x)]^2} \end{aligned} \quad (7)$$

になる。a, bが定数であれば、これはローレンツ分布と同じ形で、そのことから直観的にaがエネルギーのずれ、bが寿命であるとみられる。

3) LANDAUのフェルミ流体理論の仮定は、準粒子のエネルギーがフェルミ面近くでは、寿命が長くなるのであつたが、そのことは例えば $b(\vec{p}, x)$ を摂動展開で計算してみればよく、二体相互作用のあるフェルミ粒子系では、 $|x|$ が小さいとき(つまり、フェルミ面近くのエネルギーで)

$$b(\vec{p}, x) \sim 0(x^2)$$

の程度の大きさで、前にPAULIのexclusion principleを使つて考えたのと本質的に同じことである。このことから励起エネルギーの小さいときには(7)式は

$$I(\vec{p}, x) \sim 2\pi\hbar \delta[x - \epsilon_{\vec{p}} - a(\vec{p}, x)] \quad (8)$$

と近似できる。デルタ関数のargumentが0になるとき、即ち

$$x - \epsilon_{\vec{p}} - a(\vec{p}, x) = 0 \quad (9)$$

の解を(uniqueであるとして) $x = E(\vec{p})$ とすれば $E(\vec{p})$ が小さいとき、スペクトル関数は $x = E(\vec{p})$ で鋭いピークをもつ。これは相互作用のないときと似た事情になつて、 $E(\vec{p})$ を準粒子の励起エネルギーと解釈することが許される。ただ、相互作用を入れたことにより、aだけエネルギーのずれが

中島貞雄

生じている。

もうすこし精密に、いろいろの性質が LANDAU の picture どれかどうかわかるには、これまでの直観的な議論では足りない。

b) 低温での熱力学的性質

LANDAU の picture に対して、例えば低温での熱力学的性質が準粒子で一般的にあらわされるかどうか問題になる。答は、摂動があてはまる場合には、準粒子の立場で解釈してよい。その証明をちゃんとしたのは、

LUTTINGER & WARD [Phys. Rev. 118 (60) 1417]

LUTTINGER [Phys. Rev. 119 (60) 1153]

で、きれいに Green 関数の性質が応用された。今からその概略を示す。

イ) 熱力学ポテンシャル Ω

温度、化学ポテンシャル (T, μ) の関数として熱力学ポテンシャル Ω がわかれば、熱力学的性質はみなこれから導き出される。 Ω は摂動展開の公式が形式的には書けていた。相互作用がないときの Ω_0 からのずれを $\Delta\Omega$ とすると

$$\Delta\Omega = \Omega - \Omega_0 \quad (10)$$

$$e^{-\beta\Delta\Omega} = \langle T \psi \rangle_0 \quad (11)$$

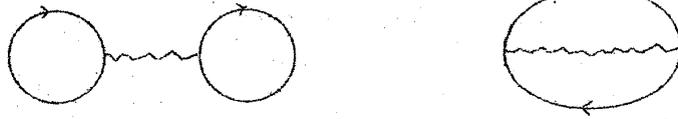
$$\text{但し } \Omega = \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \iint dx dy U(x-y) \psi^+(x) \psi(x) \psi(y)^+ \psi(y) \right\} \quad (12)$$

と書ける。 ψ などは相互作用表示をとっている。(11) の右辺を展開した n 次の項は

$$\frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{2\hbar}\right)^n \int \dots \int dx_1 dy_1 \dots dx_n dy_n U(x_1 - y_1) \dots U(x_n - y_n) \times \\ \times \langle T(\psi^+(x_1) \psi(x_2) \dots \psi(y_n)) \rangle_0 \quad (13)$$

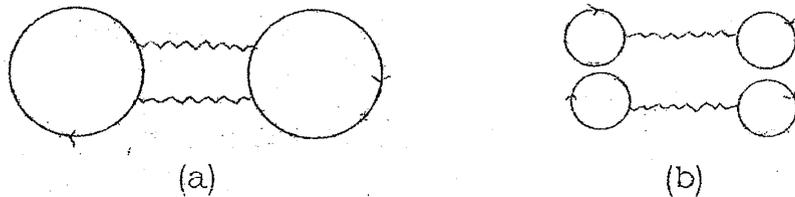
である。この $\langle T(\dots) \rangle_0$ を Wick の定理を使つて reduce すれば、外線の無い閉じたグラフの和になる。例えば $n=1$ では図4の2つである。

図 4



高次になると disconnected graph が出る。例えば $n=2$ の項のなかには図 5 の(a)のようにつながったグラフと(b)のようにつながっていないグラフがある。

図 5



今の場合には、Green 関数のときにしたように、分母と cancel すると言つて disconnected graph を除くことはできない。しかし求めたいのは (11) 式の左辺そのものでなく、 4Ω だから (11) 式の対数をとつたもので、それは

$$-\beta 4\Omega = \log \langle T\psi \rangle_0 = \langle T\psi \rangle_0 \text{ con} \quad (14)$$

であることが言える。その証明は、前によくしたように、積分変数のとりかえによつて寄与の変らないグラフの数を数えて、うまく組み合わせて和をとると、結局 exponential の肩に connected graph の和をのせたものになることを言えばよい。ここではやらないが、たとえばこの chapter の最初にあげた Abrikosov et al. の教科書に詳しくのつている。

計算規則は殆んど Green 関数と同じである。ただ実際の計算でちよつとちがひがある。各次数の項で factor がちがうことに注意しなければならない。その factor は

$$(-1)^{l+n+1} V \frac{1}{2n} \quad (15)$$

である。V は Ω が extensive な量であるから、入つてくるのは当然であるが、 $1/2n$ がつくことが重要である。 $1/2n$ は、(14) には外線を与え

中島貞雄

る $\Psi^+(x') \Psi(x)$ がいないため、同等なグラフの個数からくる factor が $2^{n-1} (n-1)!$ しか出ないので、 $1/2^n n!$ と cancel するときに残つたものである。この factor のおかげで ΔQ の計算はむづかしい。Green 関数では $1/2^n n!$ は全部消えてくれたために、部分和を先にやることなどができたのに対して、今は項の係数に次数が入ってくるおかげで単純な部分和ができない。

ロ) Q と G との一般的関係

Q の展開の和をとることは、そのような訳でむづかしいが、先ず Green 関数を求め、それを使つて適当な方法で Q を求めるようにするほうがやさしい。

具体的に Q の展開の $n=1$ の項は、図 4 の 2 つで、上にやつた計算規則か

$$\begin{aligned} \Delta Q^{(1)} = & (-1)^4 4 \cdot \frac{V}{2} \frac{1}{\beta^2 V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} v_0 G^{(0)}(\vec{p}_1, i\epsilon_1) G^{(0)}(\vec{p}_2, i\epsilon_2) \\ & + (-1)^3 2 \cdot \frac{V}{2} \frac{1}{\beta^2 V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} v_{\vec{p}_1 - \vec{p}_2} G^{(0)}(\vec{p}_1, i\epsilon_1) G^{(0)}(\vec{p}_2, i\epsilon_2) \end{aligned} \quad (16)$$

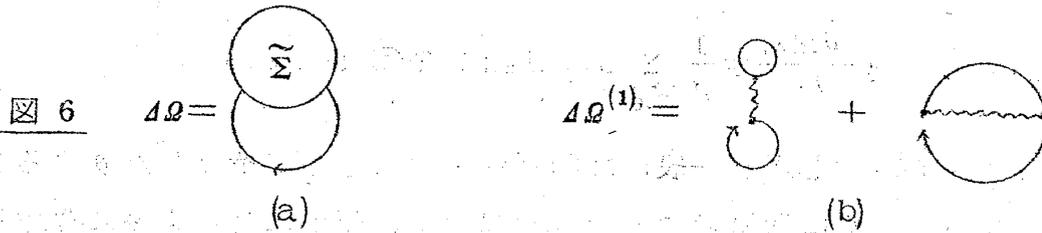
となるが、その図を見ると一部分は 1 次の self-energy のグラフになつてゐることがわかる。実際 (16) 式も

$$\Delta Q^{(1)} = 2V \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{p}_1, \epsilon_1} G^{(0)}(\vec{p}_1, i\epsilon_1) \Sigma^{(1)}(\vec{p}_1, i\epsilon_1) \quad (17)$$

と書くことができる。もつと高次の項でも同じように

$$\Delta Q^{(n)} = \frac{V}{2^n} \frac{2}{V\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \tilde{\Sigma}^{(n)}(\vec{p}, i\epsilon) \quad (18)$$

と書ける。 $\tilde{\Sigma}^{(n)}$ は n 次自己エネルギー型グラフからくる寄与の総和である。 \sim をつけたのは proper とは限らず improper なものも含むからである。(18) 式は図 6 の (a) に示され、(16), (17) 式は図 6 の (b) に示されている。



ここで $\tilde{\Sigma}$ は improper なものも含むから各次の総和をとるとき、proper なものから順に加えて

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \{ \tilde{\Sigma}^{(n)}(\vec{p}, i\epsilon) \} &= \Sigma(\vec{p}, i\epsilon) + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \Sigma(\vec{p}, i\epsilon) + \dots \\ &= \text{[Diagram: shaded circle]} + \text{[Diagram: shaded circle - line - shaded circle]} + \text{[Diagram: shaded circle - line - shaded circle - line - shaded circle]} \\ &= \Sigma(\vec{p}, i\epsilon) \frac{(i\epsilon - \epsilon_{\vec{p}})}{i\epsilon - \epsilon_{\vec{p}} - \Sigma(\vec{p}, i\epsilon)} \end{aligned} \quad (19)$$

となる。三行目の式への変形は(4)式を導いたときと同じことをやればわかる。(18)の各 n の総和は、これとちがって、単純ではない。 $1/2n$ の factor がじやまをしているので、これを消すことを考える。つまりかくすようなことをやる。いま、相互作用を λv ($0 \leq \lambda \leq 1$) として相互作用の大きさ λ を係数に出す。すると ΔQ は λ を λ^n で含むことになる。すなわち

$$\frac{1}{n} \tilde{\Sigma}^{(n)}(\vec{p}, i\epsilon; \lambda) = \int_0^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} \tilde{\Sigma}^{(n)}(\vec{p}, i\epsilon; \lambda') \quad (20)$$

とすることによつて、 n がかくれた。これにより、(19)を使つて

$$\begin{aligned} \Delta Q(\lambda) &= \sum_{n=1}^{\infty} \Delta Q^{(n)}(\lambda) = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon) \int_0^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{\Sigma}^{(n)}(\vec{p}, i\epsilon; \lambda') \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} \int_0^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} \frac{1}{(i\epsilon - \epsilon_{\vec{p}})} \cdot \frac{(i\epsilon - \epsilon_{\vec{p}}) \Sigma(\vec{p}, i\epsilon; \lambda')}{i\epsilon - \epsilon_{\vec{p}} - \Sigma(\vec{p}, i\epsilon; \lambda')} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} \int_0^{\lambda} \frac{d\lambda'}{\lambda'} G(\vec{p}, i\epsilon; \lambda') \Sigma(\vec{p}, i\epsilon; \lambda') \end{aligned} \quad (21)$$

中島貞雄

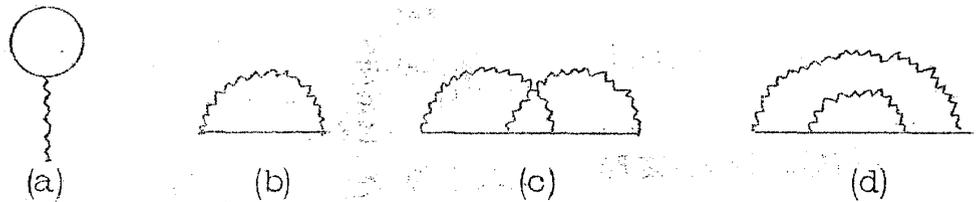
となるから、もし Σ , G が簡単な形であれば 4Ω を計算することができる。
 またはこの式を微分した形

$$\lambda \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} G(\vec{p}, i\epsilon; \lambda) \Sigma(\vec{p}, i\epsilon; \lambda) \quad (21')$$

でもよい。しかし一般には相互作用の大きさで積分したりすることは易しくない。とくに低温のことを扱う場合に、簡単になるように考えることにする。

field theory で言う skelton graph (又は compact graph) の考えを信じる。self-energy 型の diagram で内部電子線に self-energy 型 correction の入っていないものを compact と呼ぼう。例えば図7の (a), (b), (c) は compact で、(d) は compact ではない。

図7



すると、compact でないグラフは correction の入っていない line に correction をつけ加えてゆけばよいから、その和は compact なグラフの各 line を exact な Green 関数におきかえればよいことになる。すなわち self-energy part は

$$\Sigma(\vec{p}, i\epsilon) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \Sigma_C^{(\nu)}(\vec{p}, i\epsilon) \quad (22)$$

と書けるただし $\Sigma_C^{(\nu)}$ は ν 次の compact proper self-energy 型のグラフ $G^{(0)}$ (\longleftarrow) をすべて G (\longleftarrow) でおきかえたものである。例えば $\nu=1$ では図8のようになる。

図8

$\Sigma_C^{(1)}$



それを Ω についてやることにし

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{1}{\nu} G(\vec{p}, i\epsilon) \Sigma_C^{(\nu)}(\vec{p}, i\epsilon) = \Omega_0 \quad (23)$$

で Ω_0 を定義する。 Ω_0 は exact な Ω になつていればありがたいが、そうはなつていない。グラフで書けば

$$\Omega_0 = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots \quad (24)$$

である。そこで Ω_0 のもつ性質をみることにする。先ず

$$G = \frac{1}{i\epsilon - \epsilon_{\vec{p}} - \Sigma}$$

と書けることから Ω_0 はただ Σ の汎関数であると言える。その Σ に小さな変 $\delta\Sigma$ を与えたとき $\delta\Omega_0$ を見ることにする。(23) 或は (24) を見れば、実線 (---) に Σ がひとつずつ含まれているから、 ν 次では 2ν 個の Σ が入っており、その factor が出て

$$\begin{aligned} \delta\Omega_0 &= \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{2\nu}{\nu} \Sigma_C^{(\nu)} \delta G \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} 2G^2 \delta\Sigma \cdot \sum_{\nu=1}^{\infty} \Sigma_C^{(\nu)} \\ &= \frac{2}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} \delta\Sigma(\vec{p}, i\epsilon) \{G(\vec{p}, i\epsilon)\}^2 \Sigma(\vec{p}, i\epsilon) \end{aligned} \quad (25)$$

となる。二行目へは $\delta G = G^2 \delta\Sigma$ をつかい、三行目へは (22) で移つた。さて (25) の性質をつかつて Ω の (21) とは別の expression を考えることにする。 Ω' というものを

$$\begin{aligned} \Omega' &\equiv -\frac{2}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon_n} e^{i\epsilon_n \cdot \sigma t} \{ \log[\epsilon_{\vec{p}} + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n) - i\epsilon_n] + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n) G(\vec{p}, i\epsilon_n) \} \\ &\quad + \Omega_0 \end{aligned} \quad (26)$$

で定義する。ここで \log の branch は主値をとることに決めておく。

中島貞雄

そこで $\delta Q'$ を計算すると、 δQ_0 に (25) をつかつて

$$\begin{aligned} \delta Q' &= \delta Q_0 - \frac{2}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon_n} e^{i\epsilon_n \sigma^+} \{-G(\vec{p}, i\epsilon_n) \delta \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n) \\ &\quad + \delta \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n) G(\vec{p}, i\epsilon_n) + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n) G^2 \delta \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n)\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

となる。つまり Q' は Σ の汎関数とみて一次の変分が消えることに注意しよう。さてここまで来たら $Q' = Q$ であることの証明をする。相互作用の大きさ λ を再び登場させる。 λ は Σ の中と、 Q_0 の中にある explicit な v に入っている。そこで Q' を λ で微分すると Σ を通じてと v から explicit に来る λ' との微分になるが、(27) から Σ を通じたものは考えなくてよいことがわかるので

$$\lambda \frac{\partial Q'}{\partial \lambda} = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\nu}{\nu} G \Sigma_C^{(\nu)} = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} G(\vec{p}, \epsilon) \Sigma_C^{(\nu)}(\vec{p}, \epsilon) \quad (28)$$

となる。これは (21') と同じ形であり、 Q' は Q と同じ一次の微分方程式を満す。だから $Q' = Q$ を言うには λ の特定の値で等しいことが言えればよい。 $\lambda = 0$ で見ると

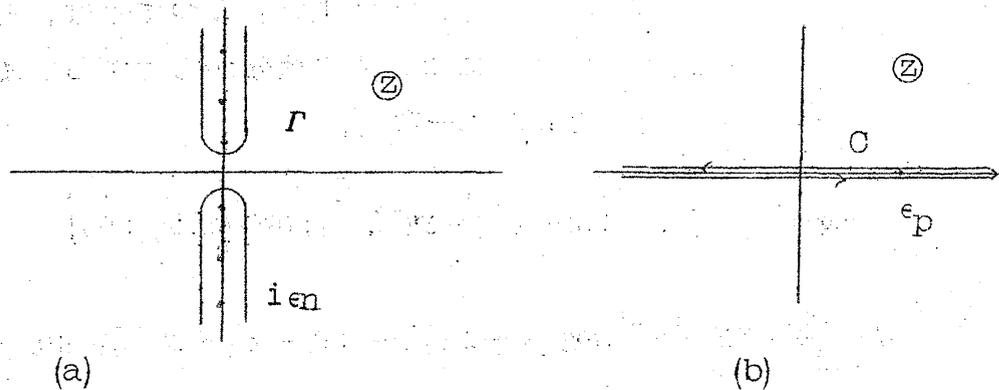
$$Q'(\lambda=0) = -\frac{2}{\beta} \sum_{\vec{p}, \epsilon} e^{i\epsilon_n \sigma^+} \log(\epsilon_{\vec{p}} - i\epsilon_n) \quad (29)$$

となるが、この場合に限らず discrete なエネルギーの和は複素積分になおる。fermi 分布関数 $f(z) = 1/[e^{\beta z} + 1]$ は $z = i\epsilon_n$ が一次の pole で residue は $-\frac{1}{\beta}$ であることに注意すると、図 9(a) の積分路 Γ をとれば

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\epsilon_n} e^{i\epsilon_n \sigma^+} \log(\epsilon_{\vec{p}} - i\epsilon_n) = \int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} f(z) e^{z \sigma^+} \log(\epsilon_{\vec{p}} - z) \quad (30)$$

となることがわかる。そして積分路を変えるのだが、 z が実数のとき、integrand は $e^{z \sigma^+}$ があるため $x \rightarrow -\infty$ で 0 になり、 $f(z)$ があるため $x \rightarrow +\infty$ で 0 になることに注意すると、積分路を図 9(b) の積分路 C に変えてよく

図 9



また

$$\frac{\partial}{\partial z} \log(1 + e^{-\beta z}) = \frac{-\beta e^{-\beta z}}{1 + e^{-\beta z}} = -\beta f(z)$$

を使つて部分積分して $z \rightarrow \pm \infty$ で消えることを使えば (30) 式は

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\beta} \int_C \frac{dz}{2\pi i} \log(\epsilon_p - z) e^{z\epsilon_p} \frac{\partial}{\partial z} \log(1 + e^{-\beta z}) \\ &= \frac{1}{\beta} \int_C \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{z - \epsilon_p} \log(1 + e^{-\beta z}) = \frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-\beta \epsilon_p}) \end{aligned} \quad (31)$$

になる。従つて (29) より

$$\Omega'(\lambda=0) = -\frac{2}{\beta} \sum_p \log(1 + e^{-\beta \epsilon_p}) \quad (32)$$

で、これはまさに前に書いた $\Omega(0)$ と同じものである。これで $\Omega(\lambda) = \Omega(\lambda)$ であることが言えた。(26) は任意温度で成立つ Ω の一般的表式であるが、 $T=0$ i.e. $\beta=\infty$ の limit では $\epsilon_n = \frac{2\pi}{\beta} (n + \frac{1}{2})$ は連続変数になつて、 $\frac{1}{\beta} \sum_{\epsilon_n}$ は積分 $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi}$ に移行する。低温での熱力学的性質を知るためには Ω の $T=0$ からのずれ、すなわち

$$\Delta\Omega = \Omega(T) - \Omega(0) \quad (33)$$

を知る必要がある。今 $\Omega(T)$ の温度依存性のうち、 Ω の函数形が温度によつて

中島貞雄

変る効果は、一次の補正を考える限り (27) によつて考慮しなくてよい。つまり $\Sigma(p, i\epsilon_n, T)$ の代りに $\Sigma(p, i\epsilon_n, 0)$ を使えばよい。よつて差は、有限温度での ϵ_n についての和と、 $T=0$ での ϵ についての積分から生ずる。まず Δ を両者の差をとる op. とすると、(26) の第一項は、

$$\begin{aligned} & \Delta \left(-\frac{2}{\beta} \Sigma e^{i\epsilon_n \sigma^+} \{ \log[\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n, 0) - i\epsilon_n] + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0) G(\vec{p}, i\epsilon_n; 0) \} \right) \\ &= -\left(\frac{1}{\beta} \Sigma_{\epsilon_n} - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon_n}{2\pi} \right) 2 \Sigma_p e^{i\epsilon_n \sigma^+} \{ \log[\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0) - i\epsilon_n] + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0) \frac{1}{i\epsilon - \epsilon_p - \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0)} \} \end{aligned} \quad (34)$$

となる。次に Ω_0 は、各電子線 $G(\text{---})$ に対して $\frac{1}{\beta} \Sigma_{\epsilon_n}$ があるが一次の補正を考える限り、そのうちの一本に対して Δ の operation を施し、他は有限温度に対して $\int \frac{d\epsilon}{2\pi}$ のまま計算する。 G^{ν} は 2ν 本の内部電子線をもつから Δ の operation により 2ν の factor がでて、これが (23) の分母にある ν と cancel して、(22) による和が可能になる。この結果 Ω_0 に対して、

$$\Delta \Omega_0 = \left(\frac{1}{\beta} \Sigma_n - \int \frac{d\epsilon_n}{2\pi} \right) \Sigma_p \frac{2\Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0)}{i\epsilon_n - \epsilon_p - \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0)} \quad (35)$$

となるが、これは (34) の最後の項と cancel して、(33) は

$$\Delta \Omega = -\left(\frac{1}{\beta} \Sigma_n - \int \frac{d\epsilon_n}{2\pi} \right) 2 \Sigma_p e^{i\epsilon_n \sigma^+} \log[\epsilon_p + \Sigma - i\epsilon_n] \quad (36)$$

となる。次に (3.24) によつて entropy を計算すると、温度依存性は和の部分だけにあるから、

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{2}{\beta} \Sigma_p \Sigma_{\epsilon_n} e^{i\epsilon_n \sigma^+} \log[\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, i\epsilon_n; 0) - i\epsilon_n] \right) \quad (37)$$

ここで (30) と同じ技巧で Σ_{ϵ_n} を複素積分になおすと、

$$S = \frac{\partial}{\partial T} 2 \Sigma_p \int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} f(z) e^{z\sigma^+} \log[\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, z; 0) - z]$$

$$= \frac{\partial}{\partial T} 2 \sum_{\vec{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} f(x) e^{x0^+} \log \left[\frac{\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, x - i0^+) - x}{\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, x + i0^+) - x} \right]$$

ここで温度は fermi 分布関数 $f(x)$ の中でのみ入っていることに注意すると、

$$\frac{\partial f(x)}{\partial T} = -\frac{x}{T} \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

であるから、

$$S = \frac{1}{2\pi i} \frac{2}{T} \sum_{\vec{p}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) x \log \left[\frac{\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, x - i0^+; 0) - x}{\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, x + i0^+; 0) - x} \right] \quad (38)$$

今 $\Sigma(\vec{p}, x \pm i0^+)$ は(6)のような形であるが、ここで a, b は $x=0$ で特異点をもたないと仮定する。(38)で

$$\phi(x) = \frac{1}{2\pi i} \log \frac{\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, x - i0^+) - x}{\epsilon_p + \Sigma(\vec{p}, x + i0^+) - x} = \frac{1}{2\pi i} \log \frac{x - \epsilon_p - a - ib}{x - \epsilon_p - a + ib} \quad (39)$$

とおくと、今の仮定から Sommerfeld の公式が使えて、(38)で

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) [x\phi(x)] &\cong [x\phi(x)]_{x=0} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 [x\phi(x)]'_{x=0} \\ &= \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \phi'(0) \end{aligned} \quad (40)$$

となる。

$$\phi'(x) = \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1 - \frac{\partial a(\vec{p}, x)}{\partial x} - i \frac{\partial b(\vec{p}, x)}{\partial x}}{x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x) - ib(\vec{p}, x)} - \frac{1 - \frac{\partial a(\vec{p}, x)}{\partial x} + i \frac{\partial b(\vec{p}, x)}{\partial x}}{x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x) + ib(\vec{p}, x)} \right\}$$

だが、 $x \rightarrow 0$ で $b(\vec{p}, x) \rightarrow 0$ だから

$$\phi'(x) = \left(1 - \frac{\partial a(\vec{p}, x)}{\partial x} \right) \delta(x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x)) \quad (41)$$

ここで $x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x) = 0$ が unique solution をもつと仮定し、これを $x = E(\vec{p})$ とかくと、

$$\int F(x) \delta(x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x)) dx = F(E(\vec{p})) \int \delta(x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x)) dx$$

$$= F(E(\vec{p})) \int \delta(y) \frac{1}{1 - \frac{\partial a(\vec{p}, x)}{\partial x}} dy = \frac{F(E(\vec{p}))}{1 - \frac{\partial a(\vec{p}, E(\vec{p}))}{\partial x}} \quad (42)$$

但し $y = x - \epsilon_p - a(\vec{p}, x)$ とおいた。(42)によつて、(41)は

$$\phi(x) \cong \delta(x - E(\vec{p})) \quad (41')$$

(33), (41')により

$$S = \frac{2}{T} \sum_{\vec{p}} \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \delta(-E(\vec{p})) = \frac{2\pi^2}{3} N_0^* k_B^2 T \quad (43)$$

$$\text{ここで } N_0^* = \sum_{\vec{p}} \delta(E(\vec{p})) \quad (44)$$

自由粒子の場合には、

$$S_f = \frac{2\pi^2}{3} N_0 k_B^2 T \quad (45)$$

$$N_0 = \sum_{\vec{p}} \delta(\epsilon_p) = \sum_{\vec{p}} \delta\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right) \quad (46)$$

であつたことを考えると、 $E(\vec{p})$, N_0^* をそれぞれ quasiparticle のスペクトル、状態密度と考えることができる。 S が x について、 $x=0$ で \ll すなを \gg 関数であれば $T \sim 0$ で $S \propto T$ が示される訳である。

上記の議論は liquid helium-3 とか jellium model の金属電子系に対して妥当するが、essential な点は G , S の \vec{p} 依存性でなく、 x 依存性なので、momentum がよい量子数にならない、周期ポテンシャルを入れた場合にも G , S が \vec{p} に関して matrix であることに注意すれば $S \propto T$ がやはりいえる。次に比熱は

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V, N} \quad (47)$$

で与えられる。 $\Omega = \Omega(T, \mu, V)$ だから、原理的には $N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T, V}$ によつて Ω をすれば μ を、 N であらわすことができる。しかし、 $\mu(T, N) = \mu(0, N) + O(T^2)$ だから、 $S \propto T$ の範囲で考える限り、独立変数は N でも μ でもよい。

$$C_V = \frac{2\pi^2}{3} N_0^* (\mu(0, N)) T \quad (48)$$

ここで (48) をこれ以上詳しくするには $\mu(0, N)$ をしらべる必要がある。今

$$\begin{aligned} G(\vec{p}, t-t') &= \langle a_{p\sigma}^+(t) a_{p\sigma}(t') \rangle \quad (t' > t) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_n G(\vec{p}, i\epsilon_n) e^{-i\epsilon_n(t-t')} \quad (t' > t) \end{aligned} \quad (49)$$

$t' > t$ で $t' \rightarrow t$ とすれば、 $G(\vec{p}, t-t') \rightarrow \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle$ だから、相互作用があらうとなかろうと、

$$N = 2 \sum_{\vec{p}} \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle = \frac{2}{\beta} \sum_{\vec{p}} \sum_{\epsilon_n} e^{i\epsilon_n 0^+} G(\vec{p}, i\epsilon_n) \quad (50)$$

$\beta \rightarrow \infty$ では

$$\begin{aligned} N &= 2 \sum_{\vec{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{i\epsilon 0^+} G(\vec{p}, i\epsilon; 0) \\ &= 2 \sum_{\vec{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{i\epsilon 0^+} i \left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} \log G(\vec{p}, i\epsilon) - G \frac{\partial \Sigma}{\partial \epsilon} \right] \end{aligned} \quad (51)$$

ここで (51) の才 2 項は 0 になることを示そう。(23) の Ω_0 を G の functional と考えて、変分をとると、

$$\delta \Omega_0 = 2 \sum_{\vec{p}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \sum \delta G \quad (52)$$

Ω_0 の energy variable に関する積分は $\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon$ の形で、エネルギー保存則は $\delta(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4)$ の形だから、 Ω_0 は積分変数を $\epsilon_j \rightarrow \epsilon_j + \epsilon_0$ に変えても不変である。つまりこのような変分を与えると、 $\delta \Omega_0 = 0$ だから、(52) は

中島貞雄

$$\begin{aligned}
 0 &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \sum \frac{\partial G}{\partial \epsilon} \\
 &= \frac{2}{2\pi} \sum_{\mathbf{p}} [\sum G]_{-\infty}^{\infty} - 2 \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} G \frac{\partial \Sigma}{\partial \epsilon}
 \end{aligned} \tag{53}$$

(53) の才1項は、energy がふえるにつれ kinetic energy がふえるため finite 又はへることを考えると 0 になる、従つて、(51) の才2項は 0 になる。(51)は

$$\begin{aligned}
 N &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \sum_{\epsilon_n} e^{i\epsilon_n 0^+} i \frac{\partial}{\partial \epsilon_n} \log G \\
 &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} e^{x 0^+} f(x) \frac{\partial}{\partial x} \log \left[\frac{G(\vec{p}, x - i 0^+)}{G(\vec{p}, x + i 0^+)} \right] \\
 &= -2 \sum_{\mathbf{p}} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} \frac{\partial f(x)}{\partial x} \log \frac{G(\vec{p}, x - i 0^+)}{G(\vec{p}, x + i 0^+)} \\
 &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2\pi i} \log \frac{G(\vec{p}, -i 0^+)}{G(\vec{p}, +i 0^+)} \\
 &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2\pi i} \log \frac{\epsilon_{\mathbf{p}} + a(\vec{p}, 0) + i 0^+}{\epsilon_{\mathbf{p}} + a(\vec{p}, 0) - i 0^+} \\
 &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \theta(-\epsilon_{\mathbf{p}} - a(\vec{p}, 0)) \\
 &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \theta\left(\mu - \frac{p^2}{2m} - a(\vec{p}, 0)\right)
 \end{aligned} \tag{54}$$

ここで log は主値をとつたため $\epsilon_{\mathbf{p}} + a(\vec{p}, 0)$ が負のときは phase のとびが残ることに注意せよ。free particle で同じ数を与えるとき、

$$N = 2 \sum_{\mathbf{p}} \theta(-\epsilon_{\mathbf{p}}) \tag{55}$$

(54), (55) で $N/2$ 項加えている訳だから、isotropic model のときは、

$$N = 2 \sum_{0 < p < p_0} 1 \tag{56}$$

$$\text{ここで } p_0 = \hbar \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{fermi momentum}) \quad (57)$$

(54)で fermi surface は $\epsilon_p + a(p, 0) = 0$ の根として与えられるが (56) により $p = p_0$ である。すなわち isotropic model では fermi surface は相互作用が入つても変らない。

$$0 = \epsilon_{p_0} + a(p_0, 0) = \frac{p_0^2}{2m} - \mu + a(p_0, 0) = \mu_0(0, N) - \mu(0, N) + a(p_0, 0)$$

により、free の場合の chemical potential μ_0 からのずれは、

$$\begin{aligned} \delta\mu &= \mu(0, N) - \mu_0(0, N) \equiv \mu(N) - \frac{p_0^2}{2m} \\ &= a(p_0, 0) = \Sigma(p_0, 0) \quad (\because b(p_0, 0) = 0) \end{aligned} \quad (58)$$

であり、密度が同じ場合の μ のずれをしるには $\Sigma(p_0, 0)$ を知ればよい。

$$G(p, \zeta) = \frac{1}{\zeta - \left(\frac{p^2}{2m} - \mu_0 \right) - (\Sigma(p, \zeta) - \Sigma(p_0, 0))} \quad (59)$$

とかけるから、 μ_0 を原点にして ϵ_p をはかれば、 $\Sigma(p_0, 0)$ を原点にして Σ をはかればよい訳である。

同様にして、spin 帯磁率をも論じうる。Green 関数法による、熱力学的性質に対する Landau の quasi-particle picture の正当化を以上で終る。

§ 7 外部からの摂動が加つた場合について

外部から、 \mathbf{r}, t がゆつくり変化する potential field $u(\mathbf{r}, t)$ が加つたとき perturbation hamiltonian は

$$H_{\text{ex}}(t) = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} u(\mathbf{r}, t) \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

とかくことができる。外場がないときの unperturbed hamiltonian を H_0

中島貞雄

とかくと、Neumann 方程式 (3.3)は、

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H} + H_{\text{ex}}(t), \rho(t)] \quad (2)$$

$t < t_0$ で $u(\mathbf{r}, t) = 0$, $t = t_0$ で系が熱平衡状態にあると、初期条件は、

$$\rho(t_0) = \rho_{\text{eq}} = e^{-\beta \mathcal{H}} / \text{Tr}(e^{-\beta \mathcal{H}}) \quad (3)$$

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} L(t) \rho_{\text{eq}} L(t)^{-1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \quad (4)$$

$$L(t_0) = 1 \quad (5)$$

とおくと、(2)は

$$\frac{\partial L(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_{\text{ex}}(t) L(t) \quad (6)$$

ここで $\mathcal{H}_{\text{ex}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} H_{\text{ex}}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}$ (相互作用表示) (7)

となる。以後 $t_0 \rightarrow -\infty$ とすると、(6)の形式解は、 T をWickの chronological operatorとして、

$$L(t) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \mathcal{H}_{\text{ex}}(t_1) dt_1 \right\} \quad (8)$$

であり、observable Q の時刻 t での統計平均は、

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_t &= \text{Tr} [\rho(t) Q] \\ &= \text{Tr} [\rho_{\text{eq}} L^{-1}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} Q e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} L(t)] \end{aligned}$$

以後 $Q(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} Q e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}$, $\langle Q \rangle = \text{Tr}(\rho_{\text{eq}} Q)$ とおくと、

$$\langle Q \rangle_t = \langle L^{-1}(t) Q(t) L(t) \rangle \quad (9)$$

外場の影響は $L(t)$ に入っているが、(9)は L が2つ入っているため、摂動展開は一般的に困難である。これを扱う方法として次のようなものが知られている。

方法1 KUBO formalism ... 外場が弱いとして、 \mathcal{H}_{ex} について1次の order だけを考える。

方法2 Kadanoff-Baym の方法 ... 複素時間軸で定義されていた温度グリーン関数を解析接続によつて実数時間軸にもつてゆき、温度グリーン関数に対する摂動展開にむすびつける方法。

まず方法1をのべると、

$$L(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \mathcal{H}_{ex}(t_1) dt_1 + O(\mathcal{H}_{ex}^2) \quad (10)$$

だから、 $\langle Q \rangle_t$ を外場に対して1次まで求めると、(9)により、

$$\langle Q \rangle_t = \langle Q \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \langle [Q(t), \mathcal{H}_{ex}(t_1)] \rangle \quad (\text{KUBO の公式}) \quad (11)$$

例として、 $Q = \hat{n}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ (12)

を考えると、

$$\begin{aligned} \Delta n(\mathbf{r}, t) &\equiv \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \int d\mathbf{r}_1 \langle [\hat{n}(\mathbf{r}, t), \hat{n}(\mathbf{r}_1, t_1)] \rangle u(\mathbf{r}_1, t_1) \\ &= \int_{-\infty}^t dt_1 \int d\mathbf{r}_1 \Pi^{(R)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) u(\mathbf{r}_1, t_1) \end{aligned} \quad (13)$$

ここで $\Pi^{(R)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t_1) \langle [\hat{n}(\mathbf{r}, t), \hat{n}(\mathbf{r}_1, t_1)] \rangle$ (14)

は retarded Green function とよばれ、この場合は外力のない系の性質によつて完全にきまる。外場について1次までの効果を求めるには $\Pi^{(R)}$ を計算すればよいわけだから、retarded Green 関数についての性質を簡単にのべておくことにする。

中島貞雄

$$I(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') = \langle [\hat{h}(\mathbf{r}, t), \hat{h}(\mathbf{r}; t')] \rangle \quad (15)$$

とおくと、(14)は、

$$\Pi^{(R)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') I(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') \quad (16)$$

とかけるが、平衡状態では(15)は $t-t'$ の関数だから、

$$I(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} I(\mathbf{r}, \mathbf{r}; x) e^{-\frac{i}{\hbar} x(t-t')} \quad (17)$$

ここで \mathcal{M} の diagonal 表示で(15), (16)をかき、両者の Fourier 逆変換を比較すると、

$$\Pi^{(R)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{\frac{i}{\hbar} \omega(t-t')} \Pi^{(R)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') \quad (18)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} \frac{I(\mathbf{r}, \mathbf{r}; x)}{\omega - x + i0^+} \quad (\text{分散公式}) \quad (18')$$

ただし(14)の $\hat{h}(\mathbf{r}, t)$ は外場がないばあいの Heisenberg 表示である。さて、 $-i\hbar\beta < t, t' < 0$ に対して、

$$\Pi(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') = -\frac{i}{\hbar} \langle T \hat{h}(\mathbf{r}, t) \hat{h}(\mathbf{r}; t') \rangle, \quad -i\hbar\beta < t, t' < 0 \quad (19)$$

とおくと、 \hat{h} は $\psi^+ \psi$ の形をしているから、 T で順序をかえるとき符号変化はおこらない。(19)の Fourier 展開は

$$\Pi(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}; t') = \frac{1}{\beta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}; i\nu_l) e^{-i\nu_l(t-t')} \quad (20)$$

$$\nu_l = \frac{2\pi}{\beta} l, \quad l=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (21)$$

で、 \mathcal{M} の diagonal な表示で(19), (17)をかき、両者の Fourier 逆変換を比較すると、

$$\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\nu_l) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} \frac{I(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; x)}{i\nu_l - x} \quad (22)$$

である。従つて $\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \nu_l)$ の実軸に上から近づく解析接続が (18) を与えることがわかる。(19) に対しては diagram technique が使えるから、この関係により retarded Green 関数の摂動展開も系統的に行うことができる。