

一次元電子系の多体問題

(1984年2月27日受理)

東工大・理 杉 山 忠 男

1次元電子系の多体問題を、専門外の人にも理解していただけるように、基礎的部分に限定し、できるかぎりわかりやすく、かつ、詳しく説明する。また、方法論の内部に含まれている問題点を明確にすると同時に、最近得られた結果にも言及する。

目 次

第1章 序論

§ 1.1 モデル・ハミルトニアン

第2章 くりこみ群の方法

§ 2.1 近藤モデルと1次元電子系

§ 2.2 アンダーソンのスケーリング則

§ 2.3 摂動計算にもとづかれたくりこみ群の定式化

§ 2.4 くりこみ点の移動によるくりこみ群の定式化

§ 2.5 リー方程式の解に含まれる摂動項

§ 2.6 近藤モデルの3次のくりこみと帯磁率

第3章 1次元電子系の理論

§ 3.1 1次元電子系におけるくりこみ群の方法

§ 3.2 くりこみ群の方法を用いた相関関数の計算

§ 3.3 ボゾン表示と位相ハミルトニアン

§ 3.4 フェルミーボーズ関係

§ 3.5 相関関数の位相表示

§ 3.6 ハミルトニアン H_0 に対するくりこみ群

§ 3.7 セルフコンシステント・ハーモニック近似

§ 3.8 $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 領域における相関関数のふるまい

§ 3.9 弱結合領域における相関関数のふるまいと基底状態の相図

第4章 1次元電子系の性質

§ 4.1 準1次元電子系のモデルとくりこみ群

§ 4.2 準1次元電子系の秩序形成と相転移

§ 4.3 2種類のゆらぎ間の競争

§ 4.4 準1次元電子系の秩序状態

§ 4.5 $4k_F$ - CDW 相関関数とウムクラップ散乱, 電気伝導度

§ 4.6 $2k_F$ - 周期ポテンシャル中で相互作用している1次元電子系

第5章 ベーテ仮説の方法

§ 5.1 ベーテ仮説

§ 5.2 S 行列とその因子化条件

§ 5.3 周期境界条件とヤンの解

§ 5.4 ヤン・ゴードンモデルのエネルギー

第1章 序 論

ここで述べる1次元電子系の多体問題とは、1次元の自由電子模型をもとにし、電子間に種々の2体の接触型相互作用をもつ系の多体問題である。自由電子模型をもとにした多体問題としては、3次元の超伝導を記述するBCSハミルトニアンを用いたものなどがあるが、それらにくらべると自由度が落されており、厳密に場の方程式を解こうとする立場からすると、問題は易しくなっている。しかし、以下で述べるように、1次元電子系の多体問題では、平均場近似が使えないという意味で、問題は難しくなり、かつ、興味深いものとなる。

1次元電子系の多体問題で、特に興味深い点は次のようなものである。第1は、接触型相互作用をする1次元電子系では、比較的溫度が高いときに、相転移の起きやすい不安定な状態になるにもかかわらず、有限溫度で相転移が起きないため¹⁾、ゆらぎが大きく、このゆらぎを扱うための理論を構成する問題である。従来の3次元系で用いられてきた平均場近似では、この大きなゆらぎをうまく扱うことはできない。そのため、新しい方法論を考え出す必要がある。第2は、1次元電子系では、フェルミ面が2点で与えられるため、従来の2次元系または3次元系でも可能な超伝導秩序(ゆらぎ)が形成され得るほか、電荷密度波、あるいは、スピン密度波の秩序(ゆらぎ)の形成が、ネスティング条件が満たされるため可能になる。特に、電荷密度波の秩序が形成されると、パイエルス転移を起こし、金属から絶縁体へ転移する。そこで、

これらいくつかの秩序,あるいは,ゆらぎ間の関係を明確にすることが問題となる。さらに,これらの理論から得られる予測が,1次元的と思われる物質(TTF・TCNQ,(TMTSF)₂・X,MX₃など)の中で,どのように実現されるかを,実験結果との比較から調べることも興味深い²⁾。

ゆらぎの大きな1次元電子系の多体問題を考えるために,これまでに開発されてきた理論には,くりこみ群の方法とボゾン表示の方法がある。くりこみ群の方法は次のようなものである。電子が2体の接触型相互作用をする1次元電子系を,フェルミ演算子のまま,電子間相互作用を摂動項として展開すると,エネルギー零,すなわち,絶対零度での対数発散が現われる。この対数発散をうまくくりこむことにより,低温での系の振舞いを調べる。一方,ボゾン表示の方法は,フェルミ演算子をボーズ演算子で書きかえることにより,低温での系の性質を調べやすくするものである。

§ 1.1 モデル・ハミルトニアン

1次元電子系の多体問題を考えるためのモデル・ハミルトニアンについて述べる。1次元の鎖の中を電子が動く自由電子模型をとると,その分散関係は,図1.1(a)である。いま,フェルミ面近傍の電子が重要な働きをすることを考えて,分散関係を $k > 0$ の部分と $k < 0$ の部分に分離し,図1.1(b)のように直線で近似する。バンド幅 $2D$ に対応する切断を k_0 ,すなわち, $D = v_F k_0$,(v_F :フェルミ速度),とする。このとき,電子の運動エネルギーを表わすハミルトニアンは

$$H_0 = \sum_{k,\alpha} v_F (k - k_F) a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \sum_{k,\alpha} v_F (-k - k_F) b_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha}, \quad (1.1)$$

と書ける。ここで, k_F をフェルミ波数として, $+k_F$ 近傍の電子でスピン α をもつ電子の演算子を, $a_{k\alpha}^\dagger, a_{k\alpha}$ で, $-k_F$ 近傍の電子でスピン α をもつ電子の演算子を, $b_{k\alpha}^\dagger, b_{k\alpha}$ で表わした。

電子間の相互作用としては,まず,斥力として働くクーロン相互作用と,引力として働く格子振動を媒介にした相互作用が考えられる。クーロン相互作用は,クーロン力をフーリエ変換すれば, $\sim 1/q^2$,(q :相互作用する2電子間でやりとりされる運動量(momentum transfer))となるので, $q = 0$ で相互作用の強さは最大となる。他方,格子振動を媒介にした相互作用は, $q \approx 2k_F$ でその強さが最大となる。その他,格子が波数 $4k_F$ で周期的に並んでいるとき,反転過程が重要な働きをする。反転過程は,相互作用をする2電子の運動量が, $+k_F$ 近傍から $-k_F$ 近傍へ,または,その逆へ移るものである。

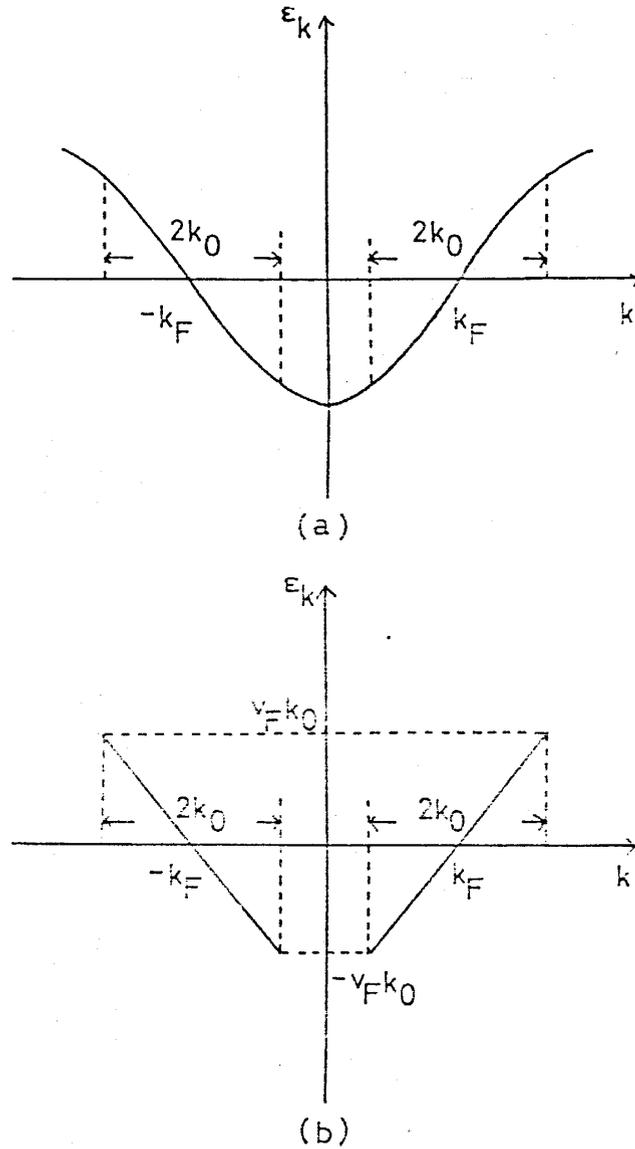


図 1.1 : 1 次元電子系の (a) 自由電子模型における分散関係と (b) 摂動計算で用いられる線形化された分散関係。

これらの相互作用は、2 体の相互作用なので、その行列要素は、入射する 2 電子の運動量 k_1, k_2 と、散乱された 2 電子の運動量 k_3, k_4 に依存する。それらを一般的に $g(k_1, k_2, k_3, k_4)$ と書き、次の 4 つの類に分ける。

$$g_1(k_1, k_2, k_3, k_4) \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_1, k_3) \leq -k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_2, k_4) \leq k_F + k_0, \\ \text{または} \end{array} \right. \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_2, k_4) \leq -k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_1, k_3) \leq k_F + k_0, \end{array} \right. \\
 \\
 g_2(k_1, k_2, k_3, k_4) & \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_1, k_4) \leq -k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_2, k_3) \leq k_F + k_0, \\ \text{または} \\ -k_F - k_0 \leq (k_2, k_3) \leq k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_1, k_4) \leq k_F + k_0, \end{array} \right. \quad (1.3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_1, k_2) \leq -k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \\ \text{または} \\ -k_F - k_0 \leq (k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \end{array} \right. \\
 g_3(k_1, k_2, k_3, k_4) & \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_1, k_2) \leq -k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \\ \text{または} \\ -k_F - k_0 \leq (k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \\ k_F - k_0 \leq (k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \end{array} \right. \quad (1.4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_1, k_2, k_3, k_4) \leq -k_F + k_0, \\ \text{または} \\ k_F - k_0 \leq (k_1, k_2, k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \end{array} \right. \\
 g_4(k_1, k_2, k_3, k_4) & \left\{ \begin{array}{l} -k_F - k_0 \leq (k_1, k_2, k_3, k_4) \leq -k_F + k_0, \\ \text{または} \\ k_F - k_0 \leq (k_1, k_2, k_3, k_4) \leq k_F + k_0, \end{array} \right. \quad (1.5)
 \end{aligned}$$

これらの相互作用をファインマン・ダイアグラムで表わせば、図1.2のようになる。また、これらの相互作用の強さを、外線の運動量に依存しないと近似して、スピンの依存した一般的な相互作用ハミルトニアンを次のように書く³⁾。

$$\begin{aligned}
 H_{\text{int}} = & \frac{1}{L} \sum_{\substack{k_1, k_2, p \\ \alpha, \beta}} (g_1^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_1^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) a_{k_1\alpha}^{\dagger} b_{k_2\beta}^{\dagger} a_{k_2+2k_F+p, \beta} b_{k_1-2k_F-p, \alpha} \\
 & + \frac{1}{L} \sum_{\substack{k_1, k_2, p \\ \alpha, \beta}} (g_2^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_2^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) a_{k_1\alpha}^{\dagger} b_{k_2\beta}^{\dagger} b_{k_2+p, \beta} a_{k_1-p, \alpha} \\
 & + \frac{1}{2L} \sum_{\substack{k_1, k_2, p \\ \alpha, \beta}} (g_3^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_3^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) (a_{k_1\alpha}^{\dagger} a_{k_2\beta}^{\dagger} b_{k_2-2k_F+p, \beta} b_{k_1+2k_F-p-G, \alpha} \\
 & \quad + b_{k_1\alpha}^{\dagger} b_{k_2\beta}^{\dagger} a_{k_2+2k_F+p, \beta} a_{k_1-2k_F-p+G, \alpha}) \\
 & + \frac{1}{2L} \sum_{\substack{k_1, k_2, p \\ \alpha, \beta}} (g_4^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_4^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) (a_{k_1\alpha}^{\dagger} a_{k_2\beta}^{\dagger} a_{k_2+p, \beta} a_{k_1-p, \alpha} \\
 & \quad + b_{k_1\alpha}^{\dagger} b_{k_2\beta}^{\dagger} b_{k_2+p, \beta} b_{k_1-p, \alpha}) . \tag{1.6}
 \end{aligned}$$

ここで、 L は系の長さであり、 G は、格子が波数 $4k_F$ の周期で並んでいるとき、 $G = 4k_F$ である。また、 α, β は、 \uparrow または \downarrow のスピンを表わす。

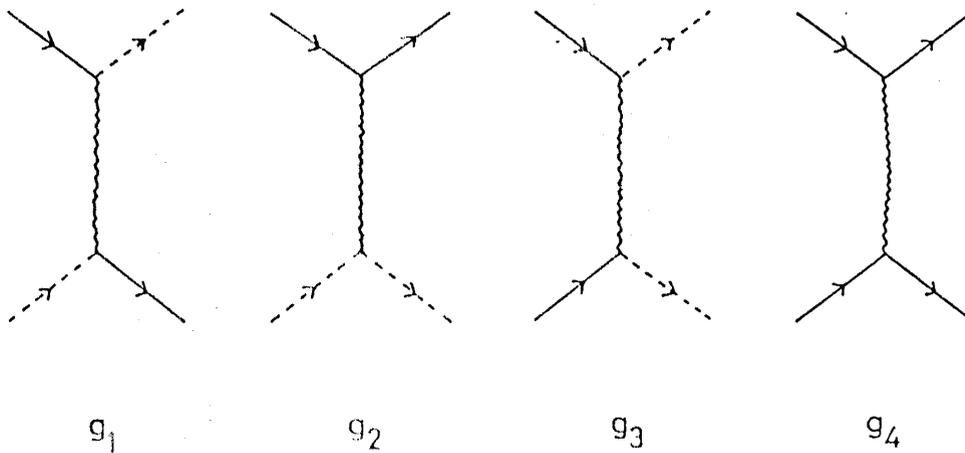


図 1.2 : 1次元電子系の研究が用いられる4つの相互作用のファイマンダイアグラム。実線は右向き電子を、点線は左向き電子を示す。

g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} の項は、ハミルトニアン (1.6) において同じ形に書かれる。相互作用する2電子間を移動する運動量 momentum transfer の大きさを無視するかぎり、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} は同じ過

程を表わす。そこでこの場合は、後方散乱 g_1 と前方散乱 g_2 に関して、独立な結合定数は3つである。それらの結合定数を通常 g_1^{\parallel} , g_1^{\perp} , $g_2 = g_2^{\parallel} = g_2^{\perp}$ ととる⁴⁾。尚、これらの結合定数のとり方については、第3章で再び議論する。

g_3^{\parallel} と g_4^{\parallel} の項は、演算子 $a^{\dagger}(a)$ 同士、あるいは $b(b^{\dagger})$ 同士を交換すると、momentum transfer に切断がないかぎり、逆符号の同じ過程を表わすので、散乱行列への寄与は零である。これは、接触型相互作用を仮定したので、パウリの排他律の結果である。もし、接触型相互作用を仮定せず、momentum transfer にも切断がある場合、 g_3^{\parallel} と g_4^{\parallel} の項の寄与は、零とならない。実際、(格子の歪んだ)1次元ハイゼンベルグ・スピン系をウィグナー・ジョルダン変換でスピンをもたないフェルミオン系に変換したとき、 g_3^{\parallel} の項に対応する反転過程が重要な働きをすることが知られている^{5,6)}。また、 g_4^{\parallel} の項は、図1.3(a), (b)に示す1次の自己エネルギーの寄与があり、これが、momentum transfer にも切断があるとき、有限の寄与を与える。この寄与はフェルミ速度 v_F にくりこまれる⁴⁾。ただし、momentum transfer に切断がないと、パウリ原理を反映して、図1.3(a), (b)の寄与は互いに打ち消し合い、 g_4^{\parallel} の寄与はない。

ハミルトニアン(1.6)の中で、 g_3 と g_4 の項を無視し、 g_1 と g_2 だけを考えてモデルは、

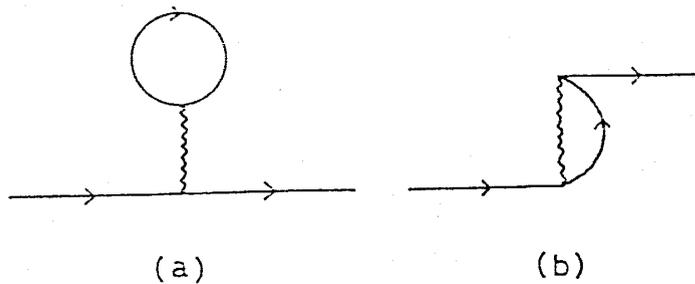


図1.3：相互作用 g_4^{\parallel} によって可能な1次の自己エネルギーのダイアグラム。

はじめ、Bychkov-Gor'kov-Dzyaloshinskii⁷⁾ (BGD)によって提出されたものであり、BGDモデルという。BGDモデルに反転過程を加えたモデルをはじめに調べたのは、Dzyaloshinskii = Larkin⁸⁾であった。その後、これらのモデルは、多くの人達により、くりこみ群の方法、ボゾン表示の方法の両面から、詳しく調べられた。

これら1次元電子系の多体問題に関する総合報告として、くりこみ群の方法を中心にしたものに、文献4)、ボゾン表示の基礎を中心にしたものに、文献9)、位相ハミルトニアンの応用を中心にしたものに、文献10)がある。ここでの目的は、総合報告を行なうことではなく、理

杉山忠男

論の基礎的な部分に限定し、専門外の人にも理解していただけるように、できるだけわかりやすく説明することである。参考文献4), 9), 10)との重複は、できるかぎり避け、未だ残されている基礎的な理論上の問題点、および、くりこみ群の方法、ボゾン表示の方法の長所・短所を明確にし、いろいろな方面へ応用するための便を計る。また、これらの方法を用いて得られる基底状態を示し、最近得られたゆらぎ間の競争の問題、ポテンシャル散乱の問題について述べる。さらに、新たな興味深い方法である、ベーテ仮説にもとづかれた厳密解の問題にも触れる。

第1章 参考文献

- 1) P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158** (1967), 383.
- 2) いろいろな1次元伝導物質に関する総合的な解説としては、鹿兒島誠一編著 一次元電気伝導体 裳華房(1982)。有機物質 $(\text{TMTSF})_2 \text{PF}_6$ が高圧下で超伝導性を示すことの発見は、D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault and K. Bechgaard, *J. de Phys. Lett.* **41** (1980), L-95, M. Ribault, G. Benedek, D. Jerome and K. Bechgaard, *J. de Phys. Lett.* **41** (1980), L-397. 有機超伝導体の実験に関する最近の発展については、例えば、D. Jérôme, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **79** (1982), 155 (Proc. Int. Conf. Low-Dim. Cond., Boulder, August 1981), 及びこの雑誌 (Part B) にも載っている多くの報告。
- 3) J. Sólyom, *Solid State Commun.* **17** (1975), 63.
- 4) J. Sólyom, *Adv. Phys.* **28** (1979), 201.
- 5) F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980), 1358.
- 6) T. Nakano and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50** (1981), 2489.
- 7) Y. A. Bychkov, L. P. Gor'kov and I. E. Dzyaloshinskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **50** (1966), 738 (*Sov. Phys.-JETP* **23** (1966), 489).
- 8) I. E. Dzyaloshinskii and A. I. Larkin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **61** (1971), 791 (*Sov. Phys.-JETP* **34** (1972), 422).
- 9) V. J. Emery, *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, edited by J. T. Devreese, R. P. Ervard and V. E. van Doran, (Plenum Press, New York, 1979), p. 247.
- 10) H. Fukuyama and H. Takayama, *Electronic Properties of Inorganic Quasi One Dimensional Compounds*, edited by P. Monceau in *Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures*, Series B (D. Reidel Publishing Company) to be published.

第2章 くりこみ群の方法

この章では、1次元電子系の研究で用いられる Gell・Mann-Low のくりこみ群の方法を説明する。このくりこみ群の方法は、元々、量子電気力学の摂動論において現われる赤外発散をうまく処理するために、Gell・Mann-Low¹⁾により考察されたものである²⁾。この方法は、摂動計算に対数発散の現われる問題に対して、特に有効である。そこで物性論において、まず、Abrikosov-Migdal³⁾と Fowler-Zawadowski⁴⁾により、近藤効果の問題⁵⁾に用いられた。近藤効果は、摂動計算中に現われる対数発散を扱う問題である。また、Di Castro⁶⁾により、 $4-\epsilon$ 次元の臨界現象の問題に用いられた。

§ 2.1 で、近藤効果の説明に用いられた近藤モデル (s-d モデル) と1次元電子系の類似性を説明する。近藤モデルと1次元電子系は、どちらも対数発散を扱う問題であり、ハミルトニアンを類似の形に書くことができる。§ 2.2 で、近藤モデルに対する Anderson のスケールリング則⁷⁾について説明する。この方法は散乱の T 行列が切断エネルギーを動かしても不変であるとして、有効結合定数の、切断エネルギーの移動による変化を調べるものである。これにより、くりこみ群の最低次と同じ方程式を得ることができる。この方法は、摂動論にもとづかれた、切断エネルギーの移動によるくりこみ群の定式化へ、洞察を与える。それと同時に、運動量空間での Wilson のくりこみ群の方法⁸⁾と比較すると、その類似性を理解することができる。

§ 2.3 で、切断エネルギーの移動による、Sólyom のくりこみ群の定式化⁹⁾を説明する。この方法は、具体的な摂動計算により、低次の摂動論の範囲で、スケールリングの関係 multiplicative renormalization が成り立つことを確かめ、この関係が一般的に成り立つと仮定して、くりこみ群の定式化をするものである。§ 2.4 で、くりこみ変換をもとにして、くりこみ点を動かすことにより、くりこみ群の定式化をする。このときのくりこみ点と摂動計算に現われる切断エネルギー D とは似ているが、いまのところ、両者の関係をつけることはできていない。

§ 2.5 で、くりこみ群の方法で得られる結果に、どのような摂動項が含まれるかを説明し、くりこみ群の利点を述べる。§ 2.6 で、近藤モデルの第3発散項までのくりこみ群の計算を示し、帯磁率のふるまいについて議論する。

§ 2.1 近藤モデルと1次元電子系

磁気モーメントをもつ Mn のような鉄族不純物原子を、極くわずかに含む Cu などの金属の稀薄合金において、電気抵抗極小の現象が見られる。すなわち、金属中の伝導電子が格子振動

によって散乱される結果として予想されるように、はじめ、温度の低下と共に抵抗値の減少がみられるが、Cu-Mn 稀薄合金では、抵抗値が約10Kで極小になり、さらに低温側では、逆に温度の低下と共に、増加を示す。この電気抵抗極小の原因は、永い間不明のままであったが、1964年、Kondo⁵⁾によって、はじめてその本質に迫る研究がなされ、これ以後、金属中の局在モーメントの効果は、近藤効果と呼ばれるようになった。

§ 2.1.1 近藤モデル

Kondo が用いたモデルは、s-d モデルといわれるもので、伝導電子と局在モーメントとの相互作用を表わすものである。このとき、磁気モーメントをもつ不純物は稀薄であるとして、2つ以上の局在モーメント間の相互作用は無視する。

近藤モデル(s-d モデル)のハミルトニアンは、次式で与えられる。

$$H = H_0 + H_{s-d} \quad , \quad (2.1)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\alpha} \quad , \quad (2.2)$$

$$H_{s-d} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ r, \delta}} [J_z \sigma_{\alpha\beta}^z S_{r\delta}^z + J_{\pm} (\sigma_{\alpha\beta}^+ S_{r\delta}^- + \sigma_{\alpha\beta}^- S_{r\delta}^+)] \\ \times c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\beta} a_r^{\dagger} a_{\delta} \quad . \quad (2.3)$$

ここで、 $c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\alpha}$ は運動量 \mathbf{k} 、スピン α をもつ伝導電子の生成・消滅を表わす演算子であり、 a_r^{\dagger}, a_r は、最初に Abrikosov¹⁰⁾ によって導入されたもので、局在スピンの r であることを表わす擬フェルミオンの生成・消滅演算子である。また、 σ は伝導電子のスピンの変化を表わすパウリのスピン行列であり、 S は局在スピンのスピン行列である。

ハミルトニアン(2.1)の第1項は、伝導電子の運動エネルギーを表わす。 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ はフェルミ面から計った運動エネルギーである。第2項は、伝導電子と局在スピンのs-d 交換相互作用を表わしている。また、一般に $J_z \neq J_{\pm}$ である。運動量 \mathbf{k} は3次元ベクトルであり、ハミルトニアン(2.1)は3次元系の問題として書かれている。しかし、交換積分 J を、入射電子の運動量 \mathbf{k} と散乱電子の運動量 \mathbf{k}' に依存しない定数としたので、伝導電子の散乱としてs波散乱のみを考慮に入れていることになり、ハミルトニアン(2.1)は、本質的に1次元系のものであると考えることができる。

§ 2.1.2 BGD モデル

次に1次元電子系で、前方散乱と後方散乱を含む BGD モデルのハミルトニアンを考える。
ハミルトニアン(1.6)の g_1 の項と g_2 の項

$$H_{\text{BGD}} = \frac{1}{L} \sum_{\substack{k_1, k_2, p \\ \alpha, \beta}} \{ (g_1^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_1^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) a_{k_1\alpha}^{\dagger} b_{k_2\beta}^{\dagger} a_{k_2+2k_F+p, \beta} b_{k_1-2k_F-p, \alpha} \\ + (g_2^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_2^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) a_{k_1\alpha}^{\dagger} b_{k_2\beta}^{\dagger} b_{k_2+p, \beta} a_{k_1-p, \alpha} \}, \quad (2.4)$$

を、運動量とスピンの添字を適当に入れかえることにより、次のように書くことができる。^{11~13)}

$$H_{\text{BGD}} = - \sum_{\alpha, \beta, r, \delta} \left[\frac{1}{2} V \delta_{\alpha\beta} \delta_{r\delta} + \frac{1}{2} J_{\parallel} (\sigma_{\alpha\beta}^z \sigma_{r\delta}^z) + J_{\perp} (\sigma_{\alpha\beta}^+ \sigma_{r\delta}^- + \sigma_{\alpha\beta}^- \sigma_{r\delta}^+) \right] \\ \times \frac{1}{L} \sum_{k_1, k_2, p} a_{k_1\alpha}^{\dagger} a_{k_1-p, \beta} b_{k_2r}^{\dagger} b_{k_2+p, \delta} \quad (2.5)$$

ここで、 $J_{\parallel} = g_1^{\parallel}$, $J_{\perp} = g_1^{\perp}$, $V = g_1^{\parallel} - 2g_2$, $g_2 = g_2^{\parallel} = g_2^{\perp}$ とおいた。

ハミルトニアン(2.3)と(2.5)をくらべると、次のことがわかる。近藤モデルで局在スピンの大きさ $S = 1/2$ のとき、 $J_z \rightarrow J_{\parallel}$, $J_{\pm} \rightarrow J_{\perp}$ とおきかえ、かつ、伝導電子の演算子 $c_{k\alpha}^{\dagger}$, $c_{k\alpha}$ を $a_{k\alpha}^{\dagger}$, $a_{k\alpha}$ に、擬フェルミオンの演算子 a_r^{\dagger} , a_r を、 $b_{k\alpha}^{\dagger}$, $b_{k\alpha}$ に対応させると、(2.5)の V の項を除き、ハミルトニアン(2.3)と(2.5)は類似したものとなる。ハミルトニアン(2.5)の V の項は、スピンが変化せず、何らくりこまれない通常の散乱項に対応し、この通常の散乱項を近藤モデルに加えても、近藤モデルの本質に変化はない⁹⁾。ただし、ハミルトニアン(2.3)と(2.5)の違いは次の通りである。近藤モデルでは、擬フェルミオンの場所が固定されるため、相互作用するとき、運動量は保存されないが、BGDモデルでは、運動量は保存する。また、擬フェルミオンは局在スピンを表わすのでホールをもたないが、BGDモデルの電子は常にホールをもつ。

§ 2.1.3 摂動計算

近藤モデルと BGD モデルの摂動計算を考える。近藤モデルの電子および擬フェルミオンの自由粒子の $T = 0$ でのグリーン関数 $G_0(\mathbf{k}, t) = -i \langle 0 | T c_{\mathbf{k}}(t) c_{\mathbf{k}}^{\dagger}(0) | 0 \rangle$, $g_0(t) = -i \langle 0 | T a(t) a^{\dagger}(0) | 0 \rangle$, ($|0\rangle$: フェルミ球) を時間 t に関してフーリエ変換したものは、次のように書ける。

$$G_0(\epsilon_{\mathbf{k}}, \omega) = [\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\delta \operatorname{sgn} \epsilon_{\mathbf{k}}]^{-1}, \quad (2.6)$$

$$g_0(\omega) = [\omega + i\delta]^{-1} . \quad (2.7)$$

ここで、 δ は正の無限小の定数である。また、擬フェルミオンにホールが存在しないため、(2.5)式の右辺の $i\delta$ の符号は常に正である。

BGD モデルの $T=0$ での自由粒子のグリーン関数 $G_+^{(0)}(k, t) = -i \langle 0 | T a_k(t) \times a_k^\dagger(0) | 0 \rangle$, および、 $G_-^{(0)} = -i \langle 0 | T b_k(t) b_k^\dagger(0) | 0 \rangle$ を時間 t に関してフーリエ変換したものは、次の形で与えられる¹⁴⁾。

$$G_{\pm}^{(0)}(k, \omega) = [\omega - \xi(k) + i\delta \operatorname{sgn} \xi(k)]^{-1} . \quad (2.8)$$

ここで、 $\xi(k) = v_F(|k| - k_F)$ である。

これらのグリーン関数を用いて、図 2.1(a), (b) に示された 2 次の散乱行列を計算する。ここで、散乱行列の外線の伝導電子、および、右向き、左向きの電子の運動量は、すべて、それぞれのフェルミ運動量に等しいとし、エネルギーは、図 2.1 に示されるようにとる。ただし、この場合は、全入射エネルギーが ω で、エネルギー保存則が成り立つようにとれば、外線のエネルギーのとり方を、どのようにしても同じである。

一般のバーテックス関数のとり方については、§ 2.3 と § 3.1 で説明する。

図 2.1(a), (b) の散乱行列は、結合定数、および、スピン添字を無視して、それぞれ、次のように計算できる。

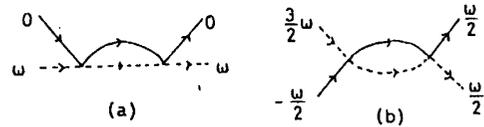


図 2.1 : (a) s-d モデルの 2 次の散乱行列を示すダイアグラム。実線は伝導電子を、点線は擬フェルミオンを示す。(b) BGD モデルの 2 次の散乱行列を示すダイアグラム。実線は右向き電子を、点線は左向き電子を示す。

$$\begin{aligned} T^{s-d}(\omega) &= i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} G_0(\epsilon_k, \omega_1) g_0(\omega - \omega_1) \\ &= \rho \left[\ln \frac{\omega}{D} - i\pi \right] , \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} T^{\text{BGD}}(\omega) &= i \int \frac{dk_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} G_+(k_1, \omega_1) G_-(-k_1, \omega - \omega_1) \\ &= \frac{1}{2\pi v_F} \left[\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right] . \end{aligned} \quad (2.10)$$

(2.9)式を得るとき,

$$\int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int \frac{km}{2\pi^2} d\epsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow \rho \int d\epsilon_{\mathbf{k}}, \quad (m: \text{電子の質量}),$$

として, 伝導電子のバンドを, 図 2.2 に示すように, フェルミ・エネルギー ϵ_F を基準にして, $\pm D$ の範囲で一定の状態密度 ρ となるようにとった。(2.9)式と(2.10)式では, ともに対数発散が現われる。そこで, この対数発散を問題にするかぎり, 近藤モデルとBGDモデルに類似の方法が使えるであろう。

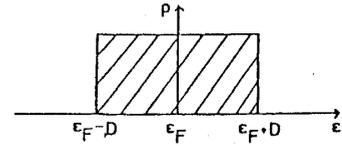


図 2.2 : s-d モデルの計算に用いられる伝導電子の状態密度の形。

尚, 上記の散乱行列を絶対零度で計算したが, 有限温度で散乱行列を計算すると, 対数項は $\ln(\max\{\omega, T\}/D)$ となる¹⁵⁾。ただし, ボルツマン定数を $k_B = 1$ とおいた。すなわち, 絶対零度の計算から, $\omega < T$ の有限温度へ移るには, エネルギー ω を, 温度 T でおきかえるだけでよい。

§ 2.2 アンダーソンのスケーリング則

この節では, 近藤モデルに対するアンダーソンのスケーリング則⁷⁾について述べる。詳細は原論文⁷⁾に分かりやすく書かれており, また, 参考文献16)にも同様の記述が見られる。ここでは, 計算の詳細を省き, 議論の筋道だけを述べる。

§ 2.2.1 T 行列

入射粒子の全エネルギーに依存する T 行列を, 次のように書く。

$$T(\omega) = H_{s-d} + H_{s-d} \frac{1}{\omega - H_0} T(\omega). \quad (2.11)$$

ここで H_0 はハミルトニアン(2.2)であり, H_{s-d} は(2.3)である。

バンド幅 $2D$ を, フェルミ面の両側対称に dD だけ小さくすると, 中間状態の許される状態数が $2dD$ だけ少なくなる。このとき T 行列が不変であるとする, ハミルトニアンが変化しなければならない。この変化を計算する。 $D > |\epsilon_{\mathbf{k}}| > D - dD$ のエネルギーをもつ電子, または, 空孔を選ぶ演算子 P を導入して, (2.11)式を書きかえる。

$$T = H_{s-d} + H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} T + H_{s-d} (1 - P) \frac{1}{\omega - H_0} T.$$

この式の右辺第2項, 第3項の T に, もとの T を代入して,

$$\begin{aligned}
 T &= H_{s-d} + H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} H_{s-d} + (H_{s-d} + H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} H_{s-d}) \\
 &\quad \times (1 - P) \frac{1}{\omega - H_0} T + H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} H_{s-d} \frac{1}{\omega - H_0} T \\
 &\simeq H'_{s-d} + H'_{s-d} (1 - P) \frac{1}{\omega - H_0} T, \tag{2.12}
 \end{aligned}$$

を得る。ここで、

$$H'_{s-d} = H_{s-d} + H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} H_{s-d}, \tag{2.13}$$

である。ただし、微小項

$$H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} \simeq \rho^2 H_{s-d}^2 \left(\frac{dD}{D} \right)^2,$$

を無視した。

始状態 $|i\rangle$ と終状態 $|f\rangle$ を

$$|i\rangle = c_{k\beta}^\dagger a_\delta^\dagger |0\rangle, \quad |f\rangle = c_{k'\alpha}^\dagger a_r^\dagger |0\rangle, \tag{2.14}$$

とすると、(2.12)式は、バンド幅が $2D$ のときの T 行列要素 $T_{if} = \langle f|T|i\rangle$ が、バンド幅が $2(D-dD)$ のときの T 行列要素に、ハミルトニアンが H_{s-d} から H'_{s-d} へ変化すれば、等価であることを表わしている。そこで行列要素 $\langle f|H'_{s-d}|i\rangle$ を計算し、行列要素 $\langle f|H_{s-d}|i\rangle$ と比較すると、バンド幅が $2D$ から $2(D-dD)$ へ変化するとき、有効結合定数がどのように変化するかがわかる。

いま、行列要素 $\langle f|H_{s-d}|i\rangle$ は、

$$\langle f|H_{s-d}|i\rangle = -\frac{1}{N} [J_z \sigma_{\alpha\beta}^z S_{r\delta}^z + J_\pm (\sigma_{\alpha\beta}^+ S_{r\delta}^- + \sigma_{\alpha\beta}^- S_{r\delta}^+)], \tag{2.15}$$

である。つぎに、行列要素 $\langle f|H'_{s-d}|i\rangle$ を計算する。 $S=1/2$ に対して、(2.13)式右辺第2項の行列要素は、

$$\langle f|H_{s-d} P \frac{1}{\omega - H_0} H_{s-d}|i\rangle$$

$$= \frac{-\rho dD}{\omega - D - A} \frac{2}{N^2} [J_{\pm}^2 \sigma_{\alpha\beta}^z S_{r\delta}^z + J_{\pm} J_z (\sigma_{\alpha\beta}^+ S_{r\delta}^- + \sigma_{\alpha\beta}^- S_{r\delta}^+)], \quad (2.16)$$

と計算される。ここで、 A はエネルギー原点のずれを与える定数である。

§ 2.2.3 スケーリング

(2.15) 式と (2.16) 式を (2.13) 式へ用いて、 H_{s-d} から H'_{s-d} への結合定数の変化を、

$$dJ_z = -\frac{dD}{\omega - D - A} 2 \frac{\rho}{N} J_{\pm}^2, \quad (2.17)$$

$$dJ_{\pm} = -\frac{dD}{\omega - D - A} 2 \frac{\rho}{N} J_{\pm} J_z, \quad (2.18)$$

と得る。これらから、 dD を消去して積分すると、

$$J_z^2 - J_{\pm}^2 = \text{定数}, \quad (2.19)$$

という双曲線の方程式が得られ、図 2.3 に示すスケーリングの軌跡図を描くことができる。この軌跡図で、領域 $J_z > |J_{\pm}|$ は、 $J_{\pm} \rightarrow 0$ となるところなので、弱結合領域と呼ばれる。一方、領域 $J_z < |J_{\pm}|$ は、 J_z, J_{\pm} が発散するところで、強結合領域と呼ばれる。

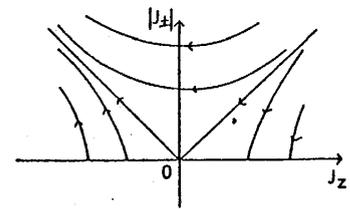


図 2.3 : アンダーソンのスケーリング則によって得られるスケーリングの軌跡図。

この理論は、運動量空間での Wilson のくりこみ群の方法⁸⁾と類似している。Wilson の方法は、分配関数を不変として、運動量空間で高波数からの寄与をくりこみ、ハミルトニアンの中の有効結合定数がどのように変化するかを調べるものである。ここでは、分配関数のかわりに、 T 行列が用いられた。

弱結合領域 $J_z > |J_{\pm}|$ は、結合定数が *irrelevant* になる領域で、そこから得られる結論は、ほぼ正しいと考えられる。しかし、強結合領域 $J_z < |J_{\pm}|$ は、*relevant* な領域で、得られる結果は正しいとはいえない。ただし、Anderson の理論⁷⁾の近似を高めることによって、強結合領域に対しても、かなり改良することができる。このような改良を Anderson の理論に直接加え、強結合領域でも固定点が現われるようにしたのは、Solyom-Zawadowski¹⁷⁾である。

彼らは、バンド幅を変えたときの T 行列の不変性を次のように考えた。 T 行列の不変性は、

杉山忠男

散乱確率の不変性である。このような散乱確率は、バンド幅を変える、すなわち、空間のスケールを変えるというような操作によっても不変でなければならない。ところがいま、始状態と終状態のノルムは一般に1ではない。そこで、 T 行列に確率としての性格をもたせるためには、始状態と終状態のノルムで規格化したものを用いるべきである。この考えから、彼らは、次の行列要素がバンド幅の変化に対して、不変となるような有効ハミルトニアンを求めた。

$$T'_{if} = \frac{\langle f | H_{s-d} + H_{s-d} [1/(\omega - H_0)] T | i \rangle}{\{ \langle i | 1 + [1/(\omega - H_0)] T | i \rangle \langle f | 1 + [1/(\omega - H_0)] T | f \rangle \}^{1/2}} \quad (2.20)$$

この散乱行列の不変性から、Sólyom-Zawadowski¹⁷⁾ は、次節で述べるくりこみ群の第2発散項までのリー方程式と同じものを導いた。

以上のバンド幅を小さくすることによるスケージング理論は、次節で説明する切断エネルギーを動かすことによるくりこみ群の定式化と、原理的に同じものである。

§ 2.3 摂動計算にもとづかれたくりこみ群の定式化

この節では、 $J = J_z = J_{\pm}$ である等方的な近藤モデル(2.1)を用いて、くりこみ群の方法を説明する。これは、Sólyom⁹⁾ による具体的な摂動計算にもとづいたくりこみ群の定式化の方法である。

§ 2.3.1 バーテックス関数

まず、伝導電子に関する場の演算子

$$\varphi_{\lambda}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

を導入し、バーテックス関数を定義する。ハイゼンベルグ演算子を、記号 \sim をつけて表わすことにすると、伝導電子と擬フェルミオンの2体のハイゼンベルグ表示の演算子によるグリーン関数は、

$$\begin{aligned} & G_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\parallel}(\mathbf{x}, t; t_2; \mathbf{x}_3, t_3; t_4) \\ & = \langle 0 | T \tilde{\varphi}_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \tilde{a}_{\beta}(t_2) \tilde{\varphi}_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{x}_3, t_3) \tilde{a}_{\delta}^{\dagger}(t_4) | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.21)$$

であり、この2体のグリーン関数の連結部分から、バーテックス関数 Γ を定義する。

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\beta r\delta}^{\parallel} &= G_{\alpha r}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3, t_1 - t_3) g(t_2 - t_4) \\
 &+ i \sum_{\substack{r_1, r_2 \\ r_3, r_4}} \int d\mathbf{x}'_1 d\mathbf{x}'_3 \int dt'_1 dt'_2 dt'_3 dt'_4 G_{\alpha r_1}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1, t_1 - t'_1) g_{\beta r_2}(t_2 - t'_2) \\
 &\times G_{r_3 r}(\mathbf{x}'_3 - \mathbf{x}_3, t'_3 - t_3) g_{r_4 r}(t'_4 - t_4) \Gamma_{r_1 r_2 r_3 r_4}(\mathbf{x}'_1, t'_1; t'_2; \mathbf{x}'_3, t'_3; t'_4)
 \end{aligned}
 \tag{2.22}$$

ここで、 $G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t)$ と $g_{r\delta}(t)$ は、それぞれ、ハイゼンベルグ表示での伝導電子と擬フェルミオンのグリーン関数である。

以下の議論では、(2.22)式のフーリエ変換によって定義されるバーテックス関数

$\Gamma_{r_1 r_2 r_3 r_4}(\mathbf{k}_1, \omega_1; \omega_2; \mathbf{k}_3, \omega_3; \omega_1 + \omega_2 - \omega_3)$ を用いる。このバーテックス関数 Γ は、 $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3$ に依存するが、ここでは、散乱の T 行列のときのように、 Γ を全入射粒子のエネルギーだけに依存すると近似し、入射電子、および、散乱電子の運動量をフェルミ運動量に、また、エネルギーを図2.4に示すようにとる。このようにとる理由は、対数発散が現われる、内線の伝導電子と擬フェルミオンのグリーン関数の対の計算において、常に外部から与えられたエネルギー ω が寄与するようにするためである。以下の摂動計算において、局在スピンの大きさは $S = 1/2$ とする。

裸のバーテックス関数 Γ_0 は(2.22)式で、1次の摂動項から得られ、

$$\Gamma_0 = -J_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S} ,
 \tag{2.23}$$

である。ここで、 $J_0 \equiv J/N$ とする。以下、 J/N のかわりに J_0 を用いる。

§ 2.3.2 摂動計算

バーテックス関数 $\Gamma(\omega)$ 、および、擬フェルミオンのグリーン関数のフーリエ変換 $g(\omega)$ の摂動展開を考える。伝導電子のグリーン関数は、擬フェルミオンがホールをもたないため、くりこまれず、常に $G = G_0$ である。

後に定義するくりこみ因子 z_2, z_3^{-1} を、結合定数の2次まで計算するために、 $\Gamma(\omega)$ を3次まで、また、 $g(\omega)$ の2次の自己エネルギーを計算する。まず、 $\Gamma(\omega)$ の2次の項を求めるには、図2.5(a), (b)に示すダイアグラムを計算する。このとき、外線のエネルギーは、図2.4のようにとる。エネルギー・運動量部分の計算は、(2.9)式を求めたときのようにする。スピン部分は、局在スピンの大きさが $S = 1/2$ なので、パウリのスピン行列の間の関係

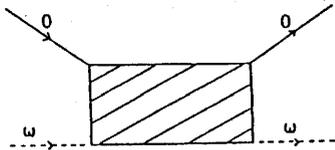


図 2.4 : s-d モデルにおける一般のバーテックス関数の外線の選び方。

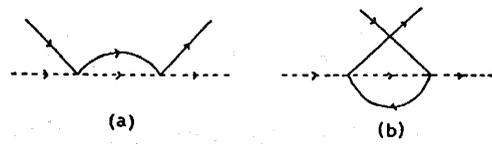


図 2.5 : s-d モデル, 2次のバーテックスを示すダイアグラム。

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{4} \sigma_+ \sigma_- &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sigma_z, & \frac{1}{4} \sigma_- \sigma_+ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sigma_z, \\ \frac{1}{4} \sigma_- \sigma_z &= -\frac{1}{4} \sigma_z \sigma_- = \frac{1}{4} \sigma_-, & \frac{1}{4} \sigma_+ \sigma_z &= -\frac{1}{4} \sigma_z \sigma_+ = \frac{1}{4} \sigma_+, \\ \frac{1}{4} \sigma_z \sigma_z &= \frac{1}{4}, \end{aligned} \right\} \quad (2.24)$$

を用いて計算し, 2つのダイアグラムの和を

$$\Gamma^{(2)}(\omega) = -2J_0^2 \rho(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S})(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi), \quad (2.25)$$

と得る。

次に3次のバーテックス関数を計算する。これには, 表 2.1 (a) ~ (f) の6つのパルケット・ダイアグラムと, 表 2.1 (g) の非パルケット・ダイアグラムを計算する。パルケット・ダイア

表 2.1 : s-d モデル, 3次のバーテックスを表わすダイアグラムとその計算結果。

(a)~(f)はパルケット・ダイアグラム。(g)は非パルケット・ダイアグラム。局在スピンの大きさは $S = 1/2$ とする。

(a)		$(\frac{3}{4} - \frac{7}{4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2$
		$(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^2$
(b)		$(-\frac{3}{4} - \frac{7}{4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2$
		$(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^2$
(c)		$(\frac{3}{4} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2$
		$\frac{1}{2} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^2$
(d)		$(\frac{3}{4} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2$
		$\frac{1}{2} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^2$
(e)		$(-\frac{3}{4} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2$
		$\frac{1}{2} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^2$
(f)		$(-\frac{3}{4} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2$
		$\frac{1}{2} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^2$
(g)		$-\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S} J_0^3 \rho^2$
		$\ln \frac{\omega}{D} - i\pi$

ラムとは、隣り合った1対のバーテックスを、1つのバーテックスに合わせる操作を順次進めることにより、最も単純な1つのバーテックスに帰着させることのできるダイアグラムをいう。

パルケット・ダイアグラムと非パルケット・ダイアグラムの寄与は、対数発散の寄与が1次ちがう。パルケット・ダイアグラムは、 $\Gamma(\omega)$ へ最強発散の寄与、すなわち、一般的に、 $J_0^n \rho^{n-1} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^{n-1}$ (n は2以上の自然数) の寄与をし、非パルケット・ダイアグラムは、より低次の発散の寄与、すなわち、 $J_0^n \rho^{n-1} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^{n-2}$, $J_0^n \rho^{n-1} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)^{n-3}$, ... (n は4以上の自然数), の寄与をする。パルケット近似というのは、パルケット・ダイアグラムの寄与だけを集める近似をいう。

3次のバーテックス関数は、表2.1より、

$$\Gamma^{(3)}(\omega) = -4(\sigma \cdot \mathbf{S}) J_0^3 \rho^2 \left[\left(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi \right)^2 + \frac{1}{8} \left(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi \right) \right], \quad (2.26)$$

となる。

擬フェルミオンのグリーン関数の2次の自己エネルギーは、図2.6のダイアグラムを計算する。結果は、

$$\Sigma^{(2)}(\omega) = \frac{3}{2} J_0^2 \rho^2 \omega \left(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi \right), \quad (S = \frac{1}{2}), \quad (2.27)$$

である。ただし、1次の自己エネルギーに対数発散は含まれないので無視する。

§ 2.3.3 くりこみと不変結合定数

さて、バーテックス関数と擬フェルミオンのグリーン関数のくりこみは、上の摂動計算から、 $\ln \frac{\omega}{D} - i\pi$ のベキ関数と、裸の結合定数 J_0 で与えられると考えられる。そこで、これらのくりこみ部分 r と d を、 ω/D と $-J_0$ の関数として、

$$\Gamma(\omega) \equiv r\left(\frac{\omega}{D}, -J_0\right) \Gamma_0 \quad (2.28)$$

$$g(\omega) \equiv d\left(\frac{\omega}{D}, -J_0\right) g_0(\omega), \quad (2.29)$$

によって定義する。ここで、 r と d は次元をもたない量なので、以後、 r を次元をもたないバーテックス、 d を次元をもたないグリーン関数と呼ぶ。式(2.25) ~ (2.27) から、

$$r\left(\frac{\omega}{D}, -J_0\right) = 1 + 2 \left(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi \right) J_0 \rho + 4 \left(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi \right)^2 J_0^2 \rho^2$$



図2.6: s-dモデル, 擬フェルミオンの2次の自己エネルギーを示すダイアグラム。

$$+ \frac{1}{2} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi) J_0^2 \rho^2, \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} d(\frac{\omega}{D} - J_0) &= [1 - g_0(\omega) \Sigma(\omega)]^{-1} \\ &= 1 + \frac{3}{2} (\ln \frac{\omega}{D} - i\pi) J_0^2 \rho^2, \end{aligned} \quad (2.31)$$

を得る。

規格化された T 行列の分子は、伝導電子と擬フェルミオンの2体のグリーン関数の連結部分で、 $G_f \cdot g_f \cdot \Gamma \cdot G_i \cdot g_i$ と表わされる。ここで、グリーン関数の添字 i と f は、それぞれ、始状態と終状態に結びついたものであることを示す。一方、分母は始状態と終状態のノルムなので、伝導電子と擬フェルミオンの1体のグリーン関数の積で表わされる。伝導電子のグリーン関数がくりこまれないことを考慮すると、結局規格化された T 行列は、 $T'_{if} \sim drJ_0$ となる。すなわち、規格化された T 行列がバンド幅の変化により不変であるということは、 d と r と J_0 の積が不変になることを意味する。そこで、

$$\begin{aligned} J_{\text{inv.}} &\equiv -d(\frac{\omega}{D}, -J_0) r(\frac{\omega}{D}, -J_0) J_0 \\ &= d(\frac{\omega}{D'}, J'(\frac{D'}{D}, -J_0)) r(\frac{\omega}{D'}, J'(\frac{D'}{D}, -J_0)) J'(\frac{D'}{D}, -J_0), \end{aligned} \quad (2.32)$$

と書き、 $J_{\text{inv.}}$ を不変結合定数という。ただし、 J' はバンド幅 D が D' へ変化したときの有効結合定数である。以上のように、不変結合定数の不変性は、規格化された T 行列の不変性に結びつき、さらに、次節に述べる、くりこみ変換に対する不変性に結びついている。

§ 2.3.4 multiplicative renormalization

切断エネルギー（バンド幅）が D から D' へ変化したときの d の変化を z_2 、 r の変化を z_3^{-1} とすると、

$$d(\frac{\omega}{D}, -J_0) = z_2(\frac{D'}{D}) d(\frac{\omega}{D'}, J'(\frac{D'}{D}, -J_0)), \quad (2.33)$$

$$r\left(\frac{\omega}{D}, -J_0\right) = z_3^{-1}\left(\frac{D'}{D}\right) r\left(\frac{\omega}{D'}, J'\left(\frac{D'}{D}, -J_0\right)\right), \quad (2.34)$$

$$J'\left(\frac{D'}{D}, -J_0\right) = -z_3^{-1}\left(\frac{D'}{D}\right) z_2\left(\frac{D'}{D}\right) J_0, \quad (2.35)$$

が成り立つ。これらを multiplicative renormalization の関係式という。また、 z_2, z_3 をくりこみ定数という。ただし、 z_2, z_3^{-1} が D'/D の関数で、 ω に依存しないということは自明なことではない。しかし、摂動計算の結果 (2.30) 式と (2.31) 式を用いて、(2.33) ~ (2.35) 式を満足するセルフコンシステントな解 z_2, z_3^{-1}, J' を次のように得ることができる⁹⁾。

$$z_2 = 1 + \frac{3}{2} \ln \frac{D'}{D} J_0^2 \rho + \dots \quad (2.36)$$

$$z_3^{-1} = 1 + 2 \ln \frac{D'}{D} J_0 \rho + \left(4 \ln^2 \frac{D'}{D} + \frac{1}{2} \ln \frac{D'}{D}\right) J_0^2 \rho^2 + \dots, \quad (2.37)$$

$$J' = -J_0 \left[1 + 2 \ln \frac{D'}{D} J_0 \rho + \left(4 \ln^2 \frac{D'}{D} + 2 \ln \frac{D'}{D}\right) J_0^2 \rho^2 + \dots\right]. \quad (2.38)$$

これ以後、 z_2, z_3^{-1} が一般的に ω に依存しないということを仮定する。(2.30) 式と (2.31) 式の r と d は、虚数部 $i\pi$ を含んでいたが、(2.36) ~ (2.38) 式の z_2, z_3^{-1}, J' はこれを含まない。

つぎに J' についても、multiplicative renormalization

$$J'\left(\frac{D'}{D}, -J_0\right) = z'\left(\frac{D''}{D}\right) J'\left(\frac{D'}{D''}, J'\left(\frac{D''}{D}, -J_0\right)\right), \quad (2.39)$$

が成り立つことが、(2.38) 式から J_0 の2次までで確かめられる。ここでも、 z' が D' に依存しないことを仮定する。(2.39) 式の両辺の対数を取り、 $x' = D'/D$ で微分して (D' が変数)、 $D' = D''$ とおいて、次のリーの微分方程式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial x'} \ln J'(x', -J_0) = \frac{1}{x'} \frac{\partial}{\partial y'} \ln J'(y', J'(x', -J_0)) \Big|_{y'=1}, \quad (2.40)$$

$$y' \equiv D'/D''.$$

一般に、 $x = \omega/D$ の関数で与えられる量 A に対し、multiplicative renormalization

$$A\left(\frac{\omega}{D}, -J_0\right) = z\left(\frac{D'}{D}\right) A\left(\frac{\omega}{D'}, J'\left(\frac{D'}{D}, -J_0\right)\right), \quad (2.41)$$

が成り立つとき、 J' のときと同様に、両辺の対数を取り、 ω/D で微分し、 $\omega = D'$ において、次のリーの微分方程式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln A(x, -J_0) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial y} \ln A(y, J'\left(\frac{D'}{D}, -J_0\right)) \Big|_{y=1'} \quad (2.42)$$

$$x \equiv \omega/D, \quad y \equiv \omega/D'.$$

(2.38) 式を (2.40) 式へ代入して、

$$\frac{\partial}{\partial \xi'} \ln J' = -2J' \rho + 2(J' \rho)^2, \quad \xi' \equiv \ln(D'/D), \quad (2.43)$$

を得る。ここで、はじめに $D' = D$ のとき、(2.38) 式より $J' = -J_0$ であるから、(2.43) 式の初期条件は、 $\xi' \rightarrow 0$ のとき $J' \rightarrow -J_0$ である。

§ 2.3.5 スケーリングと固定点

裸の結合定数が、 $|J_0 \rho| \ll 1$ すなわち、 $J_0 \rho = J \rho / N = J/D$ より、相互作用の強さ J がバンド幅 D より十分小さい弱結合の場合を考える。(2.43) 式は次のことを表わしている。 $J_0 < 0$ のとき、 $D'(\omega) = D$ で $J' = -J_0$ の弱結合であったものが、 $D'(\omega)$ が減少するに従い、 J' が増加し、 $\omega \rightarrow 0$ で $J' \rho \rightarrow +1$ の強結合となる。 $J_0 > 0$ のとき、 $D'(\omega)$ が減少するに従い、 $J' \rho$ はさらに小さくなり、 $\omega \rightarrow 0$ で $J' \rho \rightarrow 0$ の弱結合となる。このとき、 $+1$ または 0 を固定点という。

いま、摂動の各次数で現われる虚数部 $i\pi$ を無視し、 D' を ω とみなすと、(2.30) 式、(2.31) 式、(2.36) 式、(2.37) 式から d と z_2 、 r と z_3^{-1} は同じ式となることがわかる。さらに、(2.32) 式、(2.35) 式から J' と J_{inv} も同じ式となる。そこで虚数部 $i\pi$ を無視する議論では、 J' と J_{inv} を同一視し、 J' をも不変結合定数と呼ぶことがある。虚数部 $i\pi$ を考慮に入れるとき、(2.30) 式と (2.31) 式からわかるように、 $\omega = D$ で、 $d \neq 1$ 、 $r \neq 1$ 、である。ところが、(2.36) 式と (2.37) 式からわかるように、 $D' = D$ のとき、 $z_2 = 1$ 、 $z_3^{-1} = 1$ 、である。同様に、 $J' = -J_0$ ($D' = D$ のとき) となるが、 $\omega = D$ のとき、 $J_{\text{inv}} \neq -J_0$ である。これらは、初期の頃^{3,4)}、あいまいに扱われていた。

以上のくりこみ群の定式化は、摂動の低次の範囲で、multiplicative renormalization

(2.33) ~ (2.35) 式と (2.39) 式の成立を確かめ、この関係が一般的に成り立つと仮定するものであった。これとは別に、くりこみ変換という方法を用いることにより、切断エネルギーの代わりにくりこみ点を動かして、multiplicative renormalization の関係を一般的に導き、くりこみ群を定式化することが可能である。次節でこの方法を述べる。

§ 2.4 くりこみ点の移動によるくりこみ群の定式化

この節では、くりこみ点を動かすことによるくりこみ群の定式化を述べる¹⁸⁾。筆者等は、この方法と切断エネルギーを用いた方法との関係を追求したことがあるが¹⁹⁾、最後のところでリー方程式の定式化に失敗しており^(*)、くりこみ点と切断エネルギーの間の明確な関係はつけられていない。また、今のところ、筆者は、くりこみ点と切断エネルギーの間に明確な関係をつけた文献を知らない。そこで、この節では、くりこみ点による方法を説明し、くりこみ点と切断エネルギーを関係づける上に、どのような障害があるのかを明確にする。

§ 2.4.1 くりこみ変換とくりこみ点

相互作用表示の場の演算子により、s-d 相互作用のハミルトニアンを次のように書く。

$$H_{s-d} = -J_0 \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ r, \delta}} \sigma_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{S}_{r\delta} \int d\mathbf{x} \delta(\mathbf{x}) \varphi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \varphi_{\beta}(\mathbf{x}, t) a_r^{\dagger}(t) a_{\delta}(t). \quad (2.44)$$

次に、 $\Gamma' \equiv \Gamma/(-J_0)$ 、と $\Gamma'_0 \equiv \sigma \cdot \mathbf{S}$ を定義する。相互作用表示の演算子、および、 Γ'_0 と J_0 に対し、次のくりこみ変換を行う。

$$\left. \begin{aligned} a_{\beta} &\rightarrow \alpha_2^{-1/2} a_{\beta}, & g_0 &\rightarrow \alpha_2^{-1} g_0, \\ \Gamma'_0 &\rightarrow \alpha_3 \Gamma'_0, & J_0 &\rightarrow \alpha_3^{-1} \alpha_2 J_0, \end{aligned} \right\} \quad (2.45)$$

ここで、伝導電子のグリーン関数はくりこまれないことを考慮して、伝導電子の演算子に対しては、くりこみ変換をほどこさない。ハミルトニアン (2.44) とそれからつくられる S 行列、

(*) 文献 19) の (20) 式が、意味のない式になっている。

杉山忠男

また、 T 行列 (2. 11) は、くりこみ変換のもとに不変である。§ 2. 2 で T 行列の不変性を議論したとき、規格化した T 行列 (2. 20) を用いたのは、 T 行列の行列要素を計算するとき、 T 行列を始状態と終状態ではさむため、それらの状態のノルムが問題になったのである。

ハイゼンベルグ表示で書かれたグリーン関数とバーテックス関数の、相互作用表示でのグリーン関数による摂動展開を考えると、摂動の各次数で、

$$\begin{aligned} g_D(\omega; \Gamma'_0, G_0, g_0, -J_0) \\ = \alpha_2 g_D(\omega; \alpha_3 \Gamma'_0, G_0, \alpha_2^{-1} g_0, -\alpha_3^{-1} \alpha_2 J_0), \end{aligned} \quad (2. 46)$$

$$\begin{aligned} \Gamma'_0(\omega; \Gamma'_0, G_0, g_0, -J_0) \\ = \alpha_3^{-1} \Gamma'_0(\omega; \alpha_3 \Gamma'_0, G_0, \alpha_2^{-1} g_0, -\alpha_3^{-1} \alpha_2 J_0), \end{aligned} \quad (2. 47)$$

が成り立つ。ここで添字 D は、切断エネルギー D を含んでいることを示す。

いま、 $\omega = \lambda$ のとき、

$$g_D(\lambda; \alpha_3 \Gamma'_0, G_0, \alpha_2^{-1} g_0, -\alpha_3^{-1} \alpha_2 J_0) = g_0(\lambda), \quad (2. 48)$$

$$\Gamma'_D(\lambda; \alpha_3 \Gamma'_0, G_0, \alpha_2^{-1} g_0, -\alpha_3^{-1} \alpha_2 J_0) = \Gamma'_0, \quad (2. 49)$$

が成り立つように、くりこみ定数 α_2, α_3 を定め、そのときの値を z_2^D, z_3^D とする。このとき、 λ をくりこみ点という。 z_2^D と z_3^D は、 λ と D の関数となる。

§ 2. 4. 2 multiplicative renormalization

次に、 $d_D(\omega, \lambda; J_\lambda), r_D(\omega, \lambda; J_\lambda)$ を決め、くりこみ点 λ に関する multiplicative renormalization の関係を導く。上で定めた z_2^D, z_3^D を用いて、

$$g_\lambda^D(\omega; J_\lambda) \equiv g_D(\omega; z_3^D \Gamma'_0, G_0, z_2^{D-1} g_0, J_\lambda^D), \quad (2. 50)$$

$$\Gamma_\lambda^{D'}(\omega; J_\lambda) \equiv \Gamma'_D(\omega; z_3^D \Gamma'_0, G_0, z_2^{D-1} g_0, J_\lambda^D), \quad (2. 51)$$

$$J_\lambda^D \equiv -z_3^{D-1} z_2^D J_0, \quad (2. 52)$$

および、

$$d_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) \equiv g_0^{-1}(\omega) g_\lambda^D(\omega; J_\lambda^D), \quad (2. 53)$$

$$r_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) \equiv \Gamma_0^{-1} \Gamma_\lambda^D(\omega; J_\lambda^D), \quad (2.54)$$

を定義する。

(2.46)式と(2.47)式の左辺が、任意の α_2^{-1} , α_3^{-1} に対し同じ値であることを用い、くりこみ点を λ から λ' へ変えたときの z_2^D , z_3^D を $z_2'^D$, $z_3'^D$ とし、そのときの J_λ^D を $J_{\lambda'}^D$ とすると、

$$z_2^D g_\lambda^D(\omega; J_\lambda^D) = z_2'^D g_{\lambda'}^D(\omega; J_{\lambda'}^D), \quad (2.55)$$

$$z_3^{D-1} \Gamma_\lambda^D(\omega; J_\lambda^D) = z_3'^{D-1} \Gamma_{\lambda'}^D(\omega; J_{\lambda'}^D), \quad (2.56)$$

が成り立つ。これを用いて、

$$g_\lambda^D(\omega; J_\lambda^D) = z_2^{D-1} z_2'^D g_{\lambda'}^D(\omega; J_{\lambda'}^D), \quad (2.57)$$

$$\Gamma_\lambda^D(\omega, J_\lambda^D) = z_3^D z_3'^{D-1} \Gamma_{\lambda'}^D(\omega; J_{\lambda'}^D), \quad (2.58)$$

を得る。(2.57)式と(2.58)式の両辺に、それぞれ、 $g_0^{-1}(\omega)$, Γ_0^{-1} を掛けると、

$$d_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) = z_2^{D-1} z_2'^D d_D(\omega, \lambda'; J_{\lambda'}^D), \quad (2.59)$$

$$r_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) = z_3^D z_3'^{D-1} r_D(\omega, \lambda'; J_{\lambda'}^D), \quad (2.60)$$

となる。

さて、 J_λ^D と $J_{\lambda'}^D$ の間には、

$$J_\lambda^D = (z_3^{D-1} z_2^D / z_3'^{D-1} z_2'^D) J_{\lambda'}^D, \quad (2.61)$$

の関係が成り立つので、

$$d_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) r_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) J_\lambda^D = d_D(\omega, \lambda'; J_{\lambda'}^D) r_D(\omega, \lambda'; J_{\lambda'}^D) J_{\lambda'}^D, \quad (2.62)$$

の関係が成り立つ。(2.62)式は λ の値によらず一定なので、(2.32)式と同様に不変結合定数 J_{inv}^λ という。(2.59)式、(2.60)式は、右辺の $z_2^{D-1} z_2'^D$, $z_3^D z_3'^{D-1}$ が ω に依存せず、(2.33)式、(2.34)式に類似している。(2.59)式、(2.60)式は multiplicative renormalization の関係式である。(2.59)式、(2.60)式、(2.62)式の両辺の対数を取り、 ω/λ で微分して $\omega = \lambda'$ とおくと、リーの微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial(\omega/\lambda)} \ln A_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) = \frac{\lambda}{\omega} \frac{\partial}{\partial(\omega/\lambda')} \ln A_D(\omega, \lambda'; J_{\lambda'}^D) \Big|_{\omega=\lambda'}, \quad (2.63)$$

を得る。ただし、 A_D は $d_D, r_D, d_D r_D J_\lambda^D \equiv J_{\text{inv.}}^\lambda$ のいずれか1つを表わす。

§ 2.4.3 問題点

以上の定式化は、通常の場合の理論でなされている代表的なものを、近藤モデルに適用したものである。これからわかるように、くりこみ点と切断エネルギーは別のものである。このことをもう少し詳しくみるために、くりこみ点 λ を切断エネルギー D へ読みかえると、どのようなことが起こるかを調べてみる。§ 2.3 で行なったように、各摂動項を対数精度で調べることとし、 d と r が $(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)$ のベキとなり、 $(\ln \frac{\omega}{D} - i\pi)$ に依存しない項は無視できると仮定する。 $\lambda \rightarrow D$ とすると、対数精度で、 $g_D(D; \Gamma'_0, G_0, g_0, -J_0) = g_0(D)$, $\Gamma'_D(D; \Gamma'_0, G_0, g_0, -J_0) = \Gamma'_0$ となるから、(2.46) ~ (2.49) 式より、 $z_2^D = z_3^D = 1$, となり、 $J_D^D = -J_0$ が得られる。そこで、 $g_\lambda^D(\omega; J_\lambda) \rightarrow g_D(\omega; \Gamma'_0, G_0, g_0, -J_0)$, $\Gamma_\lambda^D(\omega; J_\lambda) \rightarrow \Gamma'_D(\omega; \Gamma'_0, G_0, g_0, -J_0)$, ($\lambda \rightarrow D$ のとき) が得られ、 $d_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) \rightarrow d(\frac{\omega}{D}, -J_0)$, $r_D(\omega, \lambda; J_\lambda^D) \rightarrow r(\frac{\omega}{D}, -J_0)$ となる。ところが、 λ' を新たな切断エネルギー D' と読みかえると、上と全く同様にして、 $z_2^{D'} = z_3^{D'} = 1$ となり、 $d(\frac{\omega}{D}, -J_0) = d(\frac{\omega}{D'}, -J_0)$, $r(\frac{\omega}{D}, -J_0) = r(\frac{\omega}{D'}, -J_0)$ となって、 D と D' による違いはどこにも現われない。これは、具体的摂動計算によらない議論において、切断エネルギーをかえても、何の意味ももたないためであり、当然である。

以上のことは、くりこみ点 λ は具体的摂動計算において実体をもたない量であるのに対し、切断エネルギー D は実体をもっているため、 λ と D の読みかえはできないことを示している。切断エネルギーによるくりこみ群の定式化には、さらに何らかの工夫が必要である。

このように、切断エネルギーによる定式化は、今のところ明確ではないが、前節で述べたように、低次の摂動の範囲で、multiplicative renormalization の成立が確かめられており、また、次節で述べるように、リー方程式の解が、 ω の零近傍で、かなり良い近似になっていることから、切断エネルギーの移動によるくりこみ群の方法を用いることに、実用上問題はないと考える。

§ 2.5 リー方程式の解に含まれる摂動項

摂動計算において、各項が大きな値をとる場合、特に、発散するような場合、摂動計算はその意味を失なう。このとき、くりこみ群の方法が有効となる。この理由を考えるために、この節では、どのような摂動項がリー方程式の解に含まれるかを、近藤モデルについて考察する。ここでは、話を簡単化するため、グリーン関数のポールからの寄与、すなわち、摂動計算中に現われる虚数部 $i\pi$ を無視する。そこで、 J' と $J_{\text{inv.}}$ を同一視し、 $J' = J_{\text{inv.}} \equiv J^*$ 、と書く。

まず、 J^* に対するリー方程式 (2.40) の右辺に、最低次までの最強発散項の和、すなわち、 $-J_0(1 + 2J_0\rho \ln \frac{\omega}{D})$ を代入するとき、その解 J^* がどのような摂動項を含むかを考察する。項 $-J_0(1 + 2J_0\rho \ln \frac{\omega}{D})$ をリー方程式の右辺へ代入し、初期条件、 $\omega = D$ のとき $J^* = -J_0$ を用いて解くと、

$$J_1^* = -J_0/t, \quad t \equiv 1 - 2J_0\rho\xi, \quad \xi \equiv \ln(\omega/D), \quad (2.64)$$

となる。この解は、最強発散項 $J_0^n(\rho \ln \frac{\omega}{D})^{n-1}$ (n は自然数) のみを含む。

この解以外に、 J^* に含まれる最強発散項があるかどうかを調べる。そのために、第2発散項までの和をリー方程式の右辺へ代入した式 (2.43) を解くと、

$$J_2^* = -J_0\left(\frac{1}{t} - J_0\rho \frac{\ln t}{t^2}\right) + O(J_0^3\rho^2 t), \quad (2.65)$$

となる²⁰⁾。ここで、 $J_0^2\rho \ln t/t^2$ は第2発散項 $J_0^n\rho^{n-1}(\ln \frac{\omega}{D})^{n-2}$ であり、 $O(J_0^3\rho^2 t)$ は第3発散項以下、 $J_0^n\rho^{n-1}(\ln \frac{\omega}{D})^{n-3}$ 、 $J_0^n\rho^{n-1}(\ln \frac{\omega}{D})^{n-4}$ 、 \dots 、を示す。(2.64)式と(2.65)式を比べることにより、(2.64)式がすべての最強発散項を含むことがわかる。

つぎに、 J^* に対するリー方程式の右辺に第2発散項まで代入したときの解 (2.65) を考える。そのために、リー方程式の右辺に第3発散項まで代入したときの式を

$$\frac{\partial \ln J^*}{\partial \xi} = -2J^*\rho + 2(J^*\rho)^2 + a(J^*\rho)^3, \quad (2.66)$$

とおく。ここで、 a は次節で求める、摂動計算における第3発散項の係数である。(2.66)式は、第3発散項までで、次のように解くことができる。

$$J_3^* = -\frac{1}{t}J_0 + \frac{\ln t}{t^2}J_0^2\rho + f(t)J_0^3\rho^2 + O(J_0^4\rho^3 t), \quad (2.67)$$

$$f(t) = \frac{1}{t^2}\left[1 - \frac{(\ln t)^2}{t} + \frac{\ln t}{t} + \left(1 + \frac{a}{2}\right)\left(\frac{1}{t} - 1\right)\right]. \quad (2.67a)$$

(2.65)式と(2.67)式を比べると、次のことがわかる。解(2.65)はすべての最強発散項とすべての第2発散項を含む。さらに、(2.67a)式で $a=0$ とおいた式が、(2.43)式の解(2.65)の第3発散項であるから、(2.65)式の第3発散項には、 $\ln(\omega/D)$ の1次の項、すなわち、項 $J_0^4 \rho^3 \ln(\omega/D)$ は含まれないことがわかる。また、(2.65)式の第3発散項は、 $J_0^4 \rho^3 \ln(\omega/D)$ のベキ、および、この項と最強発散項または第2発散項との積を含まないことがわかる。例えば、 $|J_0 \rho \ln(\omega/D)| \sim 1$ のとき、同じオーダーである $J_0^5 \rho^4 (\ln(\omega/D))^2$ と $J_0^4 \rho^3 (\ln(\omega/D))$ のうち、最強発散項 $J_0^2 \rho \ln(\omega/D)$ と第2発散項 $J_0^3 \rho \ln(\omega/D)$ の積として得られる $J_0^5 \rho^4 (\ln(\omega/D))^2$ は、(2.65)式の第3発散項に含まれるが、最強発散項と第2発散項の積、および、ベキでは与えられない項 $J_0^4 \rho^3 \ln(\omega/D)$ は含まれない。いま、(2.65)式の第2発散項までの解の正しさは、 J_0 の5次までの実際の摂動計算により確かめられている²⁰⁾。

以上のことより、リー方程式の右辺に第2発散項または第3発散項まで入れたときの解は、 ω がより零に近いとき ($|J_0 \rho \ln(\omega/D)| \gg 1$ のとき)、よい近似になっており、それ故、 ω の零近傍で、この解を用いて得た結果は、かなり良いものを与えるはずであることがわかる。ただし、 $J_0 > 0$ または $J_0 < 0$ により、リー方程式の解の正しさの程度に、つぎのような差がある。 $J_0 > 0$ であれば、 $\omega \rightarrow 0$ で $J^* \rightarrow 0$ となるので、 J^* の高次の項はほとんど影響せず、リー方程式の解は、定量的にも正しいと考えられる。しかし、 $J_0 < 0$ のときは、 $\omega \rightarrow 0$ で強結合となるので、リー方程式の右辺の J^* の高次の項が効いてくるため、定量的には正しくない。ただし、上に説明したような項を J^* が含むため、定性的には正しい結果を与えるであろう。

ここで、特に次のことは注意されなければならない。§2.2と§2.3で述べたように、強結合領域では、最強発散項までのリー方程式の解が発散し、有効結合定数が有限温度に特異点をもつ。これは、短距離型相互作用をする純粋な1次元系では、有限温度で相転移が起きないという事実と反する。したがって、第2発散項までのリー方程式を解くことによって、強結合領域で、有効結合定数に有限の値の固定点が現われ、定性的に正しい結果が得られる。

§ 2.6 近藤モデルの3次のくりこみと帯磁率

この節では、近藤モデルについて、§2.3で述べたものより、もう1つ高次の計算と、帯磁率の計算方法を述べる。これらにより、くりこみ群の方法の意味と限界について考察する。

§ 2.6.1 3次のくりこみと固定点

リー方程式(2.43)の右辺のもう1つ高次の項を求めるには、 d と r について、(2.30)式と(2.31)式のもう1つ高次の項、すなわち、 J_0^3 の項を計算する必要がある。このことは、バーテックス関数でいうと、 J_0^4 の項を計算することであり、擬フェルミオンのグリーン関数の自己エネルギーでいうと、 J_0^3 の項を計算することである。これらを計算した結果、結合定数に対するリー方程式は、局在スピンの大きさ $S = 1/2$ に対して、

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln J' = 2J'\rho + 2(J'\rho)^2 + (2 + \ln 2)(J'\rho)^3, \quad (2.68)$$

$$\xi \equiv \ln(D'/D),$$

となる²¹⁾。すなわち、前節の(2.66)式に用いた a は、 $a = 2 + \ln 2$ と計算される。ここで、我々は一般のバーテックス関数の4つの脚のエネルギーを、図2.1(a)に示したようにとり、運動量は、すべてフェルミ運動量に等しくとった。また、バンドの状態密度は図2.2のようにとった。

Abrikosov-Migdal³⁾は、局在スピン S をもつ系に対して、リー方程式を

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi'} \ln J_{\text{inv.}} &= -2J_{\text{inv.}}\rho + 2(J_{\text{inv.}}\rho)^2 \\ &+ \left[\frac{8}{3}\pi(S(S+1) - \frac{1}{2}) - 4 \right] (J_{\text{inv.}}\rho)^3, \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\xi' \equiv \ln \frac{\omega}{D},$$

と得た。ここで、彼らは J' のかわりに $J_{\text{inv.}}$ を用いたが、彼らは摂動計算中に現われる虚数 $i\pi$ を無視していると考えられるので、 $J_{\text{inv.}}$ に対するリー方程式は、 J' に対するものと同じ式を与えていると考えてよいであろう。このとき、(2.69)式の右辺第3項は、 $S = 1/2$ に対して、(2.68)式のものに近いが一致しない。実際、方程式(2.68)からは、有効結合定数 $J'\rho$ の固定点は0.5670となり、方程式(2.69)からは、 $S = 1/2$ に対して、 $J_{\text{inv.}}\rho$ の固定点は0.5744となる。どちらもリー方程式(2.43)から得られる固定点の値1よりは零に近づく。

この不一致の理由の1つは、次のことが考えられる。リー方程式の右辺第3項は、一般的なバーテックス関数の4本の足のエネルギー・運動量のとり方、および、バンドの状態密度の形に依存する。すなわち、この項はユニバーサルではない。他方、リー方程式右辺の第1項と第2項は上のような取り方には依存せず、ユニバーサルである。くりこみ群の計算で、上に述べ

たように、第3発散項がユニバーサルでないことは、近藤温度、および、帯磁率の高温展開を計算し、数値計算にもとづかれた Wilson の結果²²⁾と比較することによっても確かめられる²¹⁾。さらに、第3発散項がユニバーサルでないことは、1次元電子系 BGD モデルにおいても議論されている^{23,24)}。

さて、くりこみ群の方法で定性的に正しい結果を得るには、第2発散項まで計算することが必要であったが、上の議論から、さらに高次の項を計算することは、ほとんど意味がないことが理解される。

§ 2.6.2 帯磁率

つぎに帯磁率を計算する。 g 因子、ボーア磁子 μ_B 、外部磁場 h 、局在スピンの z 成分 S_z 、および、擬フェルミオンの演算子を用いて、ゼーマン・エネルギーの項を

$$H_z = -g \mu_B h \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} S_z a_{\alpha} , \quad (2.70)$$

と書くと、系の自由エネルギーは

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln [\text{Tr} (e^{-\beta(H+H_z)})] , \quad (2.71)$$

となる。ここで、 $\beta = 1/k_B T$ (k_B : ボルツマン定数) で、 H は全ハミルトニアン (2.1) である。(2.71) 式を H_z が小さいとして展開し、磁場によるエネルギーの変化を、 $-(1/2) \cdot \chi h^2$ とおくと、帯磁率 χ は

$$\chi = (g \mu_B)^2 \int_0^{\beta} d\tau \langle e^{\tau H} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} S_z a_{\alpha} e^{-\tau H} \sum_{\alpha'} a_{\alpha'}^{\dagger} S_z a_{\alpha'} \rangle , \quad (2.72)$$

となる。ただし、 $\langle A \rangle$ は熱平均 $\text{Tr} (A e^{-\beta H}) / \text{Tr} (e^{-\beta H})$ を意味する。さらに、 J_0 のベキ級数の形に展開して、

$$\chi = \frac{(g \mu_B)^2 S(S+1)}{3 k_B T} M'^2 (T, -J_0) , \quad (2.73)$$

を得る。ここで M' は J_0 のベキ級数であり、局在スピンの縮みを表わす。局在スピン S_z の、あるスピン状態での期待値

$$\langle S_z \rangle = \frac{\langle 0 | \widetilde{a}_{\alpha}^{\dagger} \sum_{\alpha'} a_{\alpha'}^{\dagger} S_z a_{\alpha'} \widetilde{a}_{\alpha} | 0 \rangle}{\langle 0 | \widetilde{a}_{\alpha} \widetilde{a}_{\alpha}^{\dagger} | 0 \rangle} , \quad (2.74)$$

を(2.73)式に用いる。ここで、スピンの大きさは、擬フェルミオンのノルムで規格化したものによって与えられる^{3,21,25,26}。

いま、 S_z のくりこみ変換を

$$S_z \rightarrow \alpha_2 S_z, \quad (2.75)$$

とすると、期待値(2.74)は、くりこみ変換(2.45)と(2.75)のもとに不変である。§2.4で述べたように、くりこみ変換と切断 D との関係はつけられていないが、このことから、次のように考えられる。(2.74)式は不変結合定数(2.32)、あるいは、規格化された T 行列(2.20)に対応し、(2.74)式は D の値にかかわらず一定で、multiplicative renormalizationの関係

$$A(\omega/D, -J_0) = z A(\omega/D', J'), \quad z = 1, \quad (2.76)$$

が成り立つ。ここで、期待値(2.74)を A と書いた。

(2.76)式の両辺の対数を取り、 ω/D で微分し、 $D' = \omega$ とおくことにより、リー方程式(2.42)を得る。このリー方程式は、最初に、Abrikosov-Migdal³⁾が与えた。(2.74)式を計算するには、低次から適当なところまで摂動計算を行い、その結果をリー方程式(2.42)の右辺へ代入し、裸の結合定数 J_0 を J' でおきかえて解く。

以下の議論では、局在スピンの実数部の寄与だけを計算する。そこで、(2.74)式を S_z で割った商の実数部を M' として、次のリー方程式を得ることができる。

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln M' = 2(J'\rho)^2 + 6(J'\rho)^3, \quad (2.77)$$

$$\xi \equiv \ln \frac{T}{D}$$

ここで、§2.1で述べたことにより、 ω と T を入れかえた。(2.77)式の解を(2.73)式へ用いて、帯磁率を得る。

絶対零度近傍での帯磁率を、温度のべきとして求めるには、 J' の固定点の値を(2.77)式へ代入して計算する。そこで、2次のくりこみの結果、すなわち、リー方程式(2.43)から得られる反強磁性領域 $J_0 < 0$ での固定点の値 -1 を(2.77)式の右辺第1項のみに代入して χ を求めると、

$$\chi \sim T^\alpha, \quad \alpha = 3, \quad (2.78)$$

杉山忠男

となり、また、3次のくりこみの結果、すなわち、リー方程式(2.68)の固定点の値0.5670を(2.77)式の右辺の2つの項へ代入して χ を求めると、指数 α は

$$\alpha = 2.0161, \quad (2.79)$$

となる。さらに、Abrikosov-Migdal³⁾による、 $S = 1/2$ に対する不変結合定数の固定点の値0.5744を用いると、指数は

$$\alpha = 2.2292, \quad (2.80)$$

となる。これらの結果は、 $T \rightarrow 0$ のとき、 $\chi \rightarrow 0$ となることを示している。

§ 2.6.3 くりこみ群の有効性と限界

帯磁率は、最初にYosida-Okiji²⁵⁾により、直接の摂動計算から最強発散項の和が求められ、反強磁性領域 $J_0 < 0$ では、有限温度で発散するという結果が得られた。このYosida-Okijiの結果は、くりこみ群の方法では、リー方程式(2.43)で、右辺第1項だけを用いたときの J' の表式を、(2.77)式へ代入し、再び、(2.77)式の右辺第1項だけを用いることにより得ることができる³⁾。このとき、 M' は最強発散項のみを含む。これに対し、結果(2.78)を与える M' は、最強発散項 $(J_0 \rho)^n (\ln(\omega/D))^{n-1}$ と第2発散項 $(J_0 \rho)^n (\ln(\omega/D))^{n-2}$ のすべてと、第3発散項以下の一部を含む。また、結果(2.79)を与える M' は、第3発散項までのすべてと、第4発散項以下の一部を含む。すなわち、第2または第3発散項までの計算結果をリー方程式の右辺へ用いると、定性的にはかなり良い近似となり、有限温度での帯磁率の発散を除去することができる。ただし、このことは、有効結合定数が有限温度で発散することがないということの意味するのであって、帯磁率が $T \rightarrow 0$ で発散するかどうかを正しく判定するものではない。すなわち、固定点の値がわずかにずれたとき、性質が大きく変わってしまうものに対して、くりこみ群の方法は正しい結果を与えない。帯磁率を求める場合は、 $T \rightarrow 0$ で $M'^2 \propto T^\beta$ となり、 β (β は J' の固定点の値で決められる)が1より大きい小さいかで、その性質が大きく変わる。従って、上で求めた結果、 $T \rightarrow 0$ で $\chi \rightarrow 0$ は必ずしも正しいものではない。事実、基底状態からの展開、Wilsonの数値計算、あるいは、最近の厳密解でも、 $T \rightarrow 0$ のとき $\chi \rightarrow$ 有限値、という結果を与えている。これは上の議論でいうと、ちょうど β が1に等しいことを意味する。

これに対し、磁化 M' に対しては、くりこみ群の方法は定性的に正しい結果を与える。すなわち、 $T \rightarrow 0$ で $M' \rightarrow 0$ となり、基底状態は1重項である。第3章で述べる1次元電子系の

基底状態を調べる場合は、上の磁化のときと同様であり、くりこみ群の方法は威力を発揮する。

以上より、くりこみ群の方法の有効性とその限界について、次のようにまとめることができる。ただし、multiplicative renormalization の関係の一般的証明がないことについては、目をつむることにする。弱結合領域では、最低次のリー方程式を用いても、その結果は定量的にもかなり正しい。ただし、この点については、第3章、§3.9で再び議論する。強結合領域で定性的に正しい結果を得るには、第2発散項まで計算する必要がある。ただし、さらに高次の項を計算することは、ユニバーサルでなくなるため、ほとんど意味がない。また、これらの結果は、定量的には正しくない。

第2章 参考文献

- 1) M. Gell-Mann and F. E. Low, Phys. Rev. **95** (1954), 1300.
- 2) N. N. Bogoliubov and V. V. Shirkov, *Introduction to the theory of Quantized Fields*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1980), 3rd Edition,
- 3) A. A. Abrikosov and A. A. Migdal, J. Low Temp. Phys. **3** (1970), 519.
- 4) M. Fowler and A. Zawadowski, Solid State Commun. **9** (1971), 471.
- 5) J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32** (1964), 37.
- 6) C. Di Castro, Nuovo Cimento Lett. **5** (1972), 69.
- 7) P. W. Anderson, J. of Phys. **C3** (1970), 2436.
- 8) K. G. Wilson and J. B. Kogut, Phys. Rep. **12** (1974), 75.
- 9) J. Sólyom, J. of Phys. **F 4** (1974), 2269.
- 10) A. A. Abrikosov, Physics **2** (1965), 5.
- 11) I. E. Dzyaloshinskii and A. E. Larkin, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **61** (1971), 791 (Sov. Phys.—JETP **34** (1972), 422).
- 12) M. Fowler, Solid State Commun. **18** (1976), 241.
- 13) E. H. Rezayi, J. Sak and J. Sólyom, Phys. Rev. **B20** (1979), 1129.
- 14) N. Menyhárd and J. Sólyom, J. Low Temp. Phys. **12** (1973), 529.
- 15) 例えば、近藤モデルの有限温度の計算については、芳田奎, 磁性Ⅱ—金属・合金(物性物理学シリーズ3), (朝倉書店, 1972), p. 149~p. 152, p. 156~p. 157.
- 16) 芳田奎, 上掲書, p. 201~p. 206.
- 17) J. Sólyom and A. Zawadowski, J. of Phys. **4** (1974), 80.
- 18) 高橋康 物性研究者のための場の量子論Ⅱ, (培風館, 1976), 第14章.
- 19) 杉山忠男, 山本隆, 斉藤輝夫, 大島洋, 物性研究 **28** (1977), 123.
- 20) A. Sakurai and A. Yoshimori, Prog. Theor. Phys. **49** (1973), 1840.

杉山忠男

- 21) 杉山忠男, 物性研究 **34** (1980), 123.
- 22) K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47** (1975), 773.
- 23) C. S. Ting, Phys. Rev. **B13** (1976), 4029.
- 24) E. H. Rezayi, J. Sak and S. Talukdar, Phys. Rev. **B19** (1979), 4757.
- 25) K. Yosida and A. Okiji, Prog. Theor. Phys. **34** (1965), 505.
- 26) 芳田奎, 磁性 II - 金属・合金 (物性物理学シリーズ 3), (朝倉書店, 1972), p. 156.

第3章 1次元電子系の理論

この章では、1次元電子系の理論としてのくりこみ群の方法とボゾン表示の方法を説明する。まず、前節で述べたくりこみ群の方法が、1次元電子系でどのように用いられるかを説明し、得られる結果を述べる。次に、ボゾン表示の方法について説明し、それを用いて、どのような結果が得られるかを述べる。

§3・1では、相互作用がスピンの依存したBGDモデル(電子間の前方散乱と後方散乱を含む)に対するくりこみ群の定式化をする。くりこみ群のリー方程式を導き、結合定数の流れ図を描く。§3・2では、いろいろな相関関数を計算し、BGDモデルの基底状態の相図を描く。

§3・3では、ボゾン表示の方法を伝統的なやり方で説明し、BGDモデルの位相ハミルトニアンを導く。§3・4では、ボゾン表示されたハミルトニアンと元のハミルトニアンの等価性について、詳しく説明する。§3・5では、いろいろな相関関数をボゾン表示し、位相で表わす。また、位相の相関関数の、ハーモニックなハミルトニアンによる期待値を計算する。

§3・6では、BGDハミルトニアンの、スピン密度演算子の部分に対するくりこみ群を述べる。このスピン密度演算子のハミルトニアンは、2次元古典サイン・ゴルドン系のものと等価になる。§3・7では、スピン密度演算子のハミルトニアンに対する、セルフコンシステント・ハーモニック近似(SCHA)を説明する。§3・8で、SCHAの結果を用いて、 $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 領域(\tilde{g}_1^{\parallel} :同じスピンをもつ電子間の後方散乱、 $2\pi v_F$ で規格化された結合定数)における相関関数のふるまいを調べる。§3・9では、弱結合領域での相関関数のふるまいを調べ、基底状態の相図を描く。

§3・1 1次元電子系におけるくりこみ群の方法

この節では、1次元電子系におけるくりこみ群の定式化をする。¹⁾ 3つの独立な結合定数

$$g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2 = g_2^{\parallel} = g_2^{\perp}.$$

をもつBGDモデルに対するくりこみ群のリー方程式を導くには、多少、技術的な事柄がある。この点をわかりやすく説明するために、ここでは、はじめ、BGDモデルの独立な結合定数を4つ、

$$g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp},$$

ととることとする。後に説明するように、実際の計算では、この4つを区別して扱うことができる。その上で、通常用いられる3つの結合定数に対するリー方程式を導く。以上の計算では切断エネルギーとして、バンド幅 $2D$ の1つだけを用いる。

BGDモデルの独立な結合定数を、3つととるためには、切断を1つだけもつモデルを考えなければならない。2つの切断をもつモデル、すなわち、バンド幅以外に、momentum transferにも切断をもつモデルを用いると、独立な結合定数は、4つととらなければならない。この問題は、附録3-Aで説明する。

§3・1・1 BGDモデルのバーテックス関数

BGDモデルの相互作用は、 g_1 と g_2 だけなので、バーテックスへの入射電子は、右向きと左向きであり、散乱電子も右向きと左向きである。入射電子、あるいは、散乱電子が2つとも右向き、あるいは左向きということはない。§2・3の(2・21)式と(2・22)式と同様に、右向き電子と左向き電子の2体のグリーン関数の連結部分から、バーテックス関数 Γ を定義する。

$$\begin{aligned} & G_{\alpha\beta r\delta}^{\parallel}(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3; x_4, t_4) \\ & \equiv \langle 0 | T \tilde{\varphi}_{2\alpha}(x_1, t_1) \tilde{\varphi}_{1\beta}(x_2, t_2) \tilde{\varphi}_{1r}^+(x_3, t_3) \tilde{\varphi}_{2\delta}^+(x_4, t_4) | 0 \rangle \\ & = G_{-\alpha\delta}(x_1 - x_4, t_1 - t_4) G_{+\beta r}(x_2 - x_3, t_2 - t_3) \\ & \quad + i \sum_{\substack{r_1, r_2 \\ r_3, r_4}} \int dx'_1 dx'_2 dx'_3 dx'_4 \int dt'_1 dt'_2 dt'_3 dt'_4 \\ & \quad \times G_{-\alpha r_1}(x_1 - x'_1, t_1 - t'_1) G_{+\beta r_2}(x_2 - x'_2, t_2 - t'_2) \\ & \quad \times \Gamma_{r_1 r_2 r_3 r_4}(x'_1, t'_1; x'_2, t'_2; x'_3, t'_3; x'_4, t'_4) \\ & \quad \times G_{+r_3 r}(x'_3 - x_3, t'_3 - t_3) G_{-r_4 \delta}(x'_4 - x_4, t'_4 - t_4). \end{aligned} \quad (3.1)$$

ここで、

$$\tilde{\varphi}_{i\alpha}(i=1, 2)$$

は、スピン α をもつハイゼンベルグ表示での電子の場の演算子であり、 G_+ と G_- は、それぞれ、右向き、および、左向き電子のハイゼンベルグ表示の演算子で書かれた1体のグリーン関数である。

(3.1) 式のフーリエ変換によって定義されるバーテックス関数 Γ は、4つの足のエネルギーと運動量に依存する。このバーテックス Γ は、近藤モデルのときと同様に、全入射粒子のエネルギーだけに依存すると近似し、^{*}) Γ の入射電子と散乱電子の運動量を、それぞれのフェルミ運動量に、また、エネルギー $\omega_1 \sim \omega_4$ を図 3.1 を示すようにとる。¹⁾ このようにとる理由は、対数発散が現われる内線の右向き電子と左向き電子のグリーン関数の対の計算に、通常現われる組み合わせ、 $\omega_1 + \omega_2$, $\omega_1 - \omega_3$, $\omega_1 - \omega_4$, が、すべて外部から与えられたエネルギー ω に等しくなるようにするためである。

裸のバーテックス関数 Γ_0 は、(3.1) 式の1次の摂動項から得られ、

$$\Gamma_0 = g_1^{\parallel} \delta_{\alpha r} \delta_{\beta \delta} \delta_{\alpha \beta} + g_1^{\perp} \delta_{\alpha r} \delta_{\beta \delta} \delta_{\alpha, -\beta} - g_2^{\parallel} \delta_{\alpha \delta} \delta_{\beta r} \delta_{\alpha \beta} - g_2^{\perp} \delta_{\alpha \delta} \delta_{\beta r} \delta_{\alpha, -\beta}, \quad (3.2)$$

である。ここで、 α, β, r, δ は、スピン \uparrow または \downarrow を表わす。これらの相互作用を図 3.2 にダイアグラムにより示す。(3.2) 式では、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} の区別がつかないように見えるが、相互作用線を用いたダイアグラムでは、図 3.2 (a) と (c) からわかるように、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} を、明

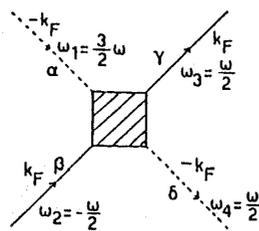


図 3.1 : 1次元電子系の摂動計算で用いられるバーテックス関数の、4つの足のエネルギーと運動量の取り方。実線は、正の運動量をもつ右向きの電子を表わし、点線は、負の運動量をもつ左向きの電子を表わす。

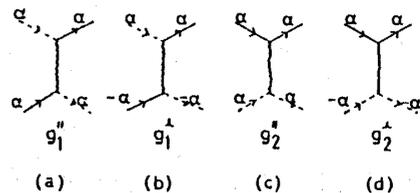


図 3.2 : スピンに依存した BGD モデルの4種類の相互作用。

*) 第2発散項までのリー方程式は、4つの足のエネルギー-運動量のとり方に依存しない。

確に区別することができる。

§ 3・1・2 multiplicative renormalization

つぎに、次元をもたないパーテックス

$$r_1^{\parallel}, r_1^{\perp}, r_2^{\parallel}, r_2^{\perp},$$

を

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} = & g_1^{\parallel} r_1^{\parallel} \left(\frac{\omega}{2D}\right) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha\beta} + g_1^{\perp} r_1^{\perp} \left(\frac{\omega}{2D}\right) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha,-\beta} \\ & - g_2^{\parallel} r_2^{\parallel} \left(\frac{\omega}{2D}\right) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\beta} - g_2^{\perp} r_2^{\perp} \left(\frac{\omega}{2D}\right) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha,-\beta}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

で定義し、また、次元をもたないグリーン関数は、 G_+ と G_- に対して同じであり、

$$G_{\pm}(\pm k_F, \omega) = d\left(\frac{\omega}{2D}\right) G_{\pm}^{(0)}(\pm k_F, \omega), \quad (3.4)$$

と定義する。ここで、複号同順である。

(3.3) 式の r_1^{\parallel} と r_2^{\parallel} は、図 3・2 の g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} のときと同様に、摂動計算をするダイアグラムにおいて、つながった電子線の最初と最後の電子が同じ向きするとき、その寄与を r_2^{\parallel} へ含め、逆向きするとき、 r_1^{\parallel} へ含めると区別する。

これらから、近藤モデルのときと同様に、multiplicative renormalization の関係を、次のように書くことができる。

$$d\left(\frac{\omega}{2D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp}\right) = z_1 d\left(\frac{\omega}{2D'}; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}\right), \quad (3.5)$$

$$r_1^{\parallel}\left(\frac{\omega}{2D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp}\right) = z_2^{-1} r_1^{\parallel}\left(\frac{\omega}{2D'}; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}\right) \quad (3.6)$$

$$r_1^{\perp}\left(\frac{\omega}{2D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp}\right) = z_3^{-1} r_1^{\perp}\left(\frac{\omega}{2D'}; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}\right) \quad (3.7)$$

$$r_2^{\parallel}\left(\frac{\omega}{2D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp}\right) = z_4^{-1} r_2^{\parallel}\left(\frac{\omega}{2D'}; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}\right) \quad (3.8)$$

$$r_2^{\perp}\left(\frac{\omega}{2D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp}\right) = z_5^{-1} r_2^{\perp}\left(\frac{\omega}{2D'}; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}\right) \quad (3.9)$$

$$g_1^{\parallel'} = z_1^2 z_2^{-1} g_1^{\parallel}, \quad g_1^{\perp'} = z_1^2 z_3^{-1} g_1^{\perp}, \quad (3.10)$$

$$g_2^{\parallel'} = z_1^2 z_4^{-1} g_2^{\parallel}, \quad g_2^{\perp'} = z_1^2 z_5^{-1} g_2^{\perp}. \quad (3.11)$$

ここで、 g_i' は g_i のくりこまれた有効結合定数である。また、 g_i は g_1^{\parallel} , g_1^{\perp} , g_2^{\parallel} , g_2^{\perp} の1つを表わす。

4つの有効結合定数 $g_1^{\parallel'}$, $g_1^{\perp'}$, $g_2^{\parallel'}$, $g_2^{\perp'}$ に対しても、multiplicative renormalization の関係を書き、それらから、次のリーの微分方程式を得る。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \ln g_i'(x; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2^{\parallel}, g_2^{\perp}) \\ &= \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial y} \ln g_i'(y; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}) \Big|_{y=1}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$x \equiv D'/D, \quad y \equiv D'/D''$$

§ 3.1.3 摂動計算

有効結合定数 g_i' に対する第2発散項までのリーの微分方程式を得るためには、バーテックス関数について3次まで、グリーン関数の自己エネルギーについて、2次まで計算する。自己エネルギー Σ と自由粒子のグリーン関数 $G_{\pm}^{(0)}$ から

$$d \equiv [1 - G_{\pm}^{(0)} \Sigma]^{-1},$$

を計算し、 d と r_i の結果を用いて、(3.5) ~ (3.11) 式のセルフコンシステントな解

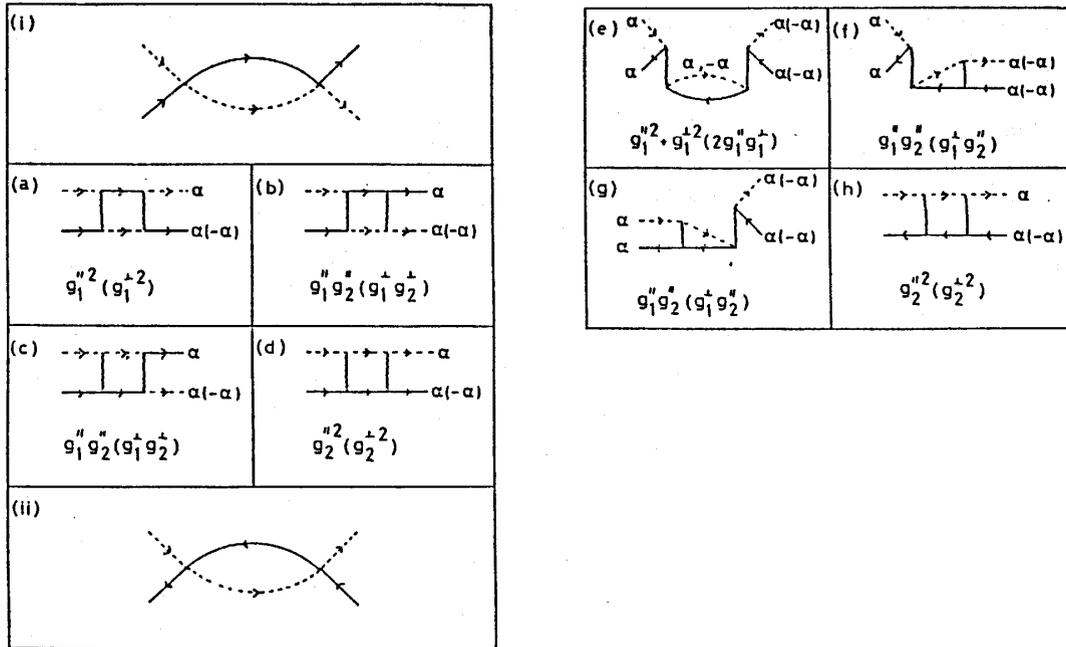
$$z_1 \sim z_5, \quad g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2^{\parallel'}, g_2^{\perp'}$$

を求める。これらの有効結合定数 $g_1^{\parallel'}$, $g_1^{\perp'}$, $g_2^{\parallel'}$, $g_2^{\perp'}$ を(3.12)式の右辺へ代入して、第2発散項までのリー方程式を得る。

2次のバーテックス関数は、表3.1に示した8つのダイアグラムを計算する。この中で、(b), (c), (e), (f), (g) の5つのダイアグラムは後方散乱のバーテックスに、(a), (d), (h) の3つのダイアグラムは前方散乱のバーテックスに寄与する。これらの結果から、次元をもたない2次のバーテックスを次のように得る。

$$r_1^{\parallel(2)} = [(\tilde{g}_1^{\parallel 2} + \tilde{g}_1^{\perp 2}) / \tilde{g}_1^{\parallel}] \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (3.13)$$

表 3・1 : BGD モデル 2 次のバーテックスのダイアグラム
と結合定数の表示.



$$r_1^{\perp(2)} = 2(\tilde{g}_1^{\parallel} + \tilde{g}_2^{\perp} - \tilde{g}_2^{\parallel}) \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (3 \cdot 14)$$

$$r_2^{\parallel(2)} = -[\tilde{g}_1^{\parallel 2} / \tilde{g}_2^{\parallel}] \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (3 \cdot 15)$$

$$r_2^{\perp(2)} = -[\tilde{g}_1^{\perp 2} / \tilde{g}_2^{\perp}] \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (3 \cdot 16)$$

ここで,

$$\tilde{g}_i \equiv g_i / (2\pi v_F),$$

である。

3 次のバーテックス関数と 2 次の自己エネルギーを計算するとき、リー方程式の右辺に現われるのは、 $\ln(D'/D)$ の 1 次の項の係数である。3 次のバーテックスの中で、図 3・3 に示す (a), (b), (c) の 3 つの相互作用線を用いないダイアグラムは、近藤モデルのときのパルケット・ダイアグラム、表 2・1 (a)~(f) に対応し、 $(\ln(\omega/2D) - i\pi/2)^2$ の寄与のみをし、 $(\ln(\omega/2D) - i\pi/2)$ の寄与をしない。したがって、 $g_i' \sim \ln^2(D'/D)$ の寄与をし、 $\ln(D'/D)$ の 1 次の寄与をしない。3 次のバーテックスに $(\ln(\omega/2D) - i\pi/2)$ の寄与をし、 $g_i' \sim \ln(D'/D)$ の寄与をするのは、図 3・4 に示す (a), (b) 2 つのダイアグラムである。

表 3・2 : 図 3・4(a) に対応する相互作用線を用いたダイヤグラムと結合定数の表示。

(a)	(b)	(g)	(h)
$\frac{1}{2} g_2'' (g_2''^2 + g_2^{\perp 2})$ $(\frac{1}{2} g_2^{\perp} (g_2''^2 + g_2^{\perp 2}))$	$\frac{1}{2} (g_1''^2 g_2'' + g_1^{\perp 2} g_2^{\perp})$ $(\frac{1}{2} (g_1''^2 g_2^{\perp} + g_1^{\perp 2} g_2''))$	$\frac{1}{2} g_1'' (g_2''^2 + g_2^{\perp 2})$ $(g_1^{\perp} g_2'' g_2^{\perp})$	$\frac{1}{2} g_1^{\perp 3}$ $(\frac{1}{2} g_1'' g_1^{\perp 2})$
(c)	(d)		
$\frac{1}{2} g_1'' g_2''^2$ $(\frac{1}{2} g_1'' g_2'' g_2^{\perp})$	$\frac{1}{2} g_1'' g_2''^2$ $(\frac{1}{2} g_1'' g_2'' g_2^{\perp})$		
(e)	(f)		
$\frac{1}{2} g_1'' g_2''^2$ $(\frac{1}{2} g_1'' g_1^{\perp} g_2^{\perp})$	$\frac{1}{2} g_1'' g_2''^2$ $(\frac{1}{2} g_1'' g_1^{\perp} g_2^{\perp})$		

これら2つのダイヤグラムは同じ寄与をするので、(a) のダイヤグラムの計算のみを表 3・2 に示す。表 3・2 から得られる結果は

$$r_1^{\parallel(3)} = (2 \tilde{g}_1^{\parallel} \tilde{g}_2^{\parallel} - \tilde{g}_2^{\parallel 2} - \tilde{g}_2^{\perp 2}) \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (3 \cdot 17)$$

$$r_1^{\perp(3)} = (2 \tilde{g}_1^{\parallel} \tilde{g}_2^{\perp} - 2 \tilde{g}_2^{\parallel} \tilde{g}_2^{\perp}) \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (3 \cdot 18)$$

$$r_2^{\parallel(3)} = [(-\tilde{g}_1^{\parallel 3} + \tilde{g}_1^{\parallel 2} \tilde{g}_2^{\parallel} + \tilde{g}_1^{\perp 2} \tilde{g}_2^{\perp} - 2 \tilde{g}_1^{\parallel} \tilde{g}_2^{\parallel 2})$$

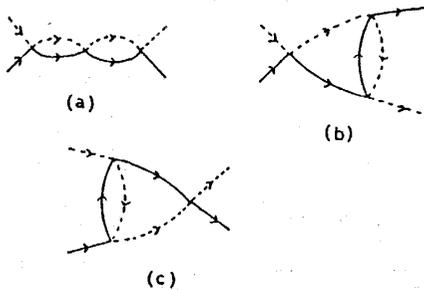


図 3・3 : BGD モデル 3 次のバーテックスの最強発散項を与えるダイヤグラム。

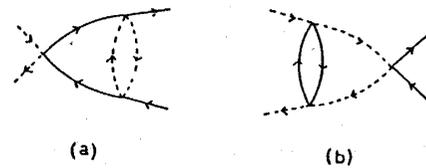


図 3・4 : BGD モデル 3 次のバーテックスに第 2 発散項の寄与をするダイヤグラム。

$$+ \frac{\tilde{g}_2^{\parallel 3} + \tilde{g}_2^{\parallel} \tilde{g}_2^{\perp 2}}{\tilde{g}_2^{\parallel}} \left] \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right) \quad (3.19)$$

$$r_2^{\perp(3)} = \left[\left(-\tilde{g}_1^{\perp 2} \tilde{g}_1^{\parallel} + \tilde{g}_1^{\parallel 2} \tilde{g}_2^{\perp} + \tilde{g}_1^{\perp 2} \tilde{g}_2^{\parallel} - 2 \tilde{g}_1^{\parallel} \tilde{g}_2^{\perp} \tilde{g}_2^{\parallel} \right. \right. \\ \left. \left. + \tilde{g}_2^{\perp} \tilde{g}_2^{\parallel 2} + \tilde{g}_2^{\perp 3} \right) / \tilde{g}_2^{\perp} \right] \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right) \quad (3.20)$$

である。

次に自己エネルギーについて考察する。1次の項は対数発散の寄与をしない。いまの場合、対数精度の計算なので、この項を無視する。2次の自己エネルギーは、図3・5に示すダイアグラムを計算する。この計算を表3・3に示す。これから2次の自己エネルギーは

$$\Sigma(2) = \left[\frac{1}{2} (\tilde{g}_1^{\parallel 2} + \tilde{g}_1^{\perp 2}) - \tilde{g}_1^{\parallel} \tilde{g}_2^{\parallel} + \frac{1}{2} (\tilde{g}_2^{\parallel 2} + \tilde{g}_2^{\perp 2}) \right] \\ \times (\omega - \epsilon_k) \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right) \quad (3.21)$$

$$\epsilon_k = v_F (|k| - k_F),$$

となる。自己エネルギー Σ から

$$d = [1 - G^{(0)} \Sigma]^{-1},$$

を求め、さらに、(3.13) ~ (3.20) 式から

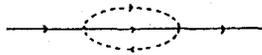


図 3.5 : BGD モデル 2 次の自己エネルギーのダイアグラム。

表 3.3 : BGD モデル 2 次の自己エネルギーを表わす相互作用線を用いたダイアグラムと結合定数の表示。

(a)	$\frac{1}{2} (g_1^{\parallel 2} + g_1^{\perp 2})$
(b)	$\frac{1}{2} g_1^{\parallel} g_2^{\parallel}$
(c)	$\frac{1}{2} g_1^{\parallel} g_2^{\perp}$
(d)	$\frac{1}{2} (g_2^{\parallel 2} + g_2^{\perp 2})$

$$\frac{\partial \tilde{g}_1^{\parallel'}}{\partial \xi} = \tilde{g}_1^{\parallel'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2} + \tilde{g}_1^{\parallel'} (\tilde{g}_1^{\parallel'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2}), \quad (3 \cdot 22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{g}_1^{\perp'}}{\partial \xi} &= 2\tilde{g}_1^{\perp'} (\tilde{g}_1^{\parallel'} + \tilde{g}_2^{\perp'} - \tilde{g}_2^{\parallel'}) + \tilde{g}_1^{\perp'} (\tilde{g}_1^{\parallel'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2}) \\ &\quad + 2\tilde{g}_1^{\perp'} \tilde{g}_1^{\parallel'} (\tilde{g}_2^{\perp'} - \tilde{g}_2^{\parallel'}) + \tilde{g}_1^{\perp'} (\tilde{g}_2^{\perp'} - \tilde{g}_2^{\parallel'})^2, \end{aligned} \quad (3 \cdot 23)$$

$$\frac{\partial \tilde{g}_2^{\parallel'}}{\partial \xi} = \tilde{g}_1^{\parallel'2} + \tilde{g}_1^{\parallel'3} + \tilde{g}_1^{\perp'2} (\tilde{g}_2^{\parallel'} - \tilde{g}_2^{\perp'}), \quad (3 \cdot 24)$$

$$\frac{\partial \tilde{g}_2^{\perp'}}{\partial \xi} = \tilde{g}_1^{\perp'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2} \tilde{g}_1^{\parallel'} + \tilde{g}_1^{\perp'2} (\tilde{g}_2^{\perp'} - \tilde{g}_2^{\parallel'}), \quad (3 \cdot 25)$$

$$\xi \equiv \ln(D'/D),$$

を得る。²⁾ (3・24) 式と (3・25) 式を見ると、ある D' の値のところ、 $\tilde{g}_2^{\parallel'} = \tilde{g}_2^{\perp'}$ であっても、 $\tilde{g}_1^{\parallel'} \neq \tilde{g}_1^{\perp'}$ 、であれば、 $\tilde{g}_2^{\parallel'}$ と $\tilde{g}_2^{\perp'}$ は $D' \rightarrow 0$ のとき、別々にくりこまれることがわかる。すなわち、 $\tilde{g}_1^{\parallel'}$ と $\tilde{g}_2^{\parallel'}$ を別々に扱うかぎり、たとえ裸の結合定数が $\tilde{g}_2^{\parallel'} = \tilde{g}_2^{\perp'}$ であったとしても、 $\tilde{g}_1^{\parallel'} \neq \tilde{g}_1^{\perp'}$ 、であれば、 $\tilde{g}_2^{\parallel'}$ と $\tilde{g}_2^{\perp'}$ は異なる。

§ 3・1・4 スケーリング

リー方程式 (3・22) ~ (3・25) から得られる有効結合定数の固定点は、2種類あり、次のように得ることができる。²⁾

$$\left. \begin{aligned} \tilde{g}_1^{\parallel'} &\rightarrow -1, \quad |\tilde{g}_1^{\perp'}| \rightarrow 1, \\ \tilde{g}_2^{\parallel'} &\rightarrow -\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\alpha}}{2}, \quad \tilde{g}_2^{\perp'} \rightarrow -\frac{1}{2} + \frac{\tilde{\alpha}}{2}, \end{aligned} \right\} \quad (3 \cdot 26)$$

$$\tilde{\alpha} \equiv \tilde{g}_1^{\parallel'} - \tilde{g}_2^{\parallel'} - \tilde{g}_2^{\perp'},$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{g}_1^{\parallel'} &\rightarrow 0, \quad \tilde{g}_1^{\perp'} \rightarrow 0, \\ \tilde{g}_2^{\parallel'} &\rightarrow -\frac{\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}}{2}, \quad \tilde{g}_2^{\perp'} \rightarrow -\frac{\tilde{\alpha} - \tilde{\beta}}{2}, \end{aligned} \right\} \quad (3 \cdot 27)$$

$$\beta \equiv [(2\tilde{g}_1^\perp + \tilde{\alpha})^2 - \tilde{g}_1^{\perp 2}]^{1/2}.$$

ここで、(3.26)式のようにスケールされる結合定数の領域を、強結合領域、(3.27)式のようにスケールされる領域を弱結合領域と呼ぶことにする。弱結合領域では、後方散乱の結合定数がすべて零にスケールされる。また、この弱結合領域の固定点の値は最低次のリー方程式から得たものであり、この最低次の方程式は、附録3-Aに述べる切断を2つもつモデルでも、変化しないことが知られている。³⁾ そこで、この領域の性質は、2つの切断をもつモデルでも保たれる(附録3-A参照)。

ただし、次のことを注意しておかねばならない。1つの切断をもつモデルでは、次節に述べる相関関数の計算において、 \tilde{g}_1^{\parallel} と \tilde{g}_2^{\parallel} が常に $\tilde{g}_1^{\parallel} - \tilde{g}_2^{\parallel}$ の形で現われ、独立な結合定数を3つから4つへ増やすことのメリットは現われない。それ故、以下では、3つの独立な結合定数

$$g_1^{\parallel}, g_1^\perp, g_2 = g_2^{\parallel} = g_2^\perp,$$

に対するくりこみ群のリー方程式を導き、それをもとに、議論を進める。

3つの独立な結合定数に対するリー方程式を導くには、(3.22)~(3.25)式で、単に、 $\tilde{g}_2^{\parallel} = \tilde{g}_2^\perp$ 、とおくだけでなく、くりこまれ方、すなわち、リー方程式の右辺も、 g_2^{\parallel} と g_2^\perp について等しくしなければならない。このような操作を加えて、

$$\frac{\partial \tilde{g}_1^{\parallel'}}{\partial \xi} = 2\tilde{g}_1^{\perp'2} + 2\tilde{g}_1^{\perp'2}\tilde{g}_1^{\parallel'}, \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \tilde{g}_1^{\perp'}}{\partial \xi} = 2\tilde{g}_1^{\perp'}\tilde{g}_1^{\parallel'} + \tilde{g}_1^{\perp'}(\tilde{g}_1^{\parallel'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2}), \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial \tilde{g}_2^{\perp'}}{\partial \xi} = \tilde{g}_1^{\perp'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2}\tilde{g}_1^{\parallel'}, \quad (3.30)$$

を得る。⁴⁾ (3.29)式は、(3.23)式で、 $\tilde{g}_2^{\parallel'} = \tilde{g}_2^{\perp'}$ 、とおくことにより得られる。(3.30)式は、 $\tilde{g}_2^{\perp'} = \tilde{g}_2^{\parallel'} = \tilde{g}_2^{\perp'}$ 、として、 $\tilde{g}_2^{\perp'}$ の方程式(3.25)を $\tilde{g}_2^{\perp'}$ の方程式とみなせばよい。(3.28)式は、 $\tilde{g}_2^{\parallel'}$ の方程式(3.24)の右辺を(3.25)式の右辺に等しいとおき、その差を(3.22)式に加えることにより、得られる。

リー方程式(3.28)、(3.29)から、図3.6に示すスケーリングの軌跡図を得る。近藤モデルのときと同様に、裸の結合定数は弱結合、 $|\tilde{g}_i| \ll 1$ を考える。図3.6からわかるように、領域 $|\tilde{g}_1^\perp| > \tilde{g}_1^{\parallel}$ は強結合領域で、固定点は

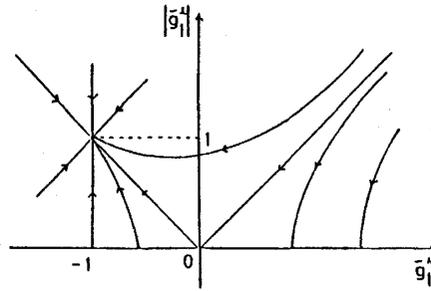


図 3.6 : BGD モデルのスケーリングによる結合定数の軌跡図。

$$(\tilde{g}_1^{\parallel'}, |\tilde{g}_1^{\perp'}|) = (-1, 1),$$

である。また、領域 $|\tilde{g}_1^{\perp'}| < \tilde{g}_1^{\parallel'}$ は弱結合領域で、固定点は

$$(\tilde{g}_1^{\parallel'}, |\tilde{g}_1^{\perp'}|) = ((\tilde{g}_1^{\parallel'2} - \tilde{g}_1^{\perp'2})^{1/2}, 0),$$

である。ただし、弱結合領域では、リー方程式の第 2 発散項からの寄与は小さいので、最強発散項のみを考慮して、固定点の値を求めた。強結合領域と弱結合領域の境界は、

$$|\tilde{g}_1^{\perp'}| = \tilde{g}_1^{\parallel'},$$

である。また、(3.28) 式と (3.30) 式から、 ξ の変化に対し

$$\tilde{\alpha} = \tilde{g}_1^{\parallel'} - 2\tilde{g}_2',$$

が不変であることがわかる。すなわち、 $\tilde{\alpha}$ はくりこみ不変な定数である。

以上は、1次元電子系の中でも基本的な BGD モデルの後方散乱と前方散乱の結合定数 g_1 と g_2 に対するリー方程式の導出を説明したものであるが、 g_3 あるいは g_4 の結合定数をもつモデルに対しても、上と同様に、リー方程式を得ることができる。⁵⁻⁷⁾ また、ここでは第 2 発散項までを計算したが、近藤モデルのときと同様に、第 3 発散項まで計算することができる。^{8, 9)} ただし、この場合も、一般的なバーテックスの脚のエネルギー・運動量の取り方などによって、リー方程式の第 3 発散項は変化する。すなわち、第 3 発散項はユニバーサルではない。

§ 3・2 くりこみ群の方法を用いた相関関数の計算

1次元電子系では、超伝導秩序（ゆらぎ）が低温で形成され得るほか、電荷密度波、あるいは、スピン密度波などの秩序（ゆらぎ）が形成される。これらを調べるには、対応するオーダー・パラメータの相関関数（応答関数）を計算すればよい。そこで、この節では、いろいろな相関関数の低温でのふるまいを調べ、それから、1次元電子系 BGD モデルの基底状態の相関関数をつくる。

§ 3・2・1 相関関数とくりこみ

ハイゼンベルグ表示の演算子で書かれたオーダー・パラメータを $\tilde{O}(k, t)$ とすると、一般に相関関数は、

$$R(k, \omega) = -i \int dt e^{-i\omega t} \langle 0 | T \tilde{O}(k, t) \tilde{O}^\dagger(k, 0) | 0 \rangle, \quad (3\cdot31)$$

と書ける。ここで、 T は時間順序積であり、 $|0\rangle$ はフェルミ球である。次の6つのオーダー・パラメータからつくられる相関関数を計算する。^{2,4)}

(I) $2k_F$ -電荷密度波 ($2k_F$ -CDW), N_2 ,

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{\text{CDW}}(k, t) = L^{-1/2} \sum_{k_1} [& \tilde{b}_{k_1\uparrow}^\dagger(t) \tilde{a}_{k_1+k,\uparrow}(t) \\ & + \tilde{b}_{k_1\downarrow}^\dagger(t) \tilde{a}_{k_1+k,\downarrow}(t)], \end{aligned} \quad (3\cdot32)$$

(II) 縦波のスピン密度波 (LSDW), χ_L ,

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{\text{LSDW}}(k, t) = L^{-1/2} \sum_{k_1} [& \tilde{b}_{k_1\uparrow}^\dagger(t) \tilde{a}_{k_1+k,\uparrow}(t) \\ & - \tilde{b}_{k_1\downarrow}^\dagger(t) \tilde{a}_{k_1+k,\downarrow}(t)], \end{aligned} \quad (3\cdot33)$$

(III) 横波のスピン密度波 (TSDW), χ_T ,

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{\text{TSDW}}(k, t) = L^{-1/2} \sum_{k_1} [& \tilde{b}_{k_1\uparrow}^\dagger(t) \tilde{a}_{k_1+k,\downarrow}(t) \\ & + \tilde{b}_{k_1\downarrow}^\dagger(t) \tilde{a}_{k_1+k,\uparrow}(t)], \end{aligned} \quad (3\cdot34)$$

(IV) 1重項超伝導 (SS), Δ_s ,

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{SS}(k, t) = L^{-1/2} \sum_{k_1} [& \tilde{b}_{k_1 \uparrow}(t) \tilde{a}_{-k_1+k, \downarrow}(t) \\ & + \tilde{a}_{k_1 \uparrow}(t) \tilde{b}_{-k_1+k, \downarrow}(t)], \end{aligned} \quad (3.35)$$

(V) 3重項超伝導 $S_z = 0$ (TS0), Δ_{T0} ,

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{TS0}(k, t) = L^{-1/2} \sum_{k_1} [& \tilde{b}_{k_1 \uparrow}(t) \tilde{a}_{-k_1+k, \downarrow}(t) \\ & - \tilde{a}_{k_1 \uparrow}(t) \tilde{b}_{-k_1+k, \downarrow}(t)], \end{aligned} \quad (3.36)$$

(VI) 3重項超伝導 $S_z = \pm 1$ (TS1), Δ_{T1} ,

$$\tilde{O}_{TS1}(k, t) = 2L^{-1/2} \sum_{k_1} \tilde{b}_{k_1 \alpha}(t) \tilde{a}_{-k_1+k, \alpha}(t), \quad \alpha = \uparrow \text{ または } \downarrow. \quad (3.37)$$

ここで, $N_2, \chi_L, \chi_T, \Delta_s, \Delta_{T0}, \Delta_{T1}$ は, それぞれのオーダ・パラメータの相関関数を表わす記号である。

相関関数は, s - d モデルの磁気モーメントとは異なり, § 2.4 で述べたようなくりこみ変換に対し, 不変ではない。また, 非摂動項からも対数発散が現われる。そのため, 相関関数に対しては, multiplicative renormalization の関係が成り立たない。実際, 結合定数 g_i に関する2次までの具体的な摂動計算の結果から,

$$\begin{aligned} R\left(\frac{\omega}{D'}; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2'\right) = z_R R\left(\frac{\omega}{D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2\right) \\ + C\left(\frac{D'}{D}; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2\right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

が成り立つと予想されている。⁴⁾ ここで, C は D'/D に依存した関数である。

(3.38) 式の両辺を $\ln \omega$ で微分した式*)

$$\bar{R} = \pi v_F \frac{\partial R_i}{\partial \ln \omega}, \quad (3.39)$$

については multiplicative renormalization の関係が成り立つと考えられるので, \bar{R} に関するり

*) 以下の相関関数の計算では, 虚数部 $i \cdot \pi/2$ を一律に落とす。

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \bar{R}(x; g_1^{\parallel}, g_1^{\perp}, g_2)$$

$$= \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial y} \ln \bar{R}(y; g_1^{\parallel'}, g_1^{\perp'}, g_2') \Big|_{y=1}, \quad (3 \cdot 40)$$

$$x \equiv \frac{\omega}{2D}, \quad y \equiv \frac{\omega}{2D'},$$

をつくり、この式の右辺に摂動計算の結果を代入する。¹⁰⁾

相関関数に対するくりこみ群のリー方程式を得るには、 $\ln(\omega/2D)$ の2乗の項の係数を計算する。相関関数の g_i に関する1次の項は、表3・4に示すダイアグラムを計算する。ただし、TS0の相関関数のダイアグラムは、SSのものと同じであり、LSDWのものは $2k_F$ -CDWのものと同一である。 g_i に関する2次で $\ln^2(\omega/2D)$ の寄与をする項は、各相関関数に共通で、そのダイアグラムを表3・5に示す。これらの結果を用いて、次のリー方程式を得る。^{2, 4)}

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{N}_2 = 2(\tilde{g}_1^{\perp'} + \tilde{g}_1^{\parallel'} - \tilde{g}_2') + F, \quad (3 \cdot 41)$$

表 3・4 : 相関関数の相互作用に関する1次の項のダイアグラムと結合定数の表示。

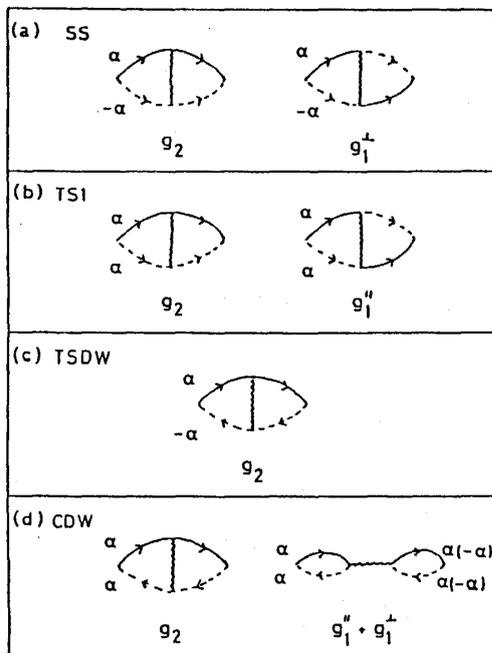
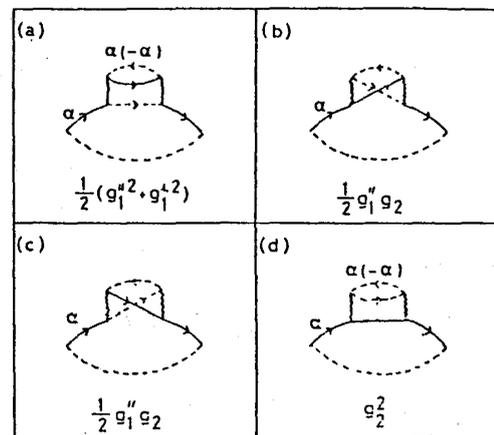


表 3・5 : 相関関数の第2発散項を与える、相互作用に関して2次のダイアグラムと結合定数の表示。



$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{\chi}_L = 2(-\tilde{g}_1^{\perp'} + \tilde{g}_1^{\parallel'} - \tilde{g}_2') + F, \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{\chi}_T = -2\tilde{g}_2' + F, \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{A}_s = 2(\tilde{g}_1^{\perp'} + \tilde{g}_2') + F, \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{A}_{T0} = 2(-\tilde{g}_1^{\perp'} + \tilde{g}_2') + F, \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{A}_{T1} = 2(\tilde{g}_2' - \tilde{g}_1^{\parallel'}) + F, \quad (3.46)$$

$$F \equiv \tilde{g}_1^{\parallel'2} + \tilde{g}_1^{\perp'2} - 2\tilde{g}_1^{\parallel'}\tilde{g}_2' + 2\tilde{g}_2'^2, \quad (3.47)$$

$$\xi \equiv \ln \frac{T}{2D}.$$

§ 3.2.2 基底状態

有効結合定数の固定点の値を, (3.41) ~ (3.46) 式の右辺へ代入して, 各相関関数の 0K 近傍のふるまいを, 次のように得る。

(I) 強結合領域

$$\begin{array}{ccc} \tilde{g}_1^{\perp} < 0 & \tilde{g}_1^{\perp} > 0 & \\ N_2 \sim T^{a_1}, & a_1 = -3/2 + \tilde{\alpha}, & 5/2 + \tilde{\alpha}, \end{array} \quad (3.48)$$

$$\chi_L \sim T^{a_2}, \quad a_2 = 5/2 + \tilde{\alpha}, \quad -3/2 + \tilde{\alpha}, \quad (3.49)$$

$$\chi_T \sim T^{a_3}, \quad a_3 = 5/2 + \tilde{\alpha}, \quad 5/2 + \tilde{\alpha}, \quad (3.50)$$

$$A_s \sim T^{a_4}, \quad a_4 = -3/2 - \tilde{\alpha}, \quad 5/2 - \tilde{\alpha}, \quad (3.51)$$

$$A_{T0} \sim T^{a_5}, \quad a_5 = 5/2 - \tilde{\alpha}, \quad -3/2 - \tilde{\alpha}, \quad (3.52)$$

$$A_{T1} \sim T^{a_6}, \quad a_6 = 5/2 - \tilde{\alpha}, \quad 5/2 - \tilde{\alpha}. \quad (3.53)$$

(II) 弱結合領域

$$N_2 \sim T^{a_7}, \quad a_7 = \tilde{\alpha} + \tilde{\gamma} + \tilde{G}, \quad (3.54)$$

$$\chi_L \sim T^{a_8}, \quad a_8 = \tilde{\alpha} + \tilde{\gamma} + \tilde{G}, \quad (3.55)$$

$$\chi_T \sim T^{a_9}, \quad a_9 = \tilde{\alpha} - \tilde{\gamma} + \tilde{G}, \quad (3.56)$$

$$A_s \sim T^{a_{10}}, \quad a_{10} = -\tilde{\alpha} + \tilde{\gamma} + \tilde{G}, \quad (3.57)$$

$$A_{T0} \sim T^{a_{11}}, \quad a_{11} = -\tilde{\alpha} + \tilde{\gamma} + \tilde{G}, \quad (3.58)$$

$$A_{T1} \sim T^{a_{12}}, \quad a_{12} = -\tilde{\alpha} - \tilde{\gamma} + \tilde{G}, \quad (3.59)$$

$$\tilde{\gamma} \equiv [\tilde{g}_1^{\prime\prime 2} - \tilde{g}_1^{\prime\prime 2}]^{1/2}, \quad G \equiv (\tilde{\alpha}^2 + \tilde{\gamma}^2) / 2.$$

ここで、強結合領域に対しては、固定点の値

$$(\tilde{g}_1^{\prime\prime}, |\tilde{g}_1^{\prime\prime}|) = (-1, 1),$$

をリー方程式の右辺へ代入し、 $|\tilde{\alpha}| \ll 1$ として、 $\tilde{\alpha}$ の2次以上の項を無視した。弱結合領域については、結合定数の最低次までのリー方程式から得られる固定点の値

$$(\tilde{g}_1^{\prime\prime}, |\tilde{g}_1^{\prime\prime}|) = ([\tilde{g}_1^{\prime\prime 2} - \tilde{g}_1^{\prime\prime 2}]^{1/2}, 0),$$

を相関関数に対する式(3.41)～(3.46)の右辺のすべての項へ代入して、指数 $a_1 \sim a_6$ を求めた。

上の結果は次のように考える。温度の指数が負であれば、相関関数が $T \rightarrow 0$ で発散するので対応する秩序が $T=0$ でできかかっている。他方、温度の指数が正であれば、対応する秩序はできにくい。また、2種類あるいは3種類の相関関数が同時に発散するとき、温度の指数の絶対値が大きい程、優勢なゆらぎである。このように、温度の指数の正負、あるいは、各相関関数の温度の指数の大小を比較する場合は、くりこみ群の結果は、かなり信用できる。

弱結合領域では、 $|\tilde{\alpha}| \ll 1$, $|\tilde{\gamma}| \ll 1$, であれば、(3.48)～(3.53)の結果は、定量的にも正しい。 $|\tilde{\alpha}|$ または $\tilde{\gamma}$ が大きくなると高次の影響が出るので、(3.48)～(3.53)の結果は、

必ずしも正しくない。強結合領域では、(3.54) ~ (3.59) から得られる定性的な結果一どの相関関数が発散し、また、どのゆらぎが優勢かなど一は $|\tilde{\alpha}| \ll 1$ 、であるかぎり信用できる。ただし、5/2 とか -3/2 の数値は信用できない。第2章で説明したように、温度の指数が、例えば、1 または -1 より大きいかわ小さいかの判定が必要になる場合は、くりこみ群の方法は有効ではない。

$$\tilde{g}_1^{\parallel} = \tilde{g}_1^{\perp} \equiv \tilde{g}_1, \text{ で } |\tilde{g}_1| \ll 1, |\tilde{g}_2| \ll 1,$$

のときの基底状態の相図を図3.7に示す。

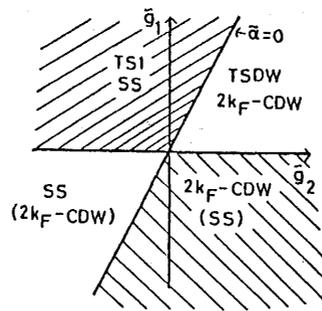


図 3.7 : くりこみ群の方法によって得られた、スピンの依存しないBGDモデルの基底状態の相図。劣勢なゆらぎは、括弧の中に示されている。

§ 3.3 ボゾン表示と位相ハミルトニアン

1次元電子系のハミルトニアンを、ボゾン演算子と類似の交換関係を満たす密度演算子により書き直し、厳密に解くことは、最初に、Tomonaga¹¹⁾によりなされた。その後、Luttinger¹²⁾とMattis-Lieb¹³⁾も類似のモデルを詳しく調べた。

この節では、伝統的な方法に従って、後方散乱と前方散乱の相互作用を含むBGDモデルのボゾン表示を説明し、位相ハミルトニアンを導く。いろいろな関係式の証明の詳細には立ち入らず、論理の厳密性にはこだわらない。これらの証明、および、論理の厳密性については、次節で述べる。

§ 3.3.1 密度演算子

電子の分散は線形であるが、エネルギーの切断は与えられず、図3.8のように、フェルミ面下は無窮までのび、下方はすべて粒子により占有されているものとする。図3.8で、 $+k_F$

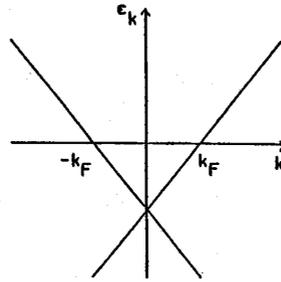


図 3・8 : ボソン表示の方法で用いられる電子の分散関係。負のエネルギーの状態は、すべて粒子により満されている。

のフェルミ面を通る直線上にある電子の演算子を、 a^\dagger, a で、 $-k_F$ を通る直線上にある電子の演算子を、 b^\dagger, b で表わす。

電荷密度演算子 ρ_1, ρ_2 、および、スピン密度演算子 σ_1, σ_2 を次のように定義する。

$$\left. \begin{aligned} \rho_1(k) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p,\alpha} a_{p+k,\alpha}^\dagger a_{p\alpha}, \\ \rho_2(k) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p,\alpha} b_{p+k,\alpha}^\dagger b_{p\alpha}, \end{aligned} \right\} \quad (3\cdot60)$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1(k) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p,\alpha} \alpha a_{p+k,\alpha}^\dagger a_{p\alpha}, \\ \sigma_2(k) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{p,\alpha} \alpha b_{p+k,\alpha}^\dagger b_{p\alpha} \end{aligned} \right\} \quad (3\cdot61)$$

ここで、 α はスピンの \uparrow または \downarrow に対応して、 $+1$ または -1 をとる。これらの密度演算子は分散が図 3・8 のように与えられると、ボゾンと類似の交換関係

$$[\rho_i(-k), \rho_j(k')] = \pm \delta_{ij} \delta_{kk'} \frac{Lk}{2\pi}, \quad (3\cdot62)$$

$$[\sigma_i(-k), \sigma_j(k')] = \pm \delta_{ij} \delta_{kk'} \frac{Lk}{2\pi}, \quad (3\cdot63)$$

$$[\sigma_i(-k), \rho_j(k')] = 0, \quad (3\cdot64)$$

$$i = 1, 2,$$

を満足することが、粒子数有限の系に対し、厳密に証明できる(次節参照)^{13,14)}。ここで、(3・62) 式と (3・63) 式の右辺の複号は、上の符号が $i = 1$ に、下の符号が $i = 2$ に対応する。

以下でも同様とする。また,

$$[A, B] = AB - BA,$$

である。

§ 3・3・2 ハミルトニアン の位相表示

いま, 自由電子のハミルトニアン

$$H_0 = \sum_{k, \alpha} v_F (k - k_F) a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \sum_{k, \alpha} (-k - k_F) b_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} \quad (1.1)$$

と (3.60) 式, (3.61) 式で定義された密度演算子の間に, 関係式

$$[\rho_i(k), H_0] = \mp v_F k \rho_i(k), \quad (3.65)$$

$$[\sigma_i(k), H_0] = \mp v_F k \sigma_i(k), \quad (3.66)$$

が成り立つ。いま, H_0 のかわりに (3.65) 式, (3.66) 式と同じ交換関係を満足するハミルトニアン H'_0 を, ρ_i と σ_i だけ用いて,

$$\begin{aligned} H'_0 = & \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{k>0} [\rho_1(k) \rho_1(-k) + \rho_2(-k) \rho_2(k) \\ & + \sigma_1(k) \sigma_1(-k) + \sigma_2(-k) \sigma_2(k)], \end{aligned} \quad (3.67)$$

と書くことができる。

前方散乱の項は, ただちに,

$$\begin{aligned} H_2 = & \frac{g_2}{L} \sum_{k_1, k_2, p} \sum_{\alpha, \beta} a_{k_1\alpha}^\dagger b_{k_2\beta}^\dagger b_{k_2+p, \beta} a_{k_1-p, \alpha} \\ = & \frac{2g_2}{L} \sum_k \rho_1(k) \rho_2(-k), \end{aligned} \quad (3.68)$$

と書ける。次に後方散乱の項を考える。Luther-Emery¹⁵⁾に従って, 後方散乱のハミルトニアンを

$$H_1 = \sum_{\alpha, \beta} (g_1^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_1^{\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) \int dx \psi_{1\alpha}^\dagger(x) \psi_{2\beta}^\dagger(x) \psi_{1\beta}(x) \psi_{2\alpha}(x), \quad (3.69)$$

と書く。ここで、

$$\psi_{1\alpha}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} a_{k\alpha}, \quad \psi_{2\alpha}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} b_{k\alpha}, \quad (3.70)$$

である。

いま、 g_1^{\parallel} の項と g_1^{\perp} の項を別々に考える。 g_1^{\parallel} の項は、ハミルトニアンが同じ形なので、 g_2^{\parallel} と同じ扱いをする。附録3-Aで述べるように、2つの切断エネルギーを用いないかぎり、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} を区別するメリットが現われないので、以下のボゾン表示の方法では、 g_1^{\parallel} 、 g_1^{\perp} 、 g_2 の3つをBGDモデルの独立な結合定数として用いる。 g_1^{\parallel} の項は、ただちに、

$$-\frac{g_1^{\parallel}}{L} \sum_k [\rho_1(k) \rho_2(-k) + \sigma_1(k) \sigma_2(-k)], \quad (3.71)$$

と書くことができる。 g_1^{\perp} の項を密度演算子で表わすために、フェルミの場の演算子を、密度演算子 $\rho_i(k)$ 、 $\sigma_i(k)$ で表わす次の表現を導入する。^{16,17)}

$$\begin{aligned} \psi'_{i\alpha}(x) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_0}} \exp \left[\pm \left\{ i k_F x - \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k A_k(x) \right. \right. \\ & \left. \left. \times (\rho_i(k) + \alpha \sigma_i(k)) \right\} \right], \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$A_k(x) = \frac{2\pi}{Lk} \exp \left(-\frac{\alpha_0 |k|}{2} - i k x \right). \quad (3.73)$$

ここで、 α_0 は k_F^{-1} 程度の切断パラメータである。

自由電子のハミルトニアン H_0 のかわりに H'_0 を、また、前方散乱の項に表式(3.68)を、 g_1^{\parallel} の項に表式(3.71)を、 g_1^{\perp} の項の場の演算子に(3.72)式を用いると、BGDモデルのハミルトニアンは、密度演算子を用いて、互いに可換である2つのハミルトニアンの和に書ける。

$$H_{\text{BGD}} = H_{\rho} + H_{\sigma} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} H_{\rho} = & \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{k>0} [\rho_1(k) \rho_1(-k) + \rho_2(-k) \rho_2(k)] \\ & + (2g_2 - g_1^{\parallel}) \frac{1}{L} \sum_k \rho_1(k) \rho_2(-k), \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$H_{\sigma} = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{k>0} [\sigma_1(k) \sigma_1(-k) + \sigma_2(-k) \sigma_2(k)]$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{g_{\parallel}^{\dagger}}{L} \sum_k \sigma_1(k) \sigma_2(-k) \\
 & + \frac{g_{\perp}^{\dagger}}{(2\pi\alpha_0)^2} \int dx \left[\exp \left\{ \sqrt{2} \sum_k A_k(x) [\sigma_1(k) + \sigma_2(k)] \right\} + \text{h.c.} \right]. \quad (3.76)
 \end{aligned}$$

H_{ρ} は電荷密度演算子 ρ_i だけで, H_{σ} はスピン密度演算子 σ_i だけで書かれている。 H_{ρ} は正準変換により簡単に対角化できるが, H_{σ} は難しい。しかし, Luther-Emery¹⁵⁾ は,

$$\tilde{g}_{\parallel}^{\dagger} = g_{\parallel}^{\dagger} / 2\pi v_F = -3/5,$$

の特別な値に対し, 仮想的フェルミオンの演算子を用いることにより, H_{σ} を対角化し, H_{σ} のスペクトルにギャップが現われることを示した。ハミルトニアン (3.75) と (3.76) は, 次のような互いに正準共役な量を導入することにより, さらに書き直される。¹⁸⁻²⁰⁾

$$\theta_{\pm}(x) = \frac{i}{\sqrt{2}} \sum_k A_k(x) \{ \rho_1(k) \pm \rho_2(k) \}, \quad (3.77)$$

$$\begin{aligned}
 P_{\pm}(x) &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \theta_{\mp}(x) \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k A_k(x) \frac{k}{2\pi} \{ \rho_1(k) \pm \rho_2(k) \}, \quad (3.78)
 \end{aligned}$$

$$\phi_{\pm}(x) = \frac{i}{\sqrt{2}} \sum_k A_k(x) \{ \sigma_1(k) \pm \sigma_2(k) \}, \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned}
 M_{\pm}(x) &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mp}(x) \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k A_k(x) \frac{k}{2\pi} \{ \sigma_1(k) \mp \sigma_2(k) \}. \quad (3.80)
 \end{aligned}$$

ここで, 交換関係

$$[\theta_{\pm}(x), P_{\pm}(x')] = [\phi_{\pm}(x), M_{\pm}(x')] = i \delta(x-x'), \quad (3.81)$$

が, $\alpha_0 \rightarrow 0$ の極限で成り立つ。(3.77) ~ (3.80) 式より, ハミルトニアン (3.75) と (3.76) は, それぞれ, $\alpha_0 \rightarrow 0$ で,

$$H_{\rho} = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_{\pm}(x)}{\partial x} \right)^2 + \pi v_F (1 + \tilde{\alpha}) P_{\pm}^2(x) \right] dx, \quad (3.82)$$

$$H_{\sigma} = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1^{\parallel}) \left(\frac{\partial \phi_+(x)}{\partial x} \right)^2 + \pi v_F (1 + \tilde{g}_1^{\parallel}) M_+^2(x) + \frac{v_F \tilde{g}_1^{\perp}}{\pi \alpha_0^2} \cos(2\phi_+(x)) \right] dx, \quad (3.83)$$

となる。ここで、§3.1と同様に、

$$\tilde{\alpha} = \tilde{g}_1^{\parallel} - 2\tilde{g}_2,$$

であり、

$$\tilde{g}_1^{\parallel} = g_1^{\parallel} / 2\pi v_F, \quad \tilde{g}_1^{\perp} = g_1^{\perp} / 2\pi v_F, \quad \tilde{g}_2 = g_2 / 2\pi v_F,$$

である。各種のオーダー・パラメータを変数 θ_{\pm} , ϕ_{\pm} で表わすことを、§3.5で行うが、そのことから、 θ_{\pm} , ϕ_{\pm} は各オーダー・パラメータの位相になっていることがわかる。そこで、(3.82)式と(3.83)式を位相ハミルトニアンという。

§3.4 フェルミ-ボーズ関係

前節では、フェルミ演算子で書かれたハミルトニアンを、密度(ボーズ)演算子で表わし、位相ハミルトニアンを導いた。ここでは、フェルミ演算子とボーズ(密度)演算子の間の2種類の関係式を用いた。第1は、フェルミ演算子からボーズ(密度)演算子をつくる関係式、第2は、ボーズ(密度)演算子からフェルミ演算子をつくる関係式である。この節では、これらの関係式が、どのような意味で成り立つのかを、詳しく考察し、ボゾン表示の方法の論理性を明確にする。

§3.4.1 密度演算子の間の交換関係

交換関係(3.62)~(3.64)は、交換子が粒子数有限の任意の状態に作用したとき、成り立つものである。以下にその証明^{13,14)}を、スピンをもたないフェルミ演算子について行う。スピンをもつ演算子についても全く同様に成り立つ。

スピンをもたないフェルミの生成・消滅演算子 a_k^{\dagger} , a_k の運動量 k のとり得る値の範囲を、 $-K \leq k \leq K$, とし、密度演算子 $\rho_1(p)$ を、

$$\rho_1(p) = \sum_{k=-K}^{K-p} a_{k+p}^{\dagger} a_k, \quad (p \geq 0) \quad (3.84)$$

で定義する。このとき、

$$\rho_1(-p) = \sum_{k=-K+p}^K a_{k-p}^\dagger a_k = \sum_{k=-K}^{K-p} a_p^\dagger a_{k+p} = \rho_1^\dagger(p), \quad (3\cdot85)$$

である。

以下、 $p \geq p' \geq 0$ 、を仮定して、 $\rho_1(-p)$ と $\rho_1(p')$ の交換関係を調べる。反交換関係

$$\{a_k, a_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}$$

と、交換関係についての一般的関係

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - \{A, C\}BD + CA\{B, D\} - C\{A, D\}B,$$

を用いて、

$$\begin{aligned} & [\rho_1(-p), \rho_1(p')] \\ &= \sum_{k, k'=-K}^{K-p} (a_k^\dagger a_{k'} \delta_{k+p, k'+p'} - a_{k'+p'}^\dagger a_{k+p} \delta_{kk'}) \\ &= \sum_{k=-K}^{K-p} a_k^\dagger a_{k+p-p'} - \sum_{k=-K}^{K-p} a_{k+p'}^\dagger a_{k+p} \\ &= \sum_{k=-K}^{-K+p} a_k^\dagger a_{k+p-p'} - \sum_{k=K-p-p'}^{K-p} a_{k+p'}^\dagger a_{k+p}, \end{aligned} \quad (3\cdot86)$$

を得る。 $k < 0$ の状態を含めて粒子数が有限の状態に、(3・86)式を作用させると、 $K \rightarrow \infty$ のとき、最右辺の第1項と第2項は共に零となる。すなわち、 $\rho_1(-p)$ と $\rho_1(p')$ は可換である。

いま、真空は負のエネルギー ($k < 0$) 状態がすべて無限数の粒子によって満たされていると考え、実在する粒子 ($k > 0$) の数のみ有限であるとする。これは、相対論的理論で信じられていることである。このような状態に(3・86)式が作用すると、最右辺第1項は $p = p'$ のとき残り、第2項は零となる。さらに、和 \sum を積分 $(L/2\pi) \int dp$ におきかえて、

$$[\rho_1(-p), \rho_1(p')] = \delta_{pp'} \frac{Lp}{2\pi}, \quad (3\cdot62a)$$

が得られる。この証明は、 $p' \geq p \geq 0$ 、についても同様になされる。

§ 3・4・2 自由エネルギー

ハミルトニアン H_0 と H'_0 で与えられるそれぞれの系の自由エネルギーを計算し、それらの等価性を考察する。¹⁴⁾ 簡単化のために、ここでも、スピンをもたないフェルミ粒子について考察する。スピンをもつ粒子についても、証明は全く同様にできる。

ボーズ演算子を、

$$b_p^\dagger = \begin{cases} i \left(\frac{2\pi}{pL} \right)^{1/2} \rho_1(p), & p > 0, \\ -i \left(\frac{2\pi}{|p|L} \right)^{1/2} \rho_2(p), & p < 0, \end{cases} \quad (3\cdot87)$$

$$b_p = \begin{cases} -i \left(\frac{2\pi}{pL} \right)^{1/2} \rho_1(-p), & p > 0, \\ i \left(\frac{2\pi}{|p|L} \right)^{1/2} \rho_2(-p), & p < 0, \end{cases} \quad (3\cdot88)$$

によって定義し、これらを自由粒子のハミルトニアン

$$H''_0 = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{k>0} [\rho_1(k) \rho_1(-k) + \rho_2(-k) \rho_2(k)], \quad (3\cdot67a)$$

へ代入して、

$$H''_0 = v_F \sum_p |p| b_p^\dagger b_p, \quad (3\cdot89)$$

を得る。ここで、 b_p^\dagger と b_p の間には、ボーズの交換関係

$$[b_p, b_{p'}^\dagger] = \delta_{pp'}, \quad (3\cdot90)$$

が成り立つ。 H''_0 は自由ボゾンのハミルトニアンである。

ハミルトニアン H''_0 で与えられる系の自由エネルギーを計算する。

$$F_{0b} = T \sum_p \ln(1 - e^{-\beta v_F |p|}) = -\frac{\pi L}{6 v_F} T^2. \quad (3\cdot91)$$

ここで、変換

$$\sum_p \rightarrow (L/2\pi) \int dp,$$

および、公式

$$\int_0^{\infty} [x / (e^x - 1)] dx = \pi^2 / 6,$$

を用い、ボルツマン定数 k_B を省いた。

自由フェルミオンのハミルトニアン H_0 で与えられる系の自由エネルギーを計算する。密度演算子の交換関係を導いたときと同様に、有限の粒子数を仮定する。すなわち、有限なフェルミ波数 k_F を用いる。また、低温を考えるとよくやるように、化学ポテンシャルをフェルミ・エネルギー

$$\epsilon_F = v_F k_F,$$

に固定する。電子の分散関係は、図 3・9 に示すものを用い、負のエネルギーを無視する。

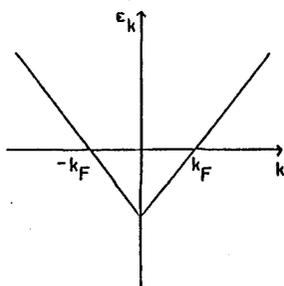


図 3・9 : 自由フェルミオンの自由エネルギーを計算するとき用いる電子の分散関係。負のエネルギーの状態は考えない。

$k > 0$ の粒子と $k < 0$ の粒子が自由エネルギーに同じ寄与をすることを考慮して、

$$\begin{aligned} F_{0f} &= -2T \sum_{k>0} \ln(1 + e^{-\beta v_F(k - k_F)}) \\ &= -\frac{L v_F k_F^2}{2\pi} - \frac{\pi L}{6 v_F} T^2 + O(e^{-\epsilon_F/T}), \end{aligned} \quad (3.92)$$

を得る。上式の計算の詳細は附録 3-B に示す。(3.92) 式の最右辺第 1 項は、自由フェルミオンの基底状態のエネルギーである。また、 $O(e^{-\epsilon_F/T})$ の項は、最初に May²¹⁾ によって示されたように、固定された粒子数 N を用いると消える。従って、 H'_0 と H_0 で与えられる系の自由エネルギーは、実質的に、完全に一致すると云ってよい。

§ 3・4・3 演算子 $\psi'_{i\alpha}(x)$ の交換関係

Theumann²²⁾ に従って、演算子 $\psi'_{i\alpha}(x)$ を次の形に書く。

$$\psi'_{i\alpha}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_0}} e^{\pm i k_F x} \exp [B_{i\alpha}^\dagger(x) - B_{i\alpha}(x)], \quad (3\cdot93)$$

$$B_{i\alpha}(x) = \sum_{k>0} \frac{\pi}{Lk} e^{-\alpha_0 k/2} e^{\pm i k x} \sqrt{2} [\rho_i(\pm k) + \alpha\sigma_i(\pm k)]. \quad (3\cdot94)$$

ここで、複号は上が $i=1$ のとき、下が $i=2$ のときとする。以下の考察では、 A, B を演算子としたときの交換関係の公式

$$e^A \cdot e^B = e^{(A+B)} \cdot e^{[A,B]/2} = e^B \cdot e^A \cdot e^{[A,B]}, \quad (3\cdot95)$$

を何回も用いる。このとき、次の交換関係が必要になる。

$$[B_{i\alpha}(x), B_{i,\alpha}^\dagger(y)] = F(\alpha_0 \pm i(x-y)), \quad (3\cdot96)$$

$$[B_{i\alpha}(x), B_{i,-\alpha}^\dagger(y)] = [B_{i\alpha}(x), B_{j\alpha}^\dagger(y)] = 0. \quad (i \neq j) \quad (3\cdot97)$$

ただし、

$$F(z) \equiv \frac{2\pi}{L} \sum_{k>0} \frac{e^{-kz}}{k} = -\ln \frac{2\pi z}{L}, \quad \text{Re } z > 0, \quad (3\cdot98)$$

である。これらの関係を用いて、次の反交換関係を得る。

$$\begin{aligned} \{\psi'_{i\alpha}(x), \psi'_{i\alpha}^\dagger(y)\} &= e^{\pm i k_F(x-y)} \exp [B_{i\alpha}^\dagger(x) - B_{i\alpha}^\dagger(y)] \\ &\quad \times \exp [B_{i\alpha}(y) - B_{i\alpha}(x)] \frac{1}{\pi} \frac{\alpha_0}{\alpha_0^2 + (x-y)^2} \\ &\rightarrow \delta(x-y), \quad (\alpha_0 \rightarrow 0), \end{aligned} \quad (3\cdot99)$$

$$\begin{aligned} \{\psi'_{i\alpha}(x), \psi'_{i\alpha}(y)\} &= e^{\pm i k_F(x+y)} \exp [B_{i\alpha}^\dagger(x) + B_{i\alpha}^\dagger(y)] \\ &\quad \times \exp [-B_{i\alpha}(x) - B_{i\alpha}(y)] \times \frac{4\pi\alpha_0}{L^2} \\ &\rightarrow 0, \quad (\alpha_0 \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (3\cdot100)$$

ここで、粒子数が有限であることを反映して、系の長さ L は有限である。

(3·99) 式、(3·100) 式は、 $\alpha_0 \rightarrow 0$ の極限で、 $\psi'_{i\alpha}(x)$ がフェルミの反交換関係を満たし

ていることを示している。ただし、異なった i , または, α をもつ演算子は可換となってしまう。すなわち,

$$[\psi'_{i\alpha}(x), \psi'_{i,-\alpha}(y)] = [\psi'_{i\alpha}(x), \psi'_{j\alpha}(y)] = 0, \quad (i \neq j). \quad (3\cdot101)$$

この関係は, α_0 と L の値にかかわらず成り立つ。

この点を改良するには, $\psi'_{i\alpha}(x)$ のかわりに, 次に定義する演算子 $\psi''_{i\alpha}(x)$ を用いる。

$$\psi''_i(x) \equiv \exp \left[i \sum_j \lambda_{ij} \hat{N}_j \right] \psi'_i(x), \quad (3\cdot102)$$

$$\hat{N}_i = \int dx \psi''_i{}^\dagger(x) \psi''_i(x) = \int dx \psi'_i{}^\dagger(x) \psi'_i(x). \quad (3\cdot103)$$

ここで, i, j は,

$$1 \equiv 1 \uparrow, \quad 2 \equiv 1 \downarrow, \quad 3 \equiv 2 \uparrow, \quad 4 \equiv 2 \downarrow,$$

のいずれか 1 つを表わし, \hat{N}_i は, それぞれの粒子数演算子である。また, 定数 λ_{ij} は, 以下で, 反交換関係を満足するように決める。

反交換関係

$$\{\psi''_i(x), \psi''_j{}^\dagger(y)\} = 0, \quad (i \neq j),$$

が成立する条件を求める。このとき, $\psi''_i(x)$ と $\psi''_j(x)$ を

$$\left. \begin{aligned} \psi''_i(x) &= e^{i\lambda_{ij}\hat{N}_j} \psi'_i(x), \\ \psi''_j(x) &= e^{i\lambda_{ji}\hat{N}_i} \psi'_j(x), \end{aligned} \right\} \quad (3\cdot102a)$$

とおく。(3・102a) 式で, 他の位相因子は, 上の反交換関係に関与しないので省く。反交換子の作用する状態を, (3・102a) 式を用いて,

$$\begin{aligned} |N''_i, N''_j\rangle &\equiv \psi''_i{}^\dagger(x_1) \cdots \psi''_i{}^\dagger(x_{N_i}) \psi''_j{}^\dagger(x_1) \cdots \psi''_j{}^\dagger(x_{N_j}) |0\rangle \\ &= e^{-i\lambda_{ij}N_iN_j} \psi'_i{}^\dagger(x_1) \cdots \psi'_i{}^\dagger(x_{N_i}) \psi'_j{}^\dagger(x_1) \\ &\quad \cdots \psi'_j{}^\dagger(x_{N_j}) |0\rangle \end{aligned}$$

$$\equiv e^{-i\lambda_{ij}N_iN_j} |N'_i, N'_j\rangle, \quad (3\cdot104)$$

と書く。以下では、係数 $e^{-i\lambda_{ij}N_iN_j}$ は c -数なので省いて議論する。そこで、

$$\begin{aligned} & \{ \psi''_i(x), \psi''_j{}^\dagger(y) \} |N'_i, N'_j\rangle \\ &= (e^{i\lambda_{ij}\hat{N}_j} \psi'_i(x) \psi'_j(y) e^{-i\lambda_{ji}\hat{N}_i} \\ & \quad + \psi'_j{}^\dagger(y) e^{-i\lambda_{ji}\hat{N}_i} e^{i\lambda_{ij}\hat{N}_j} \psi'_i(x)) |N'_i, N'_j\rangle \\ &= \exp [i \{ \lambda_{ij} (N_j + 1) - \lambda_{ji} N_i \}] \\ & \quad \times (\psi'_i(x) \psi'_j(y) + e^{i(\lambda_{ji} - \lambda_{ij})} \psi'_j{}^\dagger(y) \psi'_i(x)) |N'_i, N'_j\rangle, \end{aligned}$$

を得る。ここで、

$$\lambda_{ji} - \lambda_{ij} = (2m + 1)\pi, \quad (m : \text{整数}), \quad (3\cdot105)$$

のとき、上式は、交換関係(3・101)を用いて、

$$\begin{aligned} & \exp [i \{ \lambda_{ij} (N_j + 1) - \lambda_{ji} N_i \} \\ & \quad \times [\psi'_i(x), \psi'_j{}^\dagger(y)] |N'_i, N'_j\rangle = 0, \end{aligned}$$

となる。すなわち、(3・105)式が反交換関係成立の条件となる。反交換関係

$$\{ \psi'_i(x), \psi'_j(y) \} = 0, \quad (i \neq j),$$

成立の条件も、(3・105)式となる。

位相因子の掛けられた演算子 $\psi''_{i\alpha}(x)$ を g_1^\dagger 項その他に用いるとき、 $\psi'_{i\alpha}(x)$ を用いたときに比べ、余分の係数がかからないかどうかは、附録3-Cで調べる。結果は、電子のスピン・フリップをともなった後方散乱を与えるポテンシャルを用いないかぎり、 $\psi''_{i\alpha}(x)$ を次のようにとると、何ら余分の係数がかないと云うことができる。

$$\psi''_{1\uparrow}(x) = \exp(i\pi\hat{N}_{1\uparrow}) \psi'_{1\uparrow}(x), \quad (3\cdot106)$$

$$\psi''_{1\downarrow}(x) = \exp [i \pi (\hat{N}_{1\uparrow} + \hat{N}_{1\downarrow} + \hat{N}_{2\uparrow})] \psi'_{1\downarrow}(x), \quad (3\cdot 107)$$

$$\psi''_{2\uparrow}(x) = \exp (i \pi \hat{N}_{1\uparrow}) \psi'_{2\uparrow}(x), \quad (3\cdot 108)$$

$$\psi''_{2\downarrow}(x) = \exp [i \pi (\hat{N}_{1\uparrow} + \hat{N}_{1\downarrow} + \hat{N}_{2\uparrow})] \psi'_{2\downarrow}(x) . \quad (3\cdot 109)$$

ただし、このとり方は、ユニークではない。以下の議論では、前節で行なったように、フェルミ演算子の代わりに、 $\psi'_{i\alpha}$ を用いる。

§ 3・4・4 ハミルトニアン H_2 と H'_0 の導出

フェルミオン演算子のかわりに $\psi'_{i\alpha}$ を用いて、前方散乱の項(3・68)と自由粒子の項(3・67)を導出する。Takada-Misawa²³⁾に従って、次の定義を用いる。

$$\psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi'_{i\alpha}(x) = \frac{1}{2} \lim_{x' \rightarrow x+\eta} (\psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi'_{i\alpha}(x') - \psi'_{i\alpha}(x) \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x')), \quad (3\cdot 110)$$

$$\begin{aligned} & \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi'_{i\alpha}(x) \\ &= \frac{1}{2} \lim_{x' \rightarrow x+\eta} \left(\frac{\partial}{\partial x'} \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi'_{i\alpha}(x') - \frac{\partial}{\partial x} \psi'_{i\alpha}(x) \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x') \right). \end{aligned} \quad (3\cdot 111)$$

ここで、 η は、 $\eta \gg \alpha_0$ 、であるが、無限小の距離を表わすものとする。

演算子 $\psi'_{i\alpha}$ を(3・93)式のように書く。このとき、

$$\begin{aligned} \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi'_{i\alpha}(x') &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} e^{\mp i k_F(x-x')} \exp [B_{i\alpha}^\dagger(x') - B_{i\alpha}^\dagger(x)] \\ &\quad \times \exp [B_{i\alpha}(x) - B_{i\alpha}(x')] \frac{\alpha_0}{\alpha_0 \pm i(x-x')}, \end{aligned}$$

となる。項

$$\exp [B_{i\alpha}^\dagger(x') - B_{i\alpha}^\dagger(x)]$$

は、 $\alpha_0 \rightarrow 0$ 、および、粒子数有限の仮定のもとに、任意の k に対し $|k\eta| \ll 1$ 、として、

$$\exp [B_{i\alpha}^\dagger(x') - B_{i\alpha}^\dagger(x)]$$

$$\simeq 1 \mp i \eta \frac{\sqrt{2} \pi}{L} \sum_{k < 0} e^{\pm i k x} [\rho_i(\pm k) + \alpha \sigma_i(\pm k)], \quad (3 \cdot 113)$$

を得る。同様にして,

$$\begin{aligned} & \exp [B_{i\alpha}(x) - B_{i\alpha}(x')] \\ & \simeq 1 \mp i \eta \frac{\sqrt{2} \pi}{L} \sum_{k > 0} e^{\pm i k x} [\rho_i(\pm k) + \alpha \sigma_i(\pm k)], \end{aligned} \quad (3 \cdot 114)$$

となる。これらより, $\eta \gg \alpha_0$, を用いて,

$$\begin{aligned} \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi'_{i\alpha}(x') &= \frac{1}{2\pi} e^{\pm i k_F \eta} \left(\mp \frac{1}{i \eta} \right) \times \left(1 \mp i \eta \frac{\sqrt{2} \pi}{L} \right. \\ & \quad \left. \times \sum_k e^{\pm i k x} [\rho_i(\pm k) + \alpha \sigma_i(\pm k)] \right), \end{aligned} \quad (3 \cdot 115)$$

を得る。同様にして,

$$\begin{aligned} \psi'_{i\alpha}(x) \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x') &= \frac{1}{2\pi} e^{\pm i k_F \eta} \left(\mp \frac{1}{i \eta} \right) \times \left(1 \pm i \eta \frac{\sqrt{2} \pi}{L} \right. \\ & \quad \left. \times \sum_k e^{\pm i k x} [\rho_i(\pm k) + \alpha \sigma_i(\pm k)] \right), \end{aligned} \quad (3 \cdot 116)$$

となる。(3·110), (3·115), (3·116) 式を用いて,

$$\begin{aligned} \sum_k \psi'_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi'_{i\alpha}(x) &= \frac{\sqrt{2}}{L} \sum_k \rho_i(\pm k) e^{\pm i k x} \\ &= \sum_\alpha \psi_{i\alpha}{}^\dagger(x) \psi_{i\alpha}(x), \end{aligned} \quad (3 \cdot 117)$$

を得る。これより, ただちに前方散乱の項は,

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, \beta} \int dx \psi_{1\alpha}{}^\dagger(x) \psi_{2\beta}{}^\dagger(x) \psi_{2\beta}(x) \psi_{1\alpha}(x) \\ &= \frac{2}{L} \sum_k \rho_1(k) \rho_2(-k), \end{aligned} \quad (3 \cdot 118)$$

となる。

H'_0 の表式を導出するには, H_0 の表式 (1·1) を, フェルミの場の演算子 $\psi_{i\alpha}(x)$ を用いて,

$$H_0 = -i v_F \sum_\alpha \left[\int (\psi_{1\alpha}{}^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{1\alpha}(x) - k_F \psi_{1\alpha}{}^\dagger(x) \psi_{1\alpha}(x)) dx \right]$$

$$-\int (\psi_{2\alpha}^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{2\alpha}(x) + k_F \psi_{2\alpha}^\dagger(x) \psi_{2\alpha}(x)) dx], \quad (3.119)$$

と書き直し、 $\psi_{i\alpha}$ の代わりに $\psi'_{i\alpha}$ を用い、さらに、定義(3.111)を用いて計算する。上と同様の計算から、表式(3.67)を得る。

以上の考察により、電子のスピン・フリップを与えるポテンシャルを考えないかぎり、また $\alpha_0 \rightarrow 0$ 極限の問題を除いて、フェルミーボーズ関係の無矛盾性が示された。これは次のことを意味する。温度領域 $T \ll \epsilon_F$ を考えるかぎり、ボゾン表示された(密度演算子で書かれた)ハミルトニアンは、元のフェルミ演算子で書かれたものと等価である。

いま、ボゾン表示の方法では、 ρ_i と σ_i が密度演算子であるかどうかということは全く忘れてよく、 ρ_i と σ_i の交換関係(3.62)~(3.64)だけをもとにして、フェルミ演算子 $\psi'_{i\alpha}(x)$ をつくることができ、また、ハミルトニアン H_2 および H'_0 を $\psi'_{i\alpha}(x)$ から導くことができることが重要である。これにより、すべての量が演算子 $\psi'_{i\alpha}(x)$ によって表わされ、考える状態空間は、元のフェルミオン系のものと同じ性質をもつが、 $\psi'_{i\alpha}(x)$ によってつくられる状態空間は、元のものとは全く異なるものとなる。

§ 3.5 相関関数の位相表示

この節では、各相関関数をボゾン表示し、位相 θ_\pm 、 ϕ_\pm で表わす。また、ボゾン表示の方法にもとづかれた位相ハミルトニアン H_ρ を用いて、位相 θ_\pm の相関関数を計算する。ボゾン表示の方法では、通常、有限温度で考察する。そこで、くりこみ群の方法のときと異なり、実の時間 t のかわりに、虚の時間 τ を用いる。そのとき、オーダー・パラメータ $\tilde{O}(x, \tau)$ の相関関数のフーリエ変換は、

$$R(k, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^\beta d\tau \exp[-ikx - i\omega_n \tau] R(x, \tau), \quad (3.120)$$

$$R(x, \tau) \equiv \langle T_\tau \tilde{O}(x, \tau) \tilde{O}^\dagger(0, 0) \rangle_H, \quad (3.121)$$

$$R = N_2, \chi_L, \chi_T, \Delta_s, \Delta_{T0} \text{ または } \Delta_{T1},$$

で与えられる。ここで、 $\langle \rangle_H$ は、 $H = H_\rho + H_\sigma$ 、として、

$$\langle A \rangle_H = \text{Tr} \{ A \exp(-H/T) \} / \text{Tr} \{ \exp(-H/T) \},$$

であり、 T_τ は虚の時間 τ に関する時間順序積である。ただし、ボルツマン定数 k_B を落した。

§ 3・5・1 オーダー・パラメータの位相表示

オーダー・パラメータを場の演算子で表わし、 $\psi'_{i\alpha}$ の表現 (3・72) を、 $\psi_{i\alpha}$ へ用いて、位相演算子 θ_\pm 、 ϕ_\pm によって表わすと、各オーダー・パラメータは次のようになる。²⁴⁾

(I) $2k_F$ -CDW,

$$\begin{aligned}\tilde{O}_2(x, \tau) &= \psi_{2\uparrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\uparrow}(x, \tau) + \psi_{2\downarrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\downarrow}(x, \tau) \\ &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} [\exp(i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\{2k_F x + \theta_+(x, \tau)\}) \\ &\quad + \exp(-i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\{2k_F x + \theta_+(x, \tau)\})]。 \quad (3\cdot122)\end{aligned}$$

(II) LSDW,

$$\begin{aligned}\tilde{O}_{\text{LSDW}}(x, \tau) &= \psi_{2\uparrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\uparrow}(x, \tau) - \psi_{2\downarrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\downarrow}(x, \tau) \\ &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} [\exp(i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\{2k_F x + \theta_+(x, \tau)\}) \\ &\quad - \exp(-i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\{2k_F x + \theta_+(x, \tau)\})]。 \quad (3\cdot123)\end{aligned}$$

(III) TSDW,

$$\begin{aligned}\tilde{O}_{\text{TSDW}}(x, \tau) &= \psi_{2\uparrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\downarrow}(x, \tau) + \psi_{2\downarrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\uparrow}(x, \tau) \\ &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} [\exp(i\phi_-(x, \tau)) \exp(i\{2k_F x + \theta_+(x, \tau)\}) \\ &\quad + \exp(-i\phi_-(x, \tau)) \exp(i\{2k_F x + \theta_+(x, \tau)\})]。 \quad (3\cdot124)\end{aligned}$$

(IV) SS,

$$O_{\text{SS}}(x, \tau) = \psi_{2\uparrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{1\downarrow}(x, \tau) + \psi_{1\uparrow}^\dagger(x, \tau) \psi_{2\downarrow}(x, \tau)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} [\exp(i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\theta_-(x, \tau)) \\
 &\quad + \exp(-i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\theta_-(x, \tau))]。 \quad (3\cdot125)
 \end{aligned}$$

(V) TS0,

$$\begin{aligned}
 O_{\text{TS0}}(x, \tau) &= \psi_{2\uparrow}(x, \tau) \psi_{1\downarrow}(x, \tau) - \psi_{1\uparrow}(x, \tau) \psi_{2\downarrow}(x, \tau) \\
 &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} [\exp(-i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\theta_-(x, \tau)) \\
 &\quad - \exp(i\phi_+(x, \tau)) \exp(i\theta_-(x, \tau))]。 \quad (3\cdot126)
 \end{aligned}$$

(VI) TS1,

$$\begin{aligned}
 O_{\text{TS1}}(x, \tau) &= \sum_{\alpha} \psi_{2\alpha}(x, \tau) \psi_{1\alpha}(x, \tau) \quad (\alpha = \uparrow \text{ または } \downarrow) \\
 &= \frac{1}{2\pi\alpha_0} [\exp(i\phi_-(x, \tau)) \exp(i\theta_-(x, \tau)) \\
 &\quad + \exp(-i\phi_-(x, \tau)) \exp(i\theta_-(x, \tau))]。 \quad (3\cdot127)
 \end{aligned}$$

§ 3・5・2 相関関数

(3・122) ~ (3・127) 式から、各相関関数を次のように書くことができる。

(I) $2k_F$ -CDW,

$$\begin{aligned}
 N_2(x, \tau) &= \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{E_{+,-}(x, \tau) + E_{+,+}(x, \tau)\} \\
 &\quad \times D_{+,-}(x, \tau) e^{i2k_F x}。 \quad (3\cdot128)
 \end{aligned}$$

(II) LSDW,

$$\begin{aligned}
 \chi_L(x, \tau) &= \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{E_{+,-}(x, \tau) - E_{+,+}(x, \tau)\} \\
 &\quad \times D_{+,-}(x, \tau) e^{i2k_F x}。 \quad (3\cdot129)
 \end{aligned}$$

(III) TSDW,

$$\begin{aligned} \chi_T(x, \tau) &= \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{E_{-,-}(x, \tau) + E_{-,+}(x, \tau)\} \\ &\quad \times D_{+,-}(x, \tau) e^{i2k_F x}. \end{aligned} \quad (3\cdot130)$$

(IV) SS,

$$\begin{aligned} A_s(x, \tau) &= \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{E_{+,-}(x, \tau) + E_{+,+}(x, \tau)\} \\ &\quad \times D_{-,-}(x, \tau). \end{aligned} \quad (3\cdot131)$$

(V) TSO,

$$\begin{aligned} A_{T0}(x, \tau) &= \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{E_{+,-}(x, \tau) - E_{+,+}(x, \tau)\} \\ &\quad \times D_{-,-}(x, \tau). \end{aligned} \quad (3\cdot132)$$

(VI) TS1,

$$\begin{aligned} A_{T1}(x, \tau) &= \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{E_{-,-}(x, \tau) + E_{-,+}(x, \tau)\} \\ &\quad \times D_{-,-}(x, \tau). \end{aligned} \quad (3\cdot133)$$

ここで、相関関数

$$D_{\pm,-}(x, \tau), E_{+,\pm}(x, \tau), E_{-,\pm}(x, \tau)$$

は、

$$D_{\pm,-}(x, \tau) \equiv \langle T_\tau \exp [i\theta_\pm(x, \tau) - i\theta_\pm(0, 0)] \rangle_H, \quad (3\cdot134)$$

$$E_{+,\pm}(x, \tau) \equiv \langle T_\tau \exp [i\phi_\pm(x, \tau) \pm i\phi_\pm(0, 0)] \rangle_H, \quad (3\cdot135)$$

$$E_{-,\pm}(x, \tau) \equiv \langle T_\tau \exp [i\phi_\mp(x, \tau) \pm i\phi_\mp(0, 0)] \rangle_H, \quad (3\cdot136)$$

で定義される。また、時間順序積 T_τ があるため、

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau \exp [i \theta(x, \tau)] \exp [\pm i \theta(0, 0)] \rangle_H \\ & = \langle T_\tau \exp [i \theta(x, \tau) \pm i \theta(0, 0)] \rangle_H, \end{aligned} \quad (3 \cdot 137)$$

$$\theta = \theta_\pm \text{ または } \phi_\pm,$$

が成り立つ。

§ 3・5・3 相関関数 $D_{\pm,-}(x, \tau)$ の計算

相関関数 $D_{\pm,-}(x, \tau)$ を計算する。まず、ハミルトニアン H_ρ :

$$\begin{aligned} H_\rho = \int & \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_+(x, \tau)}{\partial x} \right)^2 \right. \\ & \left. + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_-(x, \tau)}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \end{aligned} \quad (3 \cdot 82 a)$$

から θ_\pm の運動方程式をつくることにより、 θ_\pm に関するグリーン関数

$$G_\pm^\rho(x, \tau) \equiv \langle T_\tau \theta_\pm(x, \tau) \theta_\pm(0, 0) \rangle_{H_\rho},$$

を次の形に得ることができる。

$$G_\pm^\rho(x, \tau) = T \sum_n \frac{1}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 \pm \tilde{\alpha})}{\omega_n^2 + v_F^2 (1 - \tilde{\alpha}^2) k^2} e^{ikx + i\omega_n \tau}, \quad (3 \cdot 138)$$

$$\omega_n = 2\pi n T.$$

つぎに、 H_ρ がハーモニックである性質 (附録 3-D 参照) を用いて、 $D_{\pm,-}(x, \tau)$ を

$$\begin{aligned} D_{\pm,-}(x, \tau) & = \exp \left[-\frac{1}{2} \langle T_\tau [\theta_\pm(x, \tau) - \theta_\pm(0, 0)]^2 \rangle_{H_\rho} \right] \\ & = \exp [G_\pm^\rho(x, \tau) - G_\pm^\rho(0, 0)], \end{aligned} \quad (3 \cdot 139)$$

と書き直す。(3・138) 式を (3・139) 式へ代入して、

$$D_{\pm,-}(x, \tau)$$

$$= \exp \left[T \sum_n \frac{1}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 \pm \tilde{\alpha})}{\omega_n^2 + v_F^2 (1 - \tilde{\alpha}^2) k^2} (e^{ikx + i\omega_n \tau} - 1) \right], \quad (3 \cdot 140)$$

となる。

(3・140) 式の $n=0$ の項は次のように計算できる。

$$\begin{aligned} & \frac{T}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 \pm \tilde{\alpha})}{v_F^2 (1 - \tilde{\alpha}^2) k^2} (e^{ikx} - 1) \\ &= \frac{T}{v_F (1 \mp \tilde{\alpha})} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx} - 1}{k^2} = \frac{\pi T |x|}{v_F (1 \mp \tilde{\alpha})}. \end{aligned}$$

また, $n \neq 0$ の項は, $n > 0$ の項について,

$$\begin{aligned} & T \sum_{n>0} \frac{1}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 \pm \tilde{\alpha})}{\omega_n^2 + v_F^2 (1 - \tilde{\alpha}^2) k^2} (e^{ikx + i\omega_n \tau} - 1) \\ &= T \sum_{n>0} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{v_F (1 \pm \tilde{\alpha})}{\omega_n^2 + v_F^2 (1 - \tilde{\alpha}^2) k^2} (e^{ikx + i\omega_n \tau} - 1) \\ &= \frac{\eta_{\pm}}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} [\exp(-\omega_n x / a_{\rho} + i\omega_n \tau) - 1], \end{aligned}$$

と計算できる。ここで,

$$a_{\rho} \equiv v_F (1 - \tilde{\alpha}^2)^{1/2}, \quad \eta_{\pm} \equiv [(1 \pm \tilde{\alpha}) / (1 \mp \tilde{\alpha})]^{1/2},$$

である。さらに, $n < 0$ の項も同様にして求め, $\omega_n = 2\pi n T$ を代入して,

$$\begin{aligned} D_{\pm, -}(x, \tau) &= \exp \left[-\frac{\pi T |x|}{v_F (1 \mp \tilde{\alpha})} + \frac{\eta_{\pm}}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \right. \\ &\quad \times \{ \exp(-2\pi T (|x| / a_{\rho} + i\tau) n) \\ &\quad \left. + \exp(-2\pi T (|x| / a_{\rho} - i\tau) n) - 2 \} \right], \quad (3 \cdot 141) \end{aligned}$$

を得る。

(3・141) 式で \sum_n の項の発散を除くため, ゆるやかな切断 $\exp[-nT/\omega_D]$ を導入し, 公式

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n} = -\ln(1-x),$$

を用いて, 次式を得る。

$$\begin{aligned}
 & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[\exp \left\{ -2nT \left(|x|/a_{\rho} + i\tau \right) n - nT/\omega_D \right\} \right. \\
 & \quad \left. + \exp \left\{ -2nT \left(|x|/a_{\rho} - i\tau \right) n - nT/\omega_D \right\} \right. \\
 & \quad \left. - 2 \exp \left(-nT/\omega_D \right) \right] \\
 & = -\ln \left[1 - \exp \left\{ -2\pi T \left(|x|/a_{\rho} + i\tau \right) - T/\omega_D \right\} \right] \\
 & \quad - \ln \left[1 - \exp \left\{ -2\pi T \left(|x|/a_{\rho} - i\tau \right) - T/\omega_D \right\} \right] \\
 & \quad - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \exp \left[-nT/\omega_D \right] \\
 & = 2 \ln \left[1 - \exp \left(-T/\omega_D \right) \right] .
 \end{aligned}$$

これらを, (3・141) 式へ代入して整理すると,

$$\begin{aligned}
 D_{\pm,-}(x, \tau) = & \left[2 \sinh \frac{T}{2\omega_D} \right]^{\eta_{\pm}} \times \left[2 \cosh \left(\frac{2\pi T |x|}{a_{\rho}} + \frac{T}{\omega_D} \right) \right. \\
 & \left. - 2 \cos 2\pi T \tau \right]^{-\eta_{\pm}/2}, \tag{3・142}
 \end{aligned}$$

となる。さらに, $T/2\omega_D \ll 1$, として展開して,

$$\begin{aligned}
 D_{\pm,-}(x, \tau) = & \left(\frac{T}{\omega_D} \right)^{\eta_{\pm}} \left[2 \cosh \left(\frac{2\pi T |x|}{a_{\rho}} + \frac{T}{\omega_D} \right) \right. \\
 & \left. - 2 \cos 2\pi T \tau \right]^{-\eta_{\pm}/2}, \tag{3・143}
 \end{aligned}$$

を得る。^{18, 20, 25, 26)}

§ 3・6 ハミルトニアン H_0 に対するくりこみ群

ハミルトニアン H_0 は, 非調和項 $\cos 2\phi_+$ を含むので, 相関関数 $E_{\pm,\pm}(x, \tau)$ を求めるのは前節で計算した $D_{\pm,-}(x, \tau)$ ほど, 容易ではない。そこで, この節では, ハミルトニアン H_0 と古典 2 次元サイン・ゴルドン系のものとの等価性を利用して, 系の性質を調べる。²⁷⁻³¹⁾

§ 3・6・1 分配関数

まず、ハミルトニアン H_σ :

$$H_\sigma = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1^{\parallel}) \left(\frac{\partial \phi_+(x, \tau)}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{g}_1^{\parallel}) \right. \\ \left. \times \left(\frac{\partial \phi_-(x, \tau)}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F \tilde{g}_1^{\perp}}{\pi \alpha_0^2} \cos(2\phi_+(x, \tau)) \right] dx, \quad (3\cdot 83a)$$

を、運動方程式

$$\frac{\partial \phi_+(x, \tau)}{\partial x} = -i v_F (1 + \tilde{g}_1^{\parallel}) \frac{\partial \phi_-(x, \tau)}{\partial x},$$

を用いて、次のように書き直す。

$$H_\sigma^R = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1^{\parallel}) \left(\frac{\partial \phi_+}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{4\pi v_F (1 + \tilde{g}_1^{\parallel})} \left(\frac{\partial \phi_+}{\partial \tau} \right)^2 \right. \\ \left. + \frac{v_F \tilde{g}_1^{\perp}}{\pi \alpha_0^2} \cos(2\phi_+) \right] dx. \quad (3\cdot 144)$$

このとき、 $\phi_+(x, \tau)$ は2次元平面上の古典量とみなされる。

いま、 ϕ'_+ を

$$\phi'_+ \equiv \begin{cases} \phi_+ - \pi/2, & g_1^{\perp} > 0, \\ \phi_+, & g_1^{\perp} < 0, \end{cases} \quad (3\cdot 145)$$

で定義し、変数変換

$$\left. \begin{aligned} x_\tau &= -i v_F (1 - \tilde{g}_1^{\parallel 2})^{1/2} \tau, & \phi_A &= (1 / \sqrt{2\pi \zeta_+}) \phi'_+, \\ \mu_\sigma &= \frac{|\tilde{g}_1^{\perp}|}{\pi \alpha_0^2 (1 - \tilde{g}_1^{\parallel 2})^{1/2}}, & \beta_\zeta &= 2\zeta_+ / \pi, \end{aligned} \right\} \quad (3\cdot 146)$$

$$\zeta_+ \equiv [(1 + \tilde{g}_1^{\parallel}) / (1 - \tilde{g}_1^{\parallel})]^{1/2},$$

を行って、分配関数の表式を求める。作用関数を $-i \int H_\sigma^R d\tau$ として、汎関数積分の形で、分配関数は、

$$Z_A \simeq \int \cdots \int_{0 < k < A} \mathcal{D} \tilde{\phi}(\mathbf{k}) e^{-S[\theta_A]}, \quad (3.147)$$

$$S[\phi_A] = \int d^2 \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi_A(\mathbf{r}))^2 - \mu_\sigma \cos(2\pi \sqrt{\beta_\eta} \phi_A(\mathbf{r})) \right], \quad (3.148)$$

$$\phi_A(\mathbf{r}) = \int_{0 < k < A} \frac{d^2 \mathbf{r}}{(2\pi)^2} \tilde{\phi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}},$$

となる。ここで、

$$\mathbf{r} = (x, x_\tau)$$

である。

(3.147) 式, (3.148) 式は, 有限温度での 2 次元古典サイン・ゴールドン系の分配関数と同じものである。いまの場合, 温度は固定されており, $1/T$ が系の長さ L に対応する。運動量の切断 A を変化されるとき, 分配関数が不変であるとして, くりこみ群の方程式を求める。サイン・ゴールドン系では, (3.148) 式で

$$\beta_\eta \rightarrow 1/T, \quad \mu_\sigma \rightarrow \mu \quad (T: \text{温度}, \quad \mu: \text{化学ポテンシャル})$$

として, 切断 A を小さくするとき, T と μ の両方が変化する。いまの場合, β_η と μ は電子間の結合定数で表わされており, A が減少するとき, 結合定数が有効結合定数へ変化する。この基本的機構は, 前章で説明した Gell・Mann - Low 型のくりこみ群と同じである。

§ 3.6.2 くりこみ群の方程式

(3.148) 式で, μ_σ が小さいとして摂動展開し, 運動量の大きい部分からの寄与をくりこむことにより, 最低次の範囲で, 次のくりこみ群の方程式が得られる。

$$d x_\zeta^2 = -2 x_\zeta y_\sigma^2 \frac{d a}{a}, \quad (3.149)$$

$$d y_\sigma^2 = -2 x_\zeta y_\sigma^2 \frac{d a}{a}, \quad (3.150)$$

ここで, x_ζ と y_σ は,

$$x_\zeta \equiv \pi \beta_\zeta \quad \text{と} \quad y_\sigma \equiv \mu_\sigma a^2$$

で定義され, a は, A^{-1} に適当なスケール変換を施したものである。(3.149) 式と (3.150) 式

導出の詳細については、Kogut の文献²⁹⁾を見ていただきたい。

(3・149) 式と (3・150) 式で、 y_0 が a^2 に依存していることに注意して、さらに a を

$$a = \sqrt{2\pi} \alpha_0,$$

とおいて、 $|\tilde{g}_1^{\parallel}| \ll 1$ 、として展開すると、

$$\frac{\partial \tilde{g}_1^{\parallel}}{\partial \xi} = 2 \tilde{g}_1^{\perp 2}, \quad (3\cdot 151)$$

$$\frac{\partial |\tilde{g}_1^{\perp}|}{\partial \xi} = 2 \tilde{g}_1^{\parallel} |\tilde{g}_1^{\perp}|, \quad (3\cdot 152)$$

$$\xi \equiv \ln \alpha_0^{-1},$$

が得られる。(3・151) 式、(3・152) 式は、最低次までのリー方程式 (3・28)、(3・29) と同じである。すなわち、これから、 $\tilde{g}_1^{\parallel} < |\tilde{g}_1^{\perp}|$ は強結合領域であり、 $\tilde{g}_1^{\parallel} > |\tilde{g}_1^{\perp}|$ が弱結合領域であることがわかる。また、これらの方程式は、 μ_0 が小さい、すなわち、 $|\tilde{g}_1^{\perp}| \ll 1$ 、および $|\tilde{g}_1^{\parallel}| \ll 1$ 、の条件のもとに導出したものである。この条件は、最低次までのリー方程式 (3・28)、(3・29) が、 $|\tilde{g}_1^{\parallel}| \ll 1$ 、 $|\tilde{g}_1^{\perp}| \ll 1$ 、のとき有効であるということと一致する。

2次元古典サイン・ゴルドンモデルは、2次元古典クーロンガスモデル、2次元古典XYスピモデルなどと等価である。2次元古典XYモデルでは、コスターリッツ-サウレス転移^{32,33)}が起きる。すなわち、高温領域 $T > T_K$ では、スピンによる渦が成長し、系は無秩序状態となり、低温領域 $T < T_K$ では、渦は消滅し、スピン波近似が適用できる状態になる。我々のモデルでは、強結合領域が高温領域に、弱結合領域が低温領域に対応する。このことを最初に指摘したのは、Chui-Lee³⁴⁾である。彼らは、ハミルトニアン H_0 (位相表示していない (3・76) 式) と2次元古典クーロンガスモデルの等価性を利用して、くりこみ群の方程式 (3・151)、(3・152) を導いた。また、Emery, et al.³⁵⁾ は、多少異なったくりこみ群の方法を用いて、ボゾン表示されたハミルトニアンから、第2発散項までのくりこみ群の方程式 (3・28)、(3・29) を導いた。

§ 3・7 セルフコンシステント・ハーモニック近似

この節では、位相 ϕ_{\pm} に対する相関関数を計算するのに用いるセルフコンシステント・ハーモニック近似 (SCHA) を説明し、その意味を考察する。SCHA は、BGD モデルの位相ハミ

ルトニアン H_σ の非調和項 (コサイン項) を次のように近似するものである。²⁰⁾

$$\begin{aligned} \widetilde{g}_1^\perp \cos 2\phi_+(x) &\simeq -|\widetilde{g}_1^\perp| \exp[-2\langle \phi_+'^2 \rangle_{H_\sigma}] \\ &\quad \times (1 + 2\langle \phi_+'^2 \rangle_{H_\sigma} - 2\phi_+'^2(x)). \end{aligned} \quad (3\cdot 153)$$

ここで, ϕ_+ は (3\cdot 146) 式で定義される。このとき H_σ は次のように書き直される。

$$\begin{aligned} H'_\sigma = \int & \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \widetilde{g}_1^\parallel) \left\{ \left(\frac{\partial \phi_+'}{\partial x} \right)^2 + q_c^2 \phi_+'^2(x) \right\} \right. \\ & \left. + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \widetilde{g}_1^\parallel) \left(\frac{\partial \phi_-'}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \end{aligned} \quad (3\cdot 154)$$

$$q_c^2 = \frac{8|\widetilde{g}_1^\perp|}{\alpha_0^2(1 - \widetilde{g}_1^\parallel)} \exp[-2\langle \phi_+'^2 \rangle_{H'_\sigma}], \quad (3\cdot 155)$$

$$\phi_-' \equiv \phi_-.$$

ハミルトニアン H'_σ が, エネルギー・ギャップをもつ結合定数の領域を考察する。ハミルトニアン H'_σ を用いて, ϕ_\pm' の運動方程式をつくり, グリーン関数

$$G_\pm^\sigma(x, \tau) = \langle T_\tau \phi_\pm'(x, \tau) \phi_\pm'(0, 0) \rangle_{H'_\sigma},$$

を

$$G_+^\sigma(x, \tau) = T \sum_n \frac{1}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 + \widetilde{g}_1^\parallel)}{\omega_n^2 + v_F^2 (1 - \widetilde{g}_1^{\parallel 2}) (k^2 + q_c^2)} e^{ikx + i\omega_n \tau}, \quad (3\cdot 156)$$

$$G_-^\sigma(x, \tau) = T \sum_n \frac{1}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 - \widetilde{g}_1^\parallel) (k^2 + q_c^2)}{k^2 \omega_n^2 + v_F^2 (1 - \widetilde{g}_1^{\parallel 2}) (k^4 + q_c^2 k^2)} e^{ikx + i\omega_n \tau}, \quad (3\cdot 157)$$

と得る。ここで, (3\cdot 156) 式の分母からわかるように, q_c はエネルギー・ギャップである。

グリーン関数の表式 (3\cdot 156) を用いて,

$$\langle \phi_+'^2(0, 0) \rangle_{H'_\sigma} = T \sum_n \frac{1}{L} \sum_k \frac{2\pi v_F (1 + \widetilde{g}_1^\parallel)}{\omega_n^2 + a_\sigma^2 (k^2 + q_c^2)}, \quad (3\cdot 158)$$

$$a_\sigma \equiv v_F (1 - \widetilde{g}_1^{\parallel 2})^{1/2},$$

を計算する。ギャップの大きさにくらべ十分低温 ($T \ll q_c$) を考えると, 和 \sum_n を積分でおきかえることができる。したがって,

$$\begin{aligned} \langle \phi_+^{\prime 2} \rangle_{H'_\sigma} &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega \int dk \frac{v_F(1 + \tilde{g}_1^{\parallel})}{\omega^2 + \alpha_\sigma^2(k^2 + q_c^2)} \\ &= \zeta_+ \ln \frac{\alpha_0^{-1} + (\alpha_0^{-2} + q_c^2)^{1/2}}{q_c}, \end{aligned} \quad (3.159)$$

となる。ここで、

$$\zeta_+ \equiv [(1 + \tilde{g}_1^{\parallel}) / (1 - \tilde{g}_1^{\parallel})]^{1/2},$$

であり、 k -積分の上限と下限を、それぞれ、 α_0^{-1} と $-\alpha_0^{-1}$ で切断した。(3.159)式から

$$\exp[-2 \langle \phi_+^{\prime 2} \rangle_{H'_\sigma}] = \left(\frac{\alpha_0^{-1} + (\alpha_0^{-2} + q_c^2)^{1/2}}{q_c} \right)^{-2\zeta_+},$$

を得、この式を(3.155)式へ代入して、

$$\alpha_0^2 q_0^2 = \frac{8 |\tilde{g}_1^{\perp}|}{1 - \tilde{g}_1^{\parallel}} \left(\frac{\alpha_0^{-1} + (\alpha_0^{-2} + q_c^2)^{1/2}}{q_c} \right)^{-2\zeta_+}, \quad (3.160)$$

を得る。

(3.160)式で、 $q_c \neq 0$ の解をもつ領域を求める。 $q_c = 0$ の解は常に存在するが、これを(3.159)式へ代入すると、 $\langle \phi_+^{\prime 2} \rangle$ が発散する。したがって、これはSCHAの精神と矛盾する解である。

下記において、

$$|\tilde{g}_1^{\perp}| \ll 1, \quad R^2 \equiv 8 |\tilde{g}_1^{\perp}| / (1 - \tilde{g}_1^{\parallel}) \ll 1,$$

を仮定する。(3.155)式から、 $\alpha_0 q_c \ll 1$ 、である。(3.160)式を $\alpha_0 q_c \ll 1$ 、として展開して、

$$\frac{\alpha_0 q_c}{2} = \left(\frac{|R|}{2} \right)^{1/(1-\zeta_+)}, \quad (3.161)$$

を得る。この式で、 $\alpha_0 q_c \ll 1$ 、 $|R| \ll 1$ 、の条件を満たす解は、 $\zeta_+ < 1$ 、すなわち、 $-1 < \tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 、のときのみ存在する。この解は $q_c \neq 0$ 、であり、 $\langle \phi_+^{\prime 2} \rangle$ は有限である。したがって、このとき、SCHAは妥当な近似であると考えられる。

一方、 $\tilde{g}_1^{\parallel} > 0$ のとき、 $q_c = 0$ の解のみが存在し、SCHAを用いることに疑問がある。ただし、 $\tilde{g}_1^{\parallel} > 0$ のとき、解 $q_c = 0$ が正しい結果であると仮定して、前節に述べたくりこみ群の結果とくらべると、次のようになる。いま、 $q_c = 0$ のみの解を与える領域を弱結合領域、 $q_c \neq 0$ の解を与える領域を強結合領域とみなすと、強結合領域と弱結合領域の境界は、SCHA

では $\tilde{g}_1^{\parallel} = 0$ であり、くりこみ群の方法では、 $\tilde{g}_1^{\parallel} = |\tilde{g}_1^{\perp}|$ である。この違いは、SCHA が \tilde{g}_1^{\perp} を係数とするコサイン項のみの近似であり、 \tilde{g}_1^{\parallel} の項を変化させないのに対し、くりこみ群の方法では、 \tilde{g}_1^{\parallel} と \tilde{g}_1^{\perp} の両方の項の変化を考慮したために現われたものである。しかし、 $|\tilde{g}_1^{\perp}| \rightarrow 0$ の極限で境界が両方法で $\tilde{g}_1^{\parallel} = 0$ と一致しており、 $|\tilde{g}_1^{\perp}| \ll 1$ であるかぎり、SCHA で与えられる境界は信頼できる。

以上の考察では、 $T \ll q_c$ を仮定した。したがって、ギャップが零になるかどうかの境界は $T = 0$ で正しいものである。有限温度を考えると、温度が上昇するにつれ、ある温度で q_c の値が突然零になる。^{20,36)} また、 $|\tilde{g}_1^{\perp}|$ がある程度大きいとき、 \tilde{g}_1^{\parallel} の値が増加するにつれ、 \tilde{g}_1^{\parallel} のある値で、 q_c の値が突然零になる。これらは不自然である。したがって、有限温度、あるいは、 $|\tilde{g}_1^{\perp}|$ がある程度大きいとき、SCHA で決められた、 $q_c \neq 0$ から $q_c = 0$ となる温度あるいは結合定数の値は、あまり信頼できない。

§ 3・8 $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 領域における相関関数のふるまい

BGD モデルの $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 領域の基底状態を調べるために、まず、相関関数 $E_{+, \mp}(x, \tau)$ を、SCHA で計算する。 H_0 がハーモニックであるため、 $D_{\pm, -}(x, \tau)$ の計算と同様に、グリーン関数 $G_{\pm}^0(x, \tau)$ を用いて、

$$E_{+, \mp}(x, \tau) = \exp [\pm G_{\pm}(x, \tau) - G_{\pm}^0(0, 0)], \quad (3 \cdot 162)$$

と変形する。さらにグリーン関数の表式 (3・156) を用い、 $T \ll q_c$ を考えて和 \sum_n を積分でおきかえて、

$$\begin{aligned} E_{+, \mp}(x, \tau) &= \exp \left[\frac{1}{2\pi} \int d\omega \int dk \frac{v_F(1 + \tilde{g}_1^{\parallel})}{\omega^2 + a_\sigma^2(k^2 + q_c^2)} (\pm e^{ikx + i\omega\tau} - 1) \right] \\ &= \exp \left[\frac{v_F(1 + \tilde{g}_1^{\parallel})}{2a_\sigma} \int dk \frac{\pm \exp \{ i k x - a_\sigma |\tau| (k^2 + q_c^2)^{1/2} \} - 1}{(k^2 + q_c^2)^{1/2}} \right] \end{aligned} \quad (3 \cdot 163)$$

を得る。ここで、

$$\int dk \frac{\exp [i k x - a_\sigma |\tau| (k^2 + q_c^2)^{1/2}]}{(k^2 + q_c^2)^{1/2}}$$

$$= 2K_0[q_c(x^2 + a_\sigma^2 \tau^2)^{1/2}],$$

であることを用いると,

$$E_{+,-}(x, \tau) \pm E_{+,+}(x, \tau) = \left[\frac{\alpha_0^{-1} + (\alpha_0^{-2} + q_c^2)^{1/2}}{q_c} \right]^{-\zeta_+} \\ \times [\exp\{\zeta_+ K_0(q_c r)\} \pm \exp\{-\zeta_+ K_0(q_c r)\}], \quad (3 \cdot 164)$$

$$r \equiv [x^2 + a_\sigma^2 \tau^2]^{1/2},$$

という結果を得る。ただし、 $K_0(z)$ は 0 次の変形されたベッセル関数である。

つぎに、相関関数 $E_{-, \mp}(x, \tau)$ を計算する。 $E_{+, \mp}(x, \tau)$ のときと同様に,

$$E_{-, \mp}(x, \tau) = \exp \left[\frac{v_F(1 - \tilde{g}_1^{\parallel})}{2a_\sigma} \int dk \frac{1 + q_c^2/k^2}{(k^2 + q_c^2)^{1/2}} \right. \\ \left. \times \{\pm \exp(i k x - a_\sigma |\tau| (k^2 + q_c^2)^{1/2}) - 1\} \right], \quad (3 \cdot 165)$$

を得る。(3・165) 式の指数関数の肩の積分は、 $\tau = 0$ の点を除き、 $-\infty$ に発散する。

表式(3・143), (3・164), (3・165) を用いて、各オーダー・パラメータの相関関数(3・128) ~ (3・133) のフーリエ変換(3・120) の $R(0, 0)$ または $R(2k_F, 0)$ の絶対零度近傍におけるふるまいを調べる。附録 3-E に示すように、 $\tilde{g}_1^\perp < 0$ のとき、次の結果を得る。^{20, 24)}

$$N_2 \sim T^{b_1}, \quad b_1 = \eta_+ - 2, \quad (\eta_+ < 2), \quad (3 \cdot 166)$$

$$A_s \sim T^{b_4}, \quad b_4 = \eta_- - 2, \quad (\eta_- < 2), \quad (3 \cdot 167)$$

$$\chi_L = \chi_T = A_{T0} = A_{T1} = 0. \quad (3 \cdot 168)$$

ここで、 $\eta_+ = 2$, $\eta_- = 2$ のとき、それぞれ、 N , A_s は対数発散となり、 η_+ , η_- が 2 を超えると、 N , A_s における発散はなくなり、有限値となる。³⁶⁾

$\tilde{g}_1^\perp > 0$ のときは、(3・145) 式より、 ϕ_+ が $\phi_+ + \pi/2$ によっておきかえられるため、 $\tilde{g}_1^\perp < 0$ のときとくらべ N と χ_L が、また、 A_{T0} と A_s が入れかわる。^{24, 38)} 他の相関関数は同じである。以上から得られる基底状態の相関は、次節でまとめて描く。

§ 3・9 弱結合領域における相関関数のふるまいと基底状態の相図

この節では、くりこみ群の方法によって得られた、BGDモデルの弱結合領域 $\tilde{g}_1^{\parallel} > |\tilde{g}_1^{\perp}|$ での結合定数の固定点の値を用いて、相関関数を計算する。さらに § 3・2 と § 3・8 で求めた相関関数のふるまいを用いて、BGDモデルの基底状態の相図を描く。

§ 3・9・1 相関関数の計算

ボゾン表示を用いるとき、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} の項に対して同じ取り扱いをし、

$$g_2 = g_2^{\parallel} = g_2^{\perp},$$

とおくので、弱結合領域での不変結合定数の固定点の値としては、3つの独立な結合定数を用いるモデルにおける値、 $\tilde{g}_1^{\parallel*}$ に対し $(\tilde{g}_1^{\parallel 2} - \tilde{g}_1^{\perp 2})^{1/2}$ 、 \tilde{g}_1^{\perp} に対し 0、を用いる。したがって、 H_{σ} の有効ハミルトニアンを

$$H_{\sigma}^* = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1^{\parallel*}) \left(\frac{\partial \phi_+}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{g}_1^{\parallel*}) \left(\frac{\partial \phi_-}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \quad (3.169)$$

と書く。ここで、

$$\tilde{g}_1^{\parallel*} \equiv (\tilde{g}_1^{\parallel 2} - \tilde{g}_1^{\perp 2})^{1/2},$$

である。この有効ハミルトニアンを用いて、各相関関数の絶対零度近傍でのふるまいを調べる。

まず、相関関数

$$E_{\pm,-}^*(x, \tau) \equiv \langle T_{\tau} \exp[i\phi_{\pm}(x, \tau)] \times \exp[i\phi_{\pm}(0, 0)] \rangle_{H_{\sigma}^*},$$

を考える。ハミルトニアン H_{σ}^* は、位相 $\phi_{\pm}(x)$ を

$$\phi'_{\pm}(x) = \phi_{\pm} + a, \quad (a \text{ は任意定数}),$$

へ変換しても不変である。一方、相関関数 $E_{\pm,-}^*(x, \tau)$ は e^{i2a} だけ掛けられる。すなわち、

$$E_{\pm,+}^*(x, \tau) \rightarrow E_{\pm,+}^{\prime*}(x, \tau) = E_{\pm,+}^*(x, \tau) e^{i2a}, \quad (3.170)$$

である。ところが、 $E_{\pm,+}^*(x, \tau)$ と $E_{\pm,+}^{\prime*}(x, \tau)$ は、位相を、全く同じ運動方程式を満たす

杉山忠男

$\phi_{\pm}(x)$ から $\phi'_{\pm}(x)$ へ書きかえただけで、式としては同形である。したがって、

$$E_{\pm,+}^{*}(x, \tau) = E_{\pm,+}^{*'}(x, \tau), \quad (3 \cdot 171)$$

である。(3・170) 式と (3・171) 式から、

$$E_{\pm,+}^{*}(x, \tau) = 0, \quad (3 \cdot 172)$$

が結論される。

つぎに、相関関数

$$E_{\pm,-}^{*}(x, \tau) \equiv \langle T_{\tau} \exp [i \phi_{\pm}(x, \tau)] \times \exp [-i \phi_{\pm}(0, 0)] \rangle_{H_{\sigma}^{*}},$$

を計算する。 $D_{\pm,-}(x, \tau)$ の計算と同様にして、

$$E_{\pm,-}^{*}(x, \tau) = \left(\frac{T}{\omega_D}\right)^{\zeta_{\pm}^{*}} [2 \cosh \left(\frac{2\pi T |x|}{a_{\sigma}^{*}} + \frac{T}{\omega_D}\right) - 2 \cos 2\pi T \tau]^{-\zeta_{\pm}^{*}/2}, \quad (3 \cdot 173)$$

$$a_{\sigma}^{*} \equiv v_F (1 - \tilde{g}_1^{**2})^{1/2},$$

$$\zeta_{\pm}^{*} \equiv [(1 \pm \tilde{g}_1^{**}) / (1 \mp \tilde{g}_1^{**})]^{1/2},$$

を得る。

$D_{+,-}(x, \tau)$ と $E_{+,-}^{*}(x, \tau)$ の積から、 $2k_F$ -CDW の相関関数のフーリエ変換 $N_2(2k_F, 0)$ を次のように得る。

$$\begin{aligned} N_2(2k_F, 0) &\sim T^{\eta_+ + \zeta_+^{*} - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv \\ &\times [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_+/2} \\ &\times [2 \cosh \left(\frac{a_{\rho}}{a_{\sigma}^{*}} u + \left(1 - \frac{a_{\rho}}{a_{\sigma}^{*}}\right) \frac{T}{\omega_D}\right) - 2 \cos 2\pi v]^{-\zeta_+^{*}/2}. \end{aligned} \quad (3 \cdot 174)$$

(3・174) 式の u, v に関する積分に対して、附録 3-E に述べるのと同様の考察を行ない、

$N_2(2k_F, 0)$ の絶対零度近傍のふるまいを,

$$N_2(2k_F, 0) \sim T^{b_7}, \quad b_7 = \eta_+ + \zeta_+^* - 2 \quad (\eta_+ + \zeta_+^* < 2), \quad (3 \cdot 175)$$

と得る。ここで, $\eta_+ + \zeta_+^* = 2$ のとき, N_2 は対数発散となり, $\eta_+ + \zeta_+^*$ が 2 を超えると発散はなくなり, $N_2(2k_F, 0)$ は有限値となる。相関関数 χ_L は

$$E_{+,+}^*(x, \tau) = 0,$$

のため, N_2 に等しい。また同様に, Δ_{T_0} も Δ_s に等しい。

相関関数 χ_T , Δ_s , Δ_{T_1} に対しても, N_2 の結果 (3・175) を得るときと類似の考察により,

$$\chi_T \sim T^{b_9}, \quad b_9 = \eta_+ + \zeta_-^* - 2, \quad (\eta_+ + \zeta_-^* < 2), \quad (3 \cdot 176)$$

$$\Delta_s \sim T^{b_{10}}, \quad b_{10} = \eta_- + \zeta_+^* - 2, \quad (\eta_- + \zeta_+^* < 2), \quad (3 \cdot 177)$$

$$\Delta_{T_1} \sim T^{b_{12}}, \quad b_{12} = \eta_- + \zeta_-^* - 2, \quad (\eta_- + \zeta_-^* < 2), \quad (3 \cdot 178)$$

を得る。

上の結果の中で, χ_L と Δ_{T_0} に対する考察を除いたものは, 最初に, Prigodin-Firsov³⁹⁾ によって得られた。彼らは, ボゾン表示の方法を用いたが, 位相表示を行なうことなしに求めた。類似の結果は, Emery¹⁴⁾ によっても示されている。さらに, Sólyom⁴⁾ は, ボゾン表示することなしに, 電子間相互作用として前方散乱のみを含む朝永モデル¹¹⁾ の厳密解を用いて, 同じ結果を得ている。

§ 3・9・2 基底状態の相図

§ 3・2, § 3・8 とこの節の結果を用いて, BGD モデルの基底状態の相図を描いたのが, 図 3・10 (a) と (b) である。ここで, 領域 $0 < \tilde{g}_1^{\parallel} < |\tilde{g}_1^{\perp}|$ には, $|\tilde{g}_1^{\perp}| \ll 1$ のときにくりこみ群の方法で得られる基底状態が示されている。この領域は, くりこみ群の方法によって強結合領域であることは示されているが, ボゾン表示の方法で明確に議論できないため, $|\tilde{g}_1^{\perp}|$ が大きいときの基底状態は, はっきりしない。ボゾン表示の方法を用いて, SCHA で得られた結果は, $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ の領域について, $|\tilde{g}_1^{\perp}|$ が大きいときも正しいと考えられる。そこで, 図 3・10 では, $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 領域について, SCHA での結果 (§ 3・8 のもの) を用いた。弱結合領域に対しては, この節の結果を用いた。また, 図では, $\tilde{g}_2 > -3/10$ のときだけを描いているの

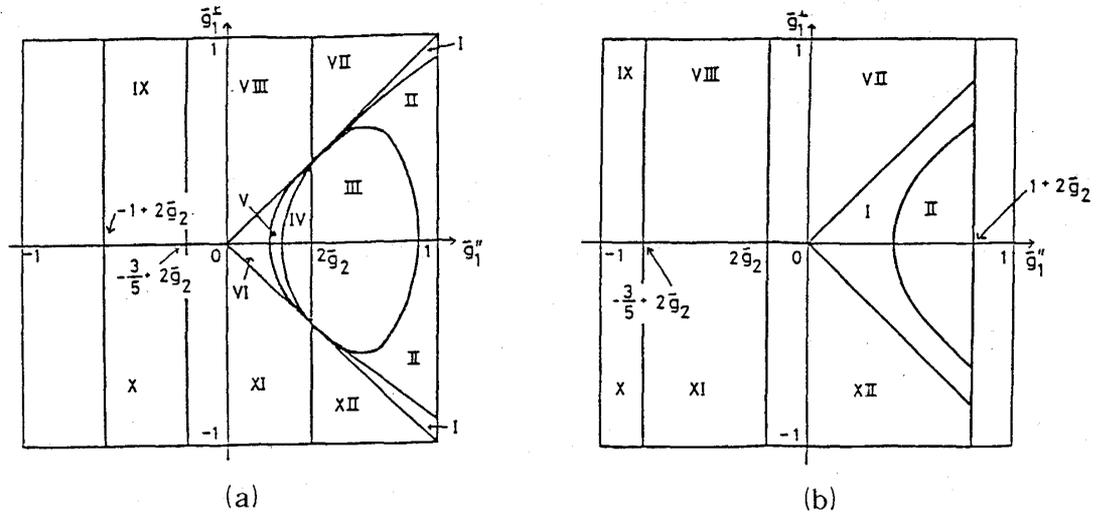


図 3・10：スピンに依存した BGD モデルの基底状態の相図。

(a)図は $\tilde{g}_2 > 0$ の場合、(b)図は $\tilde{g}_2 < 0$ の場合を示す。太線が各領域の境界を示す。ボゾン表示された BGD モデルの有効な領域、 $|\tilde{\alpha}| < 1$ 、 $|\tilde{g}_1^{\parallel}| < 1$ のみを描いた。I ~ XII の領域で、 $T=0$ において発散するゆらぎは次の通りである。

- I : TS1, (SS, TS0), II : TS1,
- III : TS1, (TSDW), IV : TSDW, (TS1),
- V : TSDW, VI : TSDW, ($2k_F$ -CDW, LSDW),
- VII : TS0, (LSDW), VIII : LSDW, (TS0),
- IX : LSDW, X : CDW,
- XI : CDW, (SS), XII : SS, (CDW)。

ここで、劣勢なゆらぎは、括弧内に示されている。

で、SS だけが発散する領域は現われていない。

弱結合領域 $|\tilde{g}_1^{\parallel}| > |\tilde{g}_1^{\perp}|$ について、図 3・10 の結果が厳密なものであることを考慮に入れて、くりこみ群の結果と比べると、次のことがわかる。くりこみ群の結果(3.54) ~ (3.59)でその最低次のものだけ((3.54) ~ (3.59) 式右辺の第 1 項のみ)を用いると、領域 II と V が消えるが、第 2 発散項まで((3.54) ~ (3.59) 右辺の 2 つの項)を考慮すると、領域 II と V は回復する。これは、くりこみ群の方法が、弱結合領域において、 $|\tilde{\alpha}| \ll 1$ 、でかつ $(\tilde{g}_1^{\parallel 2} - \tilde{g}_1^{\perp 2})^{1/2} \ll 1$ 、のとき、有効なものであるためである。このことより、次の点が注意されるべきである。弱結合領域では、くりこみ群の方法が定量的にも正しいと考えられてきたが、そのとき、何が弱結合なのかを明確にする必要がある。

附録3-A 2つの切断をもつモデル

スピンに依存したBGDモデルで、2つのエネルギーの切断をもつモデルを用いると、独立な結合定数を、 g_1^{\parallel} , g_1^{\perp} , g_2^{\parallel} , g_2^{\perp} の4つにとらなければならない理由を述べる。

まず、後方散乱と前方散乱を改めて、つぎのように定義する。後方散乱は格子振動を媒介にした相互作用である。そこで、 ω_D をデバイ波数とすると、momentum transfer q が $2k_F - \omega_D/v_F \leq |q| \leq 2k_F + \omega_D/v_F$ で g_1 を、 $g_1 \neq 0$ の定数、他の q に対して $g_1 = 0$ 、と定義する。他方、2電子間の直接のクーロン相互作用である前方散乱には、原理的に運動量の切断はない。しかし、近似的に相互作用の強さがかなり弱くなる適当な点に切断 k_D をおき、 g_2 を、momentum transfer q が、 $-k_D \leq q \leq k_D$ で $g_2 \neq 0$ 、他の q に対して $g_2 = 0$ と定義する。このとき、切断エネルギーは、 ω_D , $v_F k_D$ と電子のバンド幅 D の3つになる。ただし、第1章で述べたように、電子の分散関係を線形近似した。

$\omega_D = v_F k_D$ 、とおいた momentum transfer にも切断のあるモデルが、電子のバンド幅だけがあるモデルと、どのような違いがあるかを考察する。図3-A・1(a), (b)2つのダイアグラムは、電子のバンド幅だけに切断があるとき、それぞれ、後方散乱と前方散乱のバーテックスへ同じ大きさの寄与をする。しかし、 $\omega_D = v_F k_D < D$ 、のときは、両者の間に次に述べる違いが現われる。(a)図のダイアグラムでは、相互作用線(波線)を通じて、 $2k_F$ の運動量がやりとりされ、運動量の積分は、電子のバンドについてなされる。したがって、このダイアグラムを計算することにより、後方散乱のバーテックスに、 $g_1^2 \ln(\omega/2D)$ の寄与を得る。他方、(b)図のダイアグラムでは、相互作用線を通じて、 $2k_F + q$ の運動量をやりとりし、momentum transfer q について積分する。したがって、このダイアグラムを計算することにより、前方散乱のバーテックスに、 $g_1^2 \ln(\omega/2\omega_D)$ の寄与を得る。このように、エネルギーの切断

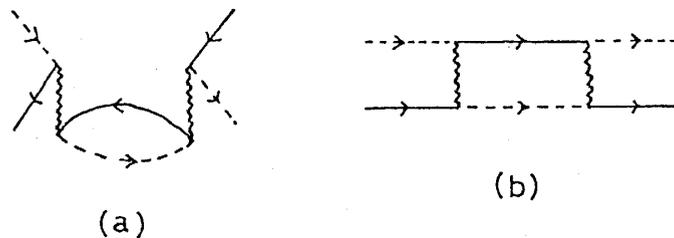


図3-A・1: momentum transfer にも切断があるとき、重要な働きをするダイアグラム

を2つ考えると、1つだけの場合にくらべ、 $\ln(\omega_D/D)$ に依存した違いが現われる。

エネルギーの切断を1つだけもつモデルでは、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} の項のハミルトニアンが同じであることを反映して、相関関数などの計算で、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} が、 $g_1^{\parallel} - g_2^{\parallel}$ の対の形で現われる。したがって、このモデルで、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} の項を区別して扱うメリットはない。このことから、通常、独立な結合定数を3つととる。しかし、切断を2つもつモデルでは、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} が対にならず、上に述べたように $\ln(\omega_D/D)$ だけずれ、 g_1^{\parallel} と g_2^{\parallel} を別々に考えなければならない⁴⁰⁾。そこで、独立な結合定数を4つ用いる。

エネルギーの切断を1つだけもつモデルで、4つの結合定数を用いたときの§3・1のスケールリングの結果は、弱結合領域に関するかぎり(結果(3・27))、2つの切断をもつものと同じになる。この理由は次の通りである。切断を2つ用いるときに現われる $\ln(\omega_D/D)$ による違いは、結合定数に関する最低次の項までのくりこみ群のリー方程式には現われず、次の項から現われることが知られている。³⁾ また、弱結合領域では、最低次までのリー方程式の結果は、有効結合定数に対するスケールリングの流れ図に関するかぎり、定量的にも正しいと考えられる。リー方程式の次の項は、最低次の項までの結果に、わずかな補正を加えるだけである。

附録3-B 自由エネルギー(3・92)の計算

自由ボゾンのときと同様に、変換 $\sum_p \rightarrow (L/2\pi) \int dp$, を用いて自由フェルミオンの自由エネルギーを

$$\begin{aligned} F_{0f} &= -2T \sum_{k>0} \ln(1 + e^{-\beta v_F(k-k_F)}) \\ &= -\frac{LT}{\pi v_F} \int_{\epsilon_F}^{\infty} d\epsilon \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}), \end{aligned} \quad (3-B-1)$$

と書く。ここで、上式の積分を

$$\int_{-\epsilon_F}^{\infty} d\epsilon \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}) = \epsilon \ln(1 + e^{-\beta\epsilon}) \Big|_{-\epsilon_F}^{\infty} + \int_{-\epsilon_F}^{\infty} \frac{\epsilon\beta e^{-\beta\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}} d\epsilon,$$

と部分積分すると、その第1項は、

$$\text{第1項} = \beta\epsilon_F^2 + \epsilon_F e^{-\beta\epsilon_F} + O(e^{-2\beta\epsilon_F}),$$

と計算され、第2項は、

$$\begin{aligned} \text{第2項} &= \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \frac{\beta \epsilon d(\beta \epsilon)}{1 + e^{\beta \epsilon}} + \frac{1}{\beta} \int_{-\beta \epsilon_F}^0 \frac{\beta \epsilon d(\beta \epsilon)}{1 + e^{\beta \epsilon}} \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\pi^2}{6} - \frac{\beta \epsilon_F^2}{2} - \left(\epsilon_F + \frac{1}{\beta} \right) e^{-\beta \epsilon_F} + O(e^{-2\beta \epsilon_F}), \end{aligned}$$

と計算される。ここで、公式

$$\int_0^\infty \frac{x dx}{1 + e^x} = \frac{\pi^2}{12}, \quad \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{12},$$

を用いた。これらより、(3-B・1)式は

$$F_{0f} = -\frac{L v_F k_F^2}{2\pi} - \frac{\pi L}{6 v_F} T^2 + \frac{L T^2}{\pi v_F} e^{-v_F k_F/T} + O(e^{-2v_F k_F/T}), \quad (3-B \cdot 2)$$

となる。

附録3-C $\phi_{i\alpha}''(x)$ の反交換関係

g_1^\perp 項, g_3^\perp 項, 電子のスピン・フリップをともなった後方散乱の項($\phi_{i\alpha}^+ \phi_j, -\alpha, i \neq j$), $\phi_{i\alpha}''$ を用いるとき, $\phi_{i\alpha}'$ を用いたときに比べ, 余分の係数がかからないかどうかを考察する。

$$\phi_i''(x) \equiv \exp \left[i \sum_j \lambda_{ij} \hat{N}_j \right] \phi_i'(x), \quad (3 \cdot 102)$$

が反交換関係 $\{\phi_i''(x), \phi_j''^+(y)\} = 0, (i \neq j)$, を満足する条件は

$$\lambda_{ij} - \lambda_{ji} = (2m+1)\pi, \quad (m: \text{整数}), \quad (3 \cdot 105)$$

である。ただし, i, j は $1 \equiv 1 \uparrow, 2 \equiv 1 \downarrow, 3 \equiv 2 \uparrow, 4 \equiv 2 \downarrow$, のいずれか1つを表わす。

g_1^\perp 項に ϕ_i' と ϕ_i'' を用いたとき, 系の粒子数にかかわらず, 両者が同じになる条件は,

$$\lambda_{2j} + \lambda_{3j} - \lambda_{1j} - \lambda_{4j} = 2m_1 \pi, \quad (m_1: \text{整数}), \quad (3-C \cdot 1)$$

であり, g_3^\perp 項とスピン・フリップをともなった後方散乱の項に対する条件は, それぞれ,

$$\lambda_{1j} + \lambda_{2j} - \lambda_{3j} - \lambda_{4j} = 2m_2 \pi, \quad (m_2: \text{整数}), \quad (3-C \cdot 2)$$

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{2j} - \lambda_{3j} &= 2m_3\pi, \\ \lambda_{1j} - \lambda_{4j} &= 2m_4\pi, \end{aligned} \right\} (m_3, m_4 : \text{整数}), \quad (3-C\cdot3)$$

である。(3・105), (3-C・1) ~ (3-C・3) 式を同時に満足する解 λ_{ij} が存在しないことは、容易に確かめることができる。すなわち、 g_1^\perp 項と g_3^\perp 項へ、 ϕ_i' または ϕ_i'' を用いたとき、どちらも同じ形になるように、 λ_{ij} をどのように選んでも、スピン・フリップをともなった後方散乱のポテンシャルの符号が、 $\phi_{i\alpha}''$ を用いたとき、系の粒子数に依存して変化してしまう。

スピン反転を起こさない後方散乱のポテンシャルの項に対する条件は、

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{1j} - \lambda_{3j} &= 2m_5\pi, \\ \lambda_{2j} - \lambda_{4j} &= 2m_6\pi, \end{aligned} \right\} (m_5, m_6 : \text{整数}), \quad (3-C\cdot4)$$

であり、(3・105), (3-C・1), (3-C・2) 式と (3-C・4) 式を同時に満たす解 λ_{ij} は存在する。例えば、そのとき $\phi_{i\alpha}''$ は (3・106) ~ (3・109) 式で与えられる。

電子に前方散乱を引き起こすポテンシャルの項に、 $\phi_{i\alpha}'$ または $\phi_{i\alpha}''$ を用いると、両者の形は常に一致する。また、相関関数、電気伝導度の表式は、 ϕ_i' または ϕ_i'' を用いたとき、両者の間に違いはない。

附録 3-D ハーモニックなハミルトニアン の性質

ハーモニックなハミルトニアンによる統計平均に関する性質

$$\begin{aligned} \langle T_\tau e^{i[\theta_+(x,\tau) - \theta_+(0,0)]} \rangle_{H_\rho} \\ = \exp\left[-\frac{1}{2} \langle T_\tau (\theta_+(x,\tau) - \theta_+(0,0))^2 \rangle_{H_\rho}\right], \end{aligned} \quad (3-D\cdot1)$$

を、汎関数積分の方法で証明する。ここで、 H_ρ は (3・82) 式で与えられる。

次の関係式は、直接の積分計算により、容易に示される。

$$\begin{aligned} \langle e^{ix} \rangle &= \exp\left[-\frac{1}{2} \langle x^2 \rangle\right], \\ \langle A \rangle &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} A e^{-ax^2} dx / \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx. \end{aligned} \quad (3-D\cdot2)$$

ここで、 a は定数である。

ハミルトニアン H_ρ に、§ 3・6 で行なったのと類似の変換を行なって、 H_ρ を 2次元平面上の

古典量 θ_+ によって表わし, (3-D・1) 式の左辺を, 次の汎関数積分形に得る。

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau e^{i[\theta_+(x, \tau) - \theta_+(0, 0)]} \rangle_{H_\rho} \\ &= \int \cdots \int \mathcal{D}\tilde{\theta}(\mathbf{k}) \exp \left[\frac{i}{(2\pi)^2} \int d^2 \mathbf{k} \tilde{\theta}(\mathbf{k}) (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - 1) \right] \\ & \times e^{-S[\theta]} / \int \cdots \int \mathcal{D}\tilde{\theta}(\mathbf{k}) e^{-S[\theta]}, \end{aligned} \quad (3-D\cdot 3)$$

$$S[\theta] = \int d^2 \mathbf{k} \mathbf{k}^2 \tilde{\theta}(\mathbf{k}) \tilde{\theta}(-\mathbf{k}),$$

$$\theta(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \tilde{\theta}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

ここで, $\mathbf{r} = (x, x_\tau)$, であり,

$$x_\tau = -i v_F (1 - \tilde{\alpha}^2)^{1/2} \tau, \quad \theta(\mathbf{r}) = (1/2 \sqrt{\pi \eta_+}) \theta_+,$$

$$\eta_+ \equiv [(1 + \tilde{\alpha}) / (1 - \tilde{\alpha})]^{1/2},$$

である。さらに, $\tilde{\theta}^+(\mathbf{k}) = \tilde{\theta}(-\mathbf{k})$, と (3-D・2) 式を用いて, (3-D・3) 式は,

$$\exp \left[-\frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^2 \mathbf{k} \tilde{\theta}^2(\mathbf{k}) (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - 1)^2 \right\rangle \right],$$

となる。ここで, $\langle \tilde{\theta}(\mathbf{k}) \rangle = 0$, を用いて,

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{1}{2} \left\langle \left(\frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2 \mathbf{k} \tilde{\theta}(\mathbf{k}) (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - 1) \right)^2 \right\rangle \right] \\ &= \exp \left[-\frac{1}{2} \langle T_\tau (\theta_+(x, \tau) - \theta_+(0, 0))^2 \rangle \right], \end{aligned} \quad (3-D\cdot 4)$$

を得る。

関係式 (3-D・1) は, H_ρ にエネルギー・ギャップが含まれていたとしても, ハミルトニアンが θ_+ の 2 次の項だけからできていれば, 成り立つ。

附録 3-E 相関関数のフーリエ変換の計算

表式 (3・143), (3・164), (3・165) を用いて, 相関関数のフーリエ変換を計算し, 絶対零度近傍の性質を調べる。変数変換

$$2\pi T |x| / a_\rho + T / \omega_D = u, \quad T\tau = v, \quad (3-E\cdot 1)$$

杉山忠男

を行うと、相関関数のフーリエ変換 $R(0,0)$ または $R(2k_F, 0)$ を、 $\tilde{g}_1^\perp < 0$ のとき、次のように書くことができる。

$$N_2(2k_F, 0) \sim T^{\eta_+ - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_+ / 2} \\ \times \{E'_{+,-}(u, v) + E'_{+,+}(u, v)\}, \quad (3-E \cdot 2)$$

$$\chi_L(2k_F, 0) \sim T^{\eta_+ - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_+ / 2} \\ \times \{E'_{+,-}(u, v) - E'_{+,+}(u, v)\} \quad (3-E \cdot 3)$$

$$\chi_T(2k_F, 0) \sim T^{\eta_+ - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_+ / 2} \\ \times \{E'_{-,-}(u, v) \pm E'_{-,+}(u, v)\}, \quad (3-E \cdot 4)$$

$$A_s(0,0) \sim T^{\eta_- - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_- / 2} \\ \times \{E'_{+,-}(u, v) + E'_{+,+}(u, v)\} \quad (3-E \cdot 5)$$

$$A_{T0}(0,0) \sim T^{\eta_- - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_- / 2} \\ \times \{E'_{+,-}(u, v) - E'_{+,+}(u, v)\} \quad (3-E \cdot 6)$$

$$A_{T1}(0,0) \sim T^{\eta_- - 2} \int_{T/\omega_D}^{\infty} du \int_0^1 dv [2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_- / 2} \\ \times \{E'_{-,-}(u, v) \pm E'_{-,+}(u, v)\}, \quad (3-E \cdot 7)$$

$$E'_{\pm, \mp}(u, v) \equiv \exp \left[\pm \zeta_+ K_0 \left(\frac{q_c}{T} \left\{ \left(\frac{a_\rho}{2\pi} \right)^2 u^2 + a_\sigma^2 v^2 \right\}^{1/2} \right) \right]. \quad (3-E \cdot 8)$$

ここで、 $E'_{\pm, \mp}(u, v)$ は $T \ll q_c$ であるかぎり、 $\tau \neq 0$ のとき、零である。したがって、 $A_{T1}(0,0) = \chi_T(2k_F, 0) = 0$ が得られる。以下では、 $A_s(0,0)$ 、 $A_{T0}(0,0)$ 、 $\chi_L(2k_F, 0)$ 、 $N_2(2k_F, 0)$ 、について考察する。

まず、 $\eta_\pm < 2$ のとき、 u と v の下限から、 $T \rightarrow 0$ のとき、どのような寄与があるかを考える。被積分関数の項 $[2 \cosh u - 2 \cos 2\pi v]^{-\eta_\pm / 2}$ は発散の寄与をしない。また、0 次の変形ベッセル関数の引数 $(q_c/T) [(a_\rho/2\pi)^2 u^2 + a_\sigma^2 v^2]^{1/2}$ は、 $T \rightarrow 0$ のとき、 $u = T/\omega_D$ 、 $v = 0$ 、の点を除いて $+\infty$ に発散する。そこで、 K_0 の漸近形

$$K_0(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \sum_n \frac{(\nu, n)}{(2z)^n}, \quad (z \rightarrow \infty), \quad (3-E \cdot 9)$$

$$(\nu, n) \equiv \frac{\Gamma(\nu + n + \frac{1}{2})}{n! \Gamma(\nu - n + \frac{1}{2})} \quad (\Gamma \text{はガンマ関数}),$$

から, $u = T/\omega_D$, $v = 0$, の点を除いて, $T \rightarrow 0$ のとき $K_0 \rightarrow 0$, であることがわかる。

$u = T/\omega_D$, $v = 0$, の点では, K_0 は有限値をとる。そこで, $E'_{\pm}(T/\omega_D, 0)$ は有限値となり, $[2\cosh u - 2\cos 2\pi v]^{-\eta_{\pm}/2}$ との積の積分値へ, u, v に関する下限からの発散の寄与はない。

つぎに, u の上限は, 項 $[2\cosh u - 2\cos 2\pi v]^{-\eta_{\pm}/2}$ のために, 発散しない。 u, v の上限と下限を除いた点からの寄与は, (3-E・2)式と(3-E・5)式の場合, 温度のべきを含まない有限値である。したがって, (3-E・2)式と(3-E・5)式の u, v に関する積分は, $\eta_{\pm} < 2$ のとき有限値となり, $T \rightarrow 0$ のとき, $N_2(2k_F, 0)$ と $A_s(0, 0)$ の温度の指数は, それぞれ, $\eta_+ - 2$, $\eta_- - 2$, となる。(3-E・3)式と(3-E・6)式については, u, v の下限を除いた点で, $T \rightarrow 0$ のとき, 被積分関数が, 指数関数的に零になる。したがって, u, v の下限を除いたところから, (3-E・3)式と(3-E・6)式への寄与はない。 $u = T/\omega_D$, $v = 0$, で被積分関数は有限値となる。被積分関数が有限の寄与をするのは, $u \lesssim T$, $v \lesssim T$ と考えられるので, u, v に関する積分は, $\sim T^2$ の寄与をする。したがって, $\chi_L(2k_F, 0)$ と $A_{T_0}(0, 0)$ は, それぞれ, $\sim T^{\eta_+}$, $\sim T^{\eta_-}$, となる。

$\eta_{\pm} = 2$ のとき, (3-E・2)式と(3-E・5)式で, u, v に関する積分は, $T \rightarrow 0$ で, 対数的に発散する。また, η_{\pm} が2を超えると, u, v に関する積分は, $\sim T^{-(\eta_{\pm}-2)}$ となり, $N_2(2k_F, 0)$ または $A_s(0, 0)$ は有限値となる。

以上の考察から, §3・8の結果を得る。

第3章 参考文献

- 1) N. Menyhárd and J. Sólyom, J. Low Temp. Phys. 12 (1973), 529.
- 2) T. Sugiyama, Prog. Theor. Phys. 64 (1980), 406.
- 3) G. S. Grest, E. Abrahams, S. T. Chui, P. A. Lee and A. Zawadowski, Phys. Rev. B14 (1976), 1225.
- 4) J. Sólyom, Adv. Phys. 28 (1979), 201.
- 5) M. Kimura, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 955.
- 6) M. Kimura and H. Fukuyama, Solid State Commun. 17 (1975), 381.

- 7) J. Sólyom, *Solid State Commun*, **17** (1975), 63.
- 8) C. S. Ting, *Phys. Rev.* **B13** (1976), 4029.
- 9) E. H. Rezayi, J. Sak and S. Talukdar, *Phys. Rev.* **B19** (1979), 4757.
- 10) J. Sólyom, *J. Low Temp. Phys.* **12** (1973), 547.
- 11) S. Tomonaga, *Prog. Theor. Phys.* **5** (1950), 349.
- 12) J. M. Luttinger, *J. Math. Phys.* **4** (1963), 1154.
- 13) D. C. Mattis and E. H. Lieb, *J. Math. Phys.* **6** (1965), 304.
- 14) V. J. Emery, *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, edited by J. T. Devreese, R. P. Evrard and V. E. van Doren (Plenum Press, New York, 1979), p. 247.
- 15) A. Luther and V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **33** (1974), 589.
- 16) D. C. Mattis, *J. Math. Phys.* **15** (1974), 609.
- 17) A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev.* **B9** (1974), 2911.
- 18) K. B. Efetov and A. I. Larkin, *Zh. Eksp. Theor. Fiz* **66** (1974), 2290 (*Sov. Phys. -JETP* **39** (1974), 1129); **69** (1975), 764 (**42** (1976), 390).
- 19) A. Luther, *Phys. Rev.* **B14** (1976), 2153; **B15** (1977), 403.
- 20) Y. Suzumura, *Prog. Theor. Phys.* **61** (1979), 1.
- 21) R. M. May, *Phys. Rev.* **135** (1964), A1515.
- 22) A. Theumann, *Phys. Rev.* **B15** (1977), 4524.
- 23) S. Takada and S. Misawa, *Prog. Theor. Phys.* **66** (1981), 101.
- 24) T. Sugiyama, *Prog. Theor. Phys.* **65** (1981), 1077.
- 25) K. Okamoto and M. Wakata, *Prog. Theor. Phys.* **66** (1981), 15.
- 26) K. Okamoto, *Prog. Theor. Phys.* **66** (1981), 852.
- 27) P. B. Wiegmann, *J. of Phys.* **C11** (1978), 1583.
- 28) T. Ohta, *Prog. Theor. Phys.* **60** (1978), 968.
- 29) J. B. Kogut, *Rev. Mod. Phys.* **51** (1979), 659.
- 30) D. J. Amit, Y. Y. Goldschmidt and G. Grinstein, *J. of Phys.* **A13** (1980), 585.
- 31) S. Takada, T. Sakaguchi and S. Misawa, *Prog. Theor. Phys.* **66** (1981), 820.
- 32) J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. of Phys.* **C6** (1973), 1181.
- 33) J. M. Kosterlitz, *J. of Phys.* **C7** (1974), 1046.
- 34) S. T. Chui and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **35** (1975), 315.
- 35) V. J. Emery, A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev.* **B13** (1976), 1272.
- 36) A. Mishima and M. Kimura, *Solid State Commun.* **48** (1983), 1031.
- 37) V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **37** (1976), 107.

- 38) E. H. Rezayi, J. Sak and J. Sólyom, Phys. Rev. **B23** (1981), 1342.
- 39) V. N. Prigodin and Yu. A. Firsov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **71** (1976), 2252 (Sov. Phys. -JETP **44** (1976), 1187).
- 40) G. S. Grest, Phys. Rev. **B14** (1976), 5114.

第4章 1次元電子系の性質

前章までで、1次元電子系の多体問題を研究する際用いられる、くりこみ群の方法とボゾン表示の方法を説明した。この章では、これらの方法を用いて、1次元電子系の性質を調べる。前半で、準1次元電子系の性質を調べる。後半で、波数 $2k_F$ の周期ポテンシャル中で相互作用している1次元電子系と、関連した問題について述べる。

ここで考える準1次元電子系とは、次の性質を有する系をいう。個々の電子が自由に動くとき、その方向は1次元軸方向に限定される。相互作用は、常温で、鎖内電子間のものが、鎖間のものより十分強い。また、2電子が対になって、あるいは、互いに鎖を入れかえて鎖間をホッピングすることは可能であるが、その強さは、常温で、鎖内電子間の相互作用より十分弱い。

準1次元電子系では、その3次元性のために、有限温度での相転移が可能である。実際の1次元物質には、必ず3次元性があり、準1次元系であると考えられる。また、周期ポテンシャル中の1次元電子系には外力が働いており、この場合も有限温度での相転移が可能である。

§4・1では、準1次元電子系のモデルを説明し、結合定数と相関関数に対するくりこみ群のリー方程式を求める。§4・2では、準1次元電子系で、温度の低下とともに、ゆらぎが成長し、相転移を起こす過程を、くりこみ群の方法を用いて描く。§4・3では、準1次元電子系で、転移温度以上での2種類のゆらぎ間の競争の問題を、くりこみ群の方法を用いて研究する。§4・4では、準1次元電子系の転移温度以下の秩序状態を、ボゾン表示の方法を用いて研究する。§4・5では、波数 $4k_F$ のCDW相関関数のふるまいを研究し、これと関連の深いウムクラップ散乱。および、電気伝導度について、ボゾン表示の方法を用いて調べる。

§4・6で、波数 $2k_F$ の周期ポテンシャル中で相互作用している1次元電子系の性質を、ボゾン表示の方法を用いて調べる。

§4・1 準1次元電子系のモデルとくりこみ群

§4・1・1 準1次元電子系のモデル

電子の鎖間ホッピングを含む鎖間相互作用としては、次のものが考えられる。まず、電子がホッピングしないものとして、異なった鎖上の2電子間の後方散乱と前方散乱がある。つぎに電子が鎖間をホッピングする場合を考える。電子の鎖間ホッピングには2つの働きがある。1つは電子の分散を変えるものである。これは秩序を壊す働きをもつ。¹⁾ 他の1つは2電子が同時に鎖間をホッピングする場合であり、これは、鎖内のゆらぎを安定化させ、秩序を形成する

働きがある。後者は、2体の相互作用として扱うことができる。

この節では、電子の鎖間ホッピングの中で、前者の働きを無視し、後者のみを考察の対象とする。²⁾⁻⁴⁾ また、2電子の鎖間ホッピングとして、鎖2本だけが関与するものを考え、反転過程を含むものを除く。そのとき、電子が鎖間ホッピングしない鎖間相互作用を含めると、モデルは次のハミルトニアンで与えられる。

$$H = H_0 + H_I + H_J + H_K + H_L \quad (4.1)$$

$$H_0 = \sum_{k,\alpha} [v_F(k - k_F) a_{ik\alpha}^\dagger a_{ik\alpha} + v_F(-k - k_F) b_{ik\alpha}^\dagger b_{ik\alpha}], \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} H_I = & \frac{1}{L} \sum_i \sum_{k_1, k_2, q} \{ (g_{1i}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + g_{1i}^\perp \delta_{\alpha, -\beta}) \\ & \times a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, \beta}^\dagger a_{ik_2\beta} b_{ik_1\alpha} \\ & - (g_{2i}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + g_{2i}^\perp \delta_{\alpha, -\beta}) a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, \beta}^\dagger a_{ik_1\alpha} b_{ik_2\beta} \}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} H_J = & \frac{1}{L} \sum_{i \neq j} \sum_{k_1, k_2, q} \{ (J_{1ij}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + J_{1ij}^\perp \delta_{\alpha, -\beta}) \\ & \times a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{j, k_2-q, \beta}^\dagger a_{jk_2\beta} b_{ik_1\alpha} + \text{h.c.} \\ & - (J_{2ij}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + J_{2ij}^\perp \delta_{\alpha, -\beta}) a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{j, k_2-q, \beta}^\dagger a_{ik_2\alpha} b_{ik_1\beta} \}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} H_K = & \frac{1}{L} \sum_{i \neq j} \sum_{k_1, k_2, q} \{ (K_{1ij}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + K_{1ij}^\perp \delta_{\alpha, -\beta}) \\ & \times a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, \beta}^\dagger a_{jk_2\beta} b_{jk_1\alpha} \\ & - (K_{2ij}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + K_{2ij}^\perp \delta_{\alpha, -\beta}) a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, \beta}^\dagger a_{jk_1\alpha} b_{jk_2\beta} \}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$H_L = \frac{1}{L} \sum_{i \neq j} \sum_{k_1, k_2, q} \{ (L_{1ij}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + L_{1ij}^\perp \delta_{\alpha, -\beta})$$

$$\times a_{i,k_1+q,\alpha}^\dagger b_{j,k_2-q,\beta}^\dagger a_{ik_2\beta} b_{jk_1\alpha} - (L_{2ij}^\parallel \delta_{\alpha\beta} + L_{2ij}^\perp \delta_{\alpha,-\beta}) a_{i,k_1+q,\alpha}^\dagger b_{j,k_2-q,\beta}^\dagger a_{jk_2\alpha} b_{ik_1\beta} \} \quad (4.6)$$

ここで、 a_k, b_k は、それぞれ右向き、左向き電子の消滅演算子である。また、 i, j は鎖の番号であり、 α, β はスピン添字である。これらの鎖間相互作用は、ダイアグラムで、図4・1に示す。 J_{1ij} と J_{2ij} は、異なった鎖上電子間の後方散乱の相互作用と前方散乱の相互作用、 K_{1ij} と K_{2ij} は、同じ鎖上の右向き電子と左向き電子の対が、他の鎖へホッピングし、それぞれの電子がその向きを変える相互作用と変えない相互作用、 L_{1ij} と L_{2ij} は、異なった鎖上の右向き電子と左向き電子が、互いに鎖を入れかえ、その向きを変える相互作用と変えない相互作用である。今、個々の電子がバラバラに鎖間をホッピングすることを無視したので、フェルミ面は1次元のものである。

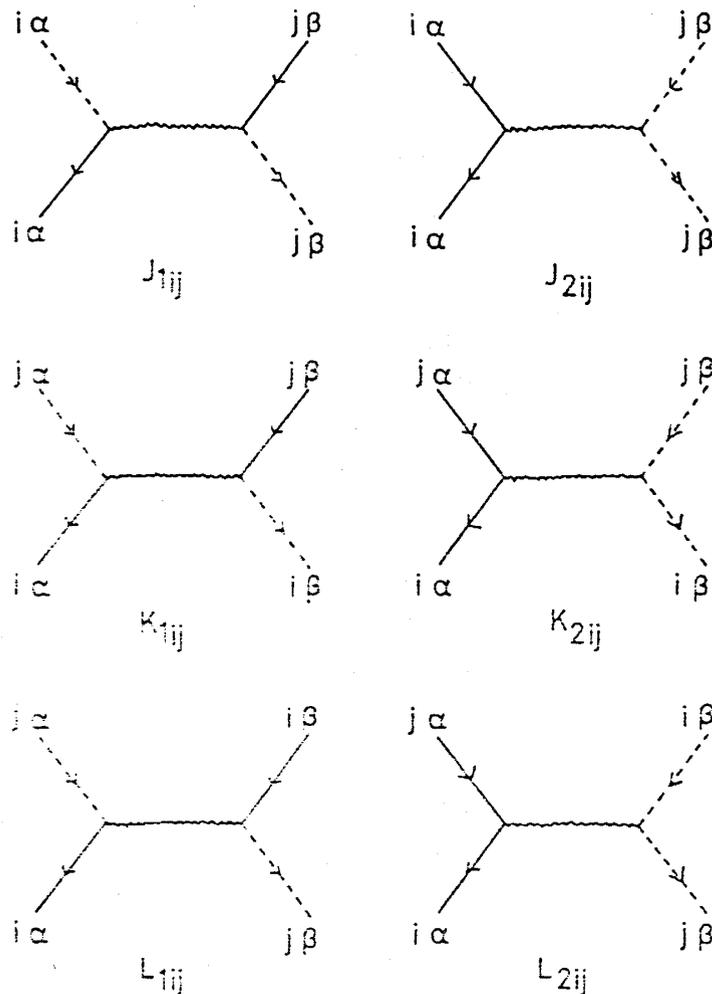


図4・1：準1次元電子系、鎖間相互作用のダイアグラム。

§4・1・2 くりこみ群

これらの相互作用に対するくりこみ群のリー方程式は、第2章、第3章に述べたものと類似の方法によりつくることができる。まず、バーテックス関数を、§3・1の(3・1)式のように2体のグリーン関数から定義する。また、外線のエネルギー・運動量を図4・2のようにとり

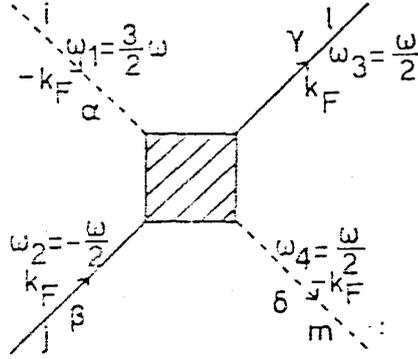


図4・2：準1次元電子系，一般のバーテックスの4つの足のエネルギー・運動量のとり方。

バーテックス関数 $\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ijklm}$ から次元のない量， $r_{1i}^{\parallel}, r_{1i}^{\perp}, r_{2i}^{\parallel}, r_{2i}^{\perp}, r_{1ij}^{\parallel}, r_{1ij}^{\perp}, r_{2ij}^{\parallel}, r_{2ij}^{\perp}, r_{1ij}^{K\parallel}, r_{1ij}^{K\perp}, r_{2ij}^{K\parallel}, r_{2ij}^{K\perp}, r_{1ij}^{L\parallel}, r_{1ij}^{L\perp}, r_{2ij}^{L\parallel}, r_{2ij}^{L\perp}$ を，

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ijklm} = & (g_{1i}^{\parallel} r_{1i}^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_{1i}^{\perp} r_{1i}^{\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{il} \delta_{jm} \delta_{ij} \\ & - (g_{2i}^{\parallel} r_{2i}^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + g_{2i}^{\perp} r_{2i}^{\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{il} \\ & + \{ (J_{1ij}^{\parallel} r_{1ij}^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + J_{1ij}^{\perp} r_{1ij}^{\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{il} \delta_{jm} \\ & - (J_{2ij}^{\parallel} r_{2ij}^{\parallel} \delta_{\alpha\beta} + J_{2ij}^{\perp} r_{2ij}^{\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{im} \delta_{jl} \} (1 - \delta_{ij}) \\ & + \{ (K_{1ij}^{\parallel} r_{1ij}^{K\parallel} \delta_{\alpha\beta} + K_{1ij}^{\perp} r_{1ij}^{K\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{ij} \delta_{lm} \\ & - (K_{2ij}^{\parallel} r_{2ij}^{K\parallel} \delta_{\alpha\beta} + K_{2ij}^{\perp} r_{2ij}^{K\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{ij} \delta_{lm} \} (1 - \delta_{il}) \\ & + \{ (L_{1ij}^{\parallel} r_{1ij}^{L\parallel} \delta_{\alpha\beta} + L_{1ij}^{\perp} r_{1ij}^{L\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \delta_{im} \delta_{jl} \end{aligned}$$

$$-(L_{2ij}^{\parallel} r_{2ij}^{L\parallel} \delta_{\alpha\beta} + L_{2ij}^{\perp} r_{2ij}^{L\perp} \delta_{\alpha,-\beta}) \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \delta_{il} \delta_{jm} \} (1 - \delta_{ij}) \quad (4.7)$$

と定義する。ここで、 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ はスピンの \uparrow または \downarrow を表わし、 i, j, l, m は鎖の番号を表わす。グリーン関数は各鎖共通であり、次元のないグリーン関数を、(3.4)式と同様に、

$$G_{\pm}^i(\pm k_F, \omega) = d \left(\frac{\omega}{2D} \right) G_{\pm}^{(0)i}(\pm k_F, \omega) \quad (3.4a)$$

と定義する。エネルギーの切断としては、バンド幅 $2D$ によるものだけを用いる。

上に定義した次元のないグリーン関数と、次元のないバーテックスに対し、(3.5)~(3.11)式のような multiplicative renormalization の関係が成り立ち、その関係から、有効結合定数に対するリー方程式を得ることができる。

この節では、リー方程式を、その右辺で鎖内結合定数については3次まで、鎖間結合定数については2次まで計算する。ただし、鎖内結合定数の2次と、鎖間結合定数の1次との積は残し、鎖内結合定数の1次と鎖間結合定数の2次の積は落とす。このようにとる理由は、高温領域で、鎖間結合定数が、鎖内結合定数に比べ、十分小さいことを考慮に入れるためである。また、議論の煩雑さを避けるため、結合定数に対するくりこみ群のリー方程式は、下に述べる L_{2ij} を除いて、結合定数がスピン添字に依存しない場合について述べる。得られるリー方程式は次の通りである。

$$\frac{\partial \tilde{g}'_{1i}}{\partial \xi} = 2\tilde{g}'_{1i}{}^2 + 2\tilde{g}'_{1i}{}^3 + 2 \sum_{k \neq i} (\tilde{J}'_{1ik}{}^2 + \tilde{K}'_{1ik} \tilde{K}'_{2ki}), \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial \tilde{g}'_{2i}}{\partial \xi} = \tilde{g}'_{1i}{}^2 + \tilde{g}'_{1i}{}^3 + \sum_{k \neq i} (\tilde{K}'_{1ik}{}^2 + \tilde{K}'_{2ik}{}^2 - \tilde{L}'_{2ik}{}^2), \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial \tilde{J}'_{1ij}}{\partial \xi} = 4\tilde{g}'_{1i} \tilde{J}'_{1ij} + 2\tilde{J}'_{1ij} (-\tilde{g}'_{2i} + F_I) + 2 \sum_{k \neq i, j} \tilde{J}'_{1ik} \tilde{J}'_{1kj}, \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial \tilde{K}'_{1ij}}{\partial \xi} = 2\tilde{K}'_{1ij} (\tilde{g}'_{2i} + F_I) + 2\tilde{K}'_{2ij} \tilde{g}'_{1i} + 2 \sum_{k \neq i, j} \tilde{K}'_{1ik} \tilde{K}'_{2kj}, \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{K}'_{2ij}}{\partial \xi} &= 2\tilde{K}'_{1ij} \tilde{g}'_{1i} + 2\tilde{K}'_{2ij} (\tilde{g}'_{2i} + F_I) \\ &+ \sum_{k \neq i, j} (\tilde{K}'_{1ik} \tilde{K}'_{1kj} + \tilde{K}'_{2ik} \tilde{K}'_{2kj}), \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial \tilde{L}'_{2ij}}{\partial \xi} = 2\tilde{L}'_{2ij} (-\tilde{g}'_{2i} + F_I) - \sum_{k \neq i, j} \tilde{L}'_{2ik} \tilde{L}'_{2ij} \quad (4.13)$$

$$F_I \equiv \tilde{g}'_{1i}{}^2 + \tilde{g}'_{2i}{}^2 - \tilde{g}'_{1i} \tilde{g}'_{2i}, \quad (4 \cdot 14)$$

$$\xi \equiv \ln(D'/D)。$$

ここで、 \tilde{g} は、 $2\pi v_F$ を単位として計った結合定数 g を表わし、 \tilde{g}' は、 \tilde{g} の有効結合定数を表わす。附録 4-A に、(4.8) 式の導出の計算を例として示す。他のものも同様である。また、結合定数 J_{2ij} と L_{1ij} は、後に述べるように、相関関数の発散に奇与しない。さらに、附録 4-B に述べるように、他の鎖間結合定数に比べ、 J_{2ij} と L_{1ij} のくりこまれ方が小さい。そこで、上式では、 J_{2ij} と L_{1ij} に対するリー方程式を省き、 J_{2ij} と L_{1ij} の他の結合定数への寄与を落した。同じスピンをもつ電子間の相互作用 J_{1ij}^{\parallel} と L_{2ij}^{\parallel} は、切断エネルギーを1つだけ用いるかぎり、第3章で述べたことと同様にして、同じ働きをもつ。そこで、 $L_{2ij}^{\parallel} = 0$ とし、異なったスピンをもつ電子間の相互作用 L_{2ij}^{\perp} を、 $L_{2ij} \equiv L_{2ij}^{\perp}$ とおいた。その上で $J_{1ij} \equiv J_{1ij}^{\parallel} = J_{1ij}^{\perp}$ とした。

§4.1.3 相関関数

各オーダー・パラメータに対する相関関数を考える。N本の鎖をもつ系での相関関数 $R_{ij}(k, \omega)$ を次のように定義する。

$$R_{ij}(k, \omega) = -i \int dt e^{-i\omega t} \langle 0 | T O_i(k, t) O_j^{\dagger}(k, t) | 0 \rangle。 \quad (4 \cdot 15)$$

ここで、 $O_i(k, t)$ は、 i 番目の鎖上のオーダー・パラメータである。以下では、一般に、結合定数がスピンに依存するものを用いる。また、6つのオーダー・パラメータに対する相関関数、すなわち、 $2k_F$ -電荷密度波 N_{2ij} 、縦波のスピン密度波 χ_{Lij} 、横波のスピン密度波 χ_{Tij} 、1重項超伝導 Δ_{sij} 、 $S_z = 0$ をもつ3重項超伝導 Δ_{T0ij} 、 $S_z = \pm 1$ をもつ3重項超伝導 Δ_{T1ij} 、を用いる。

各相関関数に対するリー方程式は、§3.2の計算と類似の方法で求めることができる。その結果は、次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{N}_{2ij} = 2\tilde{J}'_{1ij}{}^{\parallel} + 2\tilde{J}'_{1ij}{}^{\perp} + (2\tilde{g}'_{1i}{}^{\parallel} + 2\tilde{g}'_{1i}{}^{\perp} - 2\tilde{g}'_{2i} + F) \delta_{ij}, \quad (4 \cdot 16)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{\chi}_{Lij} = 2\tilde{J}'_{1ij}{}^{\parallel} - 2\tilde{J}'_{1ij}{}^{\perp} + (2\tilde{g}'_{1i}{}^{\parallel} - 2\tilde{g}'_{1i}{}^{\perp} - 2\tilde{g}'_{2i} + F) \delta_{ij}, \quad (4 \cdot 17)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{\chi}_{Tij} = -2\tilde{L}_{2ij}^{\perp'} + (-2\tilde{g}'_{2i} + F) \delta_{ij}, \quad (4 \cdot 18)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{A}_{sij} = 2\tilde{K}_{1ij}^{\perp'} + 2\tilde{K}_{2ij}^{\perp'} + (2\tilde{g}'_{1i} + 2\tilde{g}'_{2i} + F) \delta_{ij}, \quad (4 \cdot 19)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{A}_{T0ij} = -2\tilde{K}_{1ij}^{\perp'} + 2\tilde{K}_{2ij}^{\perp'} + (-2\tilde{g}'_{1i} + 2\tilde{g}'_{2i} + F) \delta_{ij}, \quad (4 \cdot 20)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \ln \bar{A}_{T1ij} = -2\tilde{K}_{1ij}^{\parallel'} + 2\tilde{K}_{2ij}^{\parallel'} + (-2\tilde{g}'_{1i} + 2\tilde{g}'_{2i} + F) \delta_{ij}, \quad (4 \cdot 21)$$

$$F \equiv \tilde{g}_1^{\parallel,2} + \tilde{g}_1^{\perp,2} - 2\tilde{g}_1^{\parallel'} \tilde{g}'_2 + 2\tilde{g}_2^{\prime 2}, \quad (3 \cdot 47)$$

$$\bar{R}_{ij} \equiv \pi v_F \frac{\partial R_{ij}}{\partial \xi}, \quad R_{ij} \equiv N_{ij}, \chi_{Lij}, \chi_{Tij}, A_{sij}, A_{T0ij} \text{ または } A_{T1ij},$$

$$\xi \equiv \ln(T/D).$$

ここで

$$\tilde{g}_{2i} = \tilde{g}_{2i}^{\parallel} = \tilde{g}_{2i}^{\perp}, \quad L_{2ij}^{\parallel} = 0,$$

ととった。また、上式から、 \tilde{J}_{2ij} と \tilde{L}_{1ij} が何の相関関数にも寄与しないことがわかる。

§ 4・2 準1次元電子系の秩序形成と相転移

個々の電子は、常に1次元軸の方向のみに動くと仮定すると、準1次元電子系では、温度の低下と共に、次の順序で秩序が形成されていくと考えられる。

① 鎖内相互作用が重要であり、鎖内のゆらぎが成長する。 \tilde{g}_{ii} を次元をもたない鎖内の結合定数、 \tilde{g}_{ij} を鎖間の結合定数とすると、この温度領域では、

$$|\tilde{g}_{ij}| \ll |\tilde{g}_{ii}| \ll 1,$$

である。

② 鎖間のゆらぎを安定化させる相互作用が重要となる。この温度領域では、

$$\sum_j^N |\tilde{g}_{ij}| \gg |\tilde{g}_{ii}|,$$

が成り立つ。

③ 長距離秩序ができる。

①～③の様子は、図4・3に示される。この節では、2種類のゆらぎ間の競争は考えない。

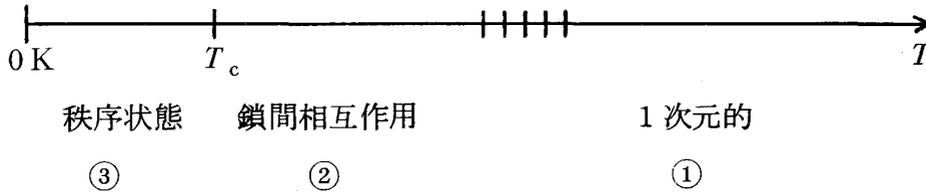


図4・3：準1次元電子系における秩序形成の様子。

1種類のゆらぎの秩序形成の過程のみを考察する。また、以下では、結合定数を

$$\tilde{J}_{cij} \equiv \tilde{J}_{1ij}^{\parallel} = \tilde{J}_{1ij}^{\perp}, \quad \tilde{K}_{sij} \equiv \tilde{K}_{1ij}^{\perp} = \tilde{K}_{2ij}^{\perp}, \quad \tilde{L}_{Tij} \equiv \tilde{L}_{2ij}^{\perp},$$

とおく。

§4・2・1 リー方程式の解法

リー方程式(4・8)～(4・13)を解くことを考える。いま、 $\tilde{J}_{1ij} \neq 0$ で、他の鎖間結合定数がすべて零の場合でも、 $\tilde{g}'_{1i}, \tilde{g}'_{2i}, \tilde{J}'_{1ij}$ に関するどのリー方程式も閉じることがなく、容易に解くことができない。他の鎖間結合定数が零でない場合も同様である。そこで、次の2つの近似方法により、転移温度を求める。^{3), 4)}

1つは、鎖内の結合定数に対するリー方程式(4・8), (4・9)の右辺で、鎖間の結合定数を無視し、鎖内の結合定数を、1本の鎖の問題として解く。すなわち、鎖内の結合定数が、鎖間の結合定数によってはくりこまれないと仮定する。その上で、鎖間の結合定数のリー方程式(4・10)～(4・13)を、鎖内の結合定数の効果を取り入れて解き、鎖間の結合定数の発散点から、転移温度を求める。この近似方法は、鎖内の結合定数に対する鎖間の結合定数の効果を完全に無視したものである。鎖間の結合定数が転移温度で発散するので、転移温度近傍では、鎖間の結合定数もかなり大きくなっているはずである。そこで、転移温度の近傍でのみ、鎖間の結合定数が鎖内の結合定数と同程度の大きさになっているとして、鎖内の結合定数と鎖間の結合定数を同等に扱い、転移温度を求めるのがもう1つの近似方法である。

§ 4・2・2 平均場近似

まず、前者の近似方法により、各転移温度の表式を求める。そのために、第3章で求めた鎖が1本だけあるときの問題で、

$$g_1 = g_1^{\parallel} = g_1^{\perp}, \quad g_2 = g_2^{\parallel} = g_2^{\perp},$$

のときの相関関数 R の表式を次のように書き直す。

$$R = -\bar{R} / \pi v_F r, \quad \bar{R} = A \left(\frac{T}{T_{1D}} \right)^{-r}, \quad (4.22)$$

$$\tilde{g}_1 < 0 \text{ に対して} \quad \begin{cases} A = |\tilde{g}_1|^{-3/2}, \quad r = 3/2, \\ T_{1D} = D |\tilde{g}_1|^{1/2} \exp[-1/2 |\tilde{g}_1|], \end{cases} \quad (4.23)$$

$$\tilde{g}_1 > 0 \text{ に対して} \quad \begin{cases} A = 1, \quad r = |\tilde{g}_1 - 2\tilde{g}_2|, \\ T_{1D} = D. \end{cases} \quad (4.24)$$

ここで、 \bar{R} は、相関関数の $\ln T$ (T : 温度) に関する微分 (3.39) である。また、温度のべき指数は、裸の結合定数が

$$|\tilde{g}_1| \ll 1, \quad |\tilde{g}_2| \ll 1,$$

として、結合定数に関する最低次の項のみを記した。

鎖内の結合定数が、鎖間の結合定数によってはくりこまれないという仮定を用いて、(4.10) ~ (4.13) 式を、次のように書き直す。

$$\frac{\partial \tilde{J}_{cij}}{\partial \xi} = \tilde{J}'_{cij} \frac{\partial \ln \bar{N}_2^{1D}}{\partial \xi} + 2 \sum_{k \neq i, j} \tilde{J}'_{cik} \tilde{J}'_{ckj}, \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial \tilde{L}'_{Tij}}{\partial \xi} = \tilde{L}'_{Tij} \frac{\partial \ln \bar{\chi}_{T1D}}{\partial \xi} - \sum_{k \neq i, j} \tilde{L}'_{Tik} \tilde{L}'_{Tkj}, \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial \bar{K}'_{sij}}{\partial \xi} = \tilde{K}'_{sij} \frac{\partial \ln \bar{A}_{s1D}}{\partial \xi} + 2 \sum_{k \neq i, j} \tilde{K}'_{sik} \tilde{K}'_{skj}. \quad (4.27)$$

ただし、 N_2^{1D} 、 χ_{T1D} 、 A_{s1D} は、それぞれ純粋な1次元系における、 $2k_F$ -CDW, TSDW, SS のオーダー・パラメータの相関関数である。ここで、相関関数 LSDW, TS0, TS1 が現

われないのは、鎖間相互作用を

$$\tilde{J}_{cij} \equiv \tilde{J}_{1ij}^{\parallel} = \tilde{J}_{1ij}^{\perp}, \quad \text{および}, \quad \tilde{K}_{sij} \equiv \tilde{K}_{1ij}^{\perp} = \tilde{K}_{2ij}^{\perp},$$

ととったためである。

$$\tilde{J}_{Lij} \equiv \tilde{J}_{1ij}^{\parallel} = -\tilde{J}_{1ij}^{\perp},$$

ととれば、(4.25)式において、 N_2 のかわりに χ_L が現われる。また、

$$\tilde{K}_{T1ij} = -\tilde{K}_{1ij}^{\parallel} = \tilde{K}_{2ij}^{\parallel}, \quad \text{または}, \quad \tilde{K}_{T0ij} = -\tilde{K}_{1ij}^{\perp} = \tilde{K}_{2ij}^{\perp},$$

ととれば、(4.26)式において、 Δ_s のかわりに、それぞれ、 Δ_{T1} または Δ_{T0} が現われる。

以下の議論も、同様のおきかえが可能である。

(4.25)~(4.27)式を解くために、フーリエ変換、

$$\left. \begin{aligned} g_{ij}(\xi) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} g(\xi, \mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \\ g(\xi, \mathbf{q}) &= \sum_j g_{ij}(\xi) e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \end{aligned} \right\} \quad (i \neq j) \quad (4.28)$$

を導入する。ここで、 g_{ij} は任意の鎖間の結合定数を表わし、 N は鎖の本数、 \mathbf{R}_i は、 i 番目の鎖の位置を表わす。フーリエ変換(4.28)を用いて、(4.25)~(4.27)式の解を次のように得る。

$$\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q}) = \frac{\tilde{J}_c(0, \mathbf{q}) \bar{N}_2^{1D}(T)}{1 - 2\pi v_F \tilde{J}_c(0, \mathbf{q}) N_2^{1D}(T)}, \quad (4.29)$$

$$\tilde{L}_T(\xi, \mathbf{q}) = \frac{\tilde{L}_T(0, \mathbf{q}) \bar{\chi}_{T1D}(T)}{1 - 2\pi v_F \tilde{L}_T(0, \mathbf{q}) \chi_{T1D}(T)}, \quad (4.30)$$

$$\tilde{K}_s(\xi, \mathbf{q}) = \frac{\tilde{K}_s(0, \mathbf{q}) \bar{\Delta}_{s1D}(T)}{1 + 2\pi v_F \tilde{K}_s(0, \mathbf{q}) \Delta_{s1D}(T)}. \quad (4.31)$$

ただし、

$$\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q}), \quad \tilde{L}_T(\xi, \mathbf{q}), \quad \tilde{K}_s(\xi, \mathbf{q}),$$

は、それぞれ、

$$\tilde{J}_{cij}(\xi), \quad \tilde{L}_{Tij}(\xi), \quad \tilde{K}_{sij}(\xi),$$

のフーリエ変換である。

(4.22) 式を用いて, (4.29) ~ (4.31) 式の分母が零になる点から転移温度 T^{MF} を,

$$T_{\text{CDW}}^{\text{MF}} = T_{1\text{D}} \left[\frac{2A}{r} |\tilde{J}_c^0| \right]^{1/r}, \quad (4.32)$$

$$T_{\text{TSDW}}^{\text{MF}} = T_{1\text{D}} \left[\frac{2A}{r} |\tilde{L}_T^0| \right]^{1/r}, \quad (4.33)$$

$$T_{\text{SS}}^{\text{MF}} = T_{1\text{D}} \left[\frac{2A}{r} \tilde{K}_s^0 \right]^{1/r}, \quad (4.34)$$

と得る。ここで, \tilde{J}_c^0 , \tilde{K}_s^0 は, それぞれ, $\tilde{J}_c(0, \mathbf{q})$, $\tilde{K}_s(0, \mathbf{q})$, の最小値, \tilde{L}_T^0 は $\tilde{L}_T(0, \mathbf{q})$ の最大値であり, $\tilde{J}_c^0 < 0$, $\tilde{L}_T^0 > 0$, $\tilde{K}_s^0 < 0$, のときに, 上式の有限の転移温度を得ることができる。ただし, \tilde{J}_c^0 , \tilde{L}_T^0 , \tilde{K}_s^0 のこのような符号は, 元の結合定数 $\tilde{J}_{c_{ij}}$, $\tilde{L}_{T_{ij}}$, $\tilde{K}_{s_{ij}}$ の符号によって, \mathbf{q} が 0 か π のとき, とることが可能である。 $q=0$ のとき, 隣り合った鎖上の秩序は同位相であり, $q=\pi/a$ のとき, 位相が π だけずれる。 a は最近接鎖間の距離である。

§ 4.2.3 クロス・オーバー

つぎに, 転移温度近傍, すなわち, 図 4.3 の領域②を考慮に入れる。それには, まず, 領域②と③の間のクロス・オーバー温度を決めなければならない。クロス・オーバー温度は相関関数に対するリー方程式 (4.16), (4.18), (4.19) の右辺で, 鎖内の結合定数 g_{1i} , g_{2i} と, 鎖間の結合定数 (4.29) ~ (4.31) が, 同程度の寄与をする温度として決める。

$$2\tilde{g}'_{1i}(T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}) - \tilde{g}'_{2i}(T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}) = 2\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{Q})|_{T=T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}}, \quad (4.35)$$

$$\tilde{g}'_{2i}(T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}}) = \tilde{L}_T(\xi, \mathbf{Q})|_{T=T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}}}, \quad (4.36)$$

$$\tilde{g}'_1(T_{\text{SS}}^{\text{cro}}) + \tilde{g}'_2(T_{\text{SS}}^{\text{cro}}) = 2\tilde{K}_s(\xi, \mathbf{Q})|_{T=T_{\text{SS}}^{\text{cro}}}. \quad (4.37)$$

ただし,

$$T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}, T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}}, T_{\text{SS}}^{\text{cro}}$$

は各ゆらぎが成長するときのクロス・オーバー温度であり, \mathbf{Q} は, \tilde{K}_s と \tilde{J}_c が最小に, \tilde{L}_T が最大になるときの \mathbf{q} の値である。

(4.35) ~ (4.37) 式を T^{MF} を用いて,

$$T_{\text{CDW}}^{\text{cro}} = T_{\text{CDW}}^{\text{MF}} \left[\frac{r}{|2\tilde{g}'_{1i}(T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}) - \tilde{g}'_{2i}(T_{\text{CDW}}^{\text{cro}})|} + 1 \right]^{1/r} \quad (4.38)$$

$$T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}} = T_{\text{TSDW}}^{\text{MF}} \left[\frac{r}{2\tilde{g}'_{2i}(T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}})} + 1 \right]^{1/r} \quad (4.39)$$

$$T_{\text{SS}}^{\text{cro}} = T_{\text{SS}}^{\text{MF}} \left[\frac{r}{|\tilde{g}'_{1i}(T_{\text{SS}}^{\text{cro}}) + \tilde{g}'_{2i}(T_{\text{SS}}^{\text{cro}})|} + 1 \right]^{1/r} \quad (4.40)$$

と書き直す。このとき, \tilde{g}'_{1i} , \tilde{g}'_{2i} は鎖が 1 本だけのときのくりこみ群の方程式を用いて裸の結合定数で表わすことができるので, (4.38) ~ (4.40) 式で, 各クロス・オーバー温度が定まる。ただし,

$$2\tilde{g}'_{1i}(T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}) - \tilde{g}'_{2i}(T_{\text{CDW}}^{\text{cro}}) < 0, \quad \tilde{g}'_{2i}(T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}}) > 0,$$

$$\tilde{g}'_{1i}(T_{\text{SS}}^{\text{cro}}) + \tilde{g}'_{2i}(T_{\text{SS}}^{\text{cro}}) < 0,$$

のとき, 各クロス・オーバー温度が定まる。他のときは, 対応する 1 次元的相関が成長せず, また 3 次元的相関も発達しない。その結果, 1 次元的, および, 3 次元的相関が同程度に発達する温度, すなわち, クロス・オーバー温度は存在しない。

§ 4.2.4 相転移

クロス・オーバー温度以下の転移温度近傍 (図 4.3 の領域 ②) で,

$$\sum_j^N |\tilde{g}'_{ij}| \gg |\tilde{g}'_{ii}|,$$

を考慮に入れて転移温度を求め, 相関関数を計算する。このとき, リー方程式の右辺で, k に関する和のない項は, すべて落とすことができる。(4.8) ~ (4.13) 式をフーリエ変換し,

$$\xi_l = \ln(T/T_l^{\text{cro}}), \quad (l: J, L, \text{または} K, T_l^{\text{cro}} \text{は} J, L \text{または} K \text{に対応する各クロス・オーバー温度}),$$

を用いて, 次式を得る。

$$\frac{\partial \tilde{J}_c(\xi_J, \mathbf{q})}{\partial \xi_J} = 2\tilde{J}_c^2(\xi_J, \mathbf{q}), \quad (4.41)$$

$$\frac{\partial \tilde{L}_T(\xi_L, \mathbf{q})}{\partial \xi_L} = -\tilde{L}_T^2(\xi_L, \mathbf{q}), \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial \tilde{K}_s(\xi_K, \mathbf{q})}{\partial \xi_K} = -2\tilde{K}_s^2(\xi_K, \mathbf{q}). \quad (4.43)$$

(4.41)～(4.43)式は、クロス・オーバー温度以下でつくった方程式である。したがって、裸の結合定数は、 $T = T^{\text{cro}}$ での有効結合定数により与えられる。

(4.41)～(4.43)式は、容易に、

$$\tilde{J}_c(\xi_J, \mathbf{q}) = \frac{\tilde{J}_c(0, \mathbf{q})}{1 - 2\tilde{J}_c(0, \mathbf{q})\xi_J}, \quad (4.44)$$

$$\tilde{L}_T(\xi_L, \mathbf{q}) = \frac{\tilde{L}_T(0, \mathbf{q})}{1 + \tilde{L}_T(0, \mathbf{q})\xi_L}, \quad (4.45)$$

$$\tilde{K}_s(\xi_K, \mathbf{q}) = \frac{\tilde{K}_s(0, \mathbf{q})}{1 - 2\tilde{K}_s(0, \mathbf{q})\xi_K}, \quad (4.46)$$

と積分することができる。(4.44)～(4.46)式が発散する転移温度は、

$$T_{\text{CDW}} = T_{\text{CDW}}^{\text{cro}} \exp[-1/2|\tilde{J}_c(0, \mathbf{Q})|], \quad (4.47)$$

$$T_{\text{TSDW}} = T_{\text{TSDW}}^{\text{cro}} \exp[-1/\tilde{L}_T(0, \mathbf{Q})], \quad (4.48)$$

$$T_{\text{SS}} = T_{\text{SS}}^{\text{cro}} \exp[-1/2|\tilde{K}_s(0, \mathbf{Q})|], \quad (4.49)$$

となる。ここで、 Q は0または π/a である。

上の転移温度が、実際にそれぞれの相関関数が発散する温度になっていることを示す。^{2), 4)}

相関関数に対するフーリエ変換

$$R_{ij}(\xi) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} R(\xi, \mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (4.50)$$

を用い、転移温度の近傍(領域②)であることを考慮して、リー方程式(4.16), (4.18), (4.19)から、

$$\frac{\partial}{\partial \xi_J} \ln \bar{N}_2(\xi_J, \mathbf{q}) = 4 \tilde{J}_c(\xi_J, \mathbf{q}) \quad , \quad (4.51)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_L} \ln \bar{\chi}_T(\xi_L, \mathbf{q}) = -2 \tilde{L}_T(\xi_L, \mathbf{q}) \quad , \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_K} \ln \bar{A}_s(\xi_K, \mathbf{q}) = 4 \tilde{K}_s(\xi_K, \mathbf{q}) \quad , \quad (4.53)$$

を得る。これらの方程式を積分して、

$$N_2(\xi_J, \mathbf{q}) \sim [1 - 2 \xi_J \tilde{J}_c(0, \mathbf{q})]^{-1} \quad , \quad (4.54)$$

$$\chi_T(\xi_L, \mathbf{q}) \sim [1 + \xi_L \tilde{L}_T(0, \mathbf{q})]^{-1} \quad , \quad (4.55)$$

$$A_s(\xi_K, \mathbf{q}) \sim [1 - 2 \xi_K \tilde{K}_s(0, \mathbf{q})]^{-1} \quad , \quad (4.56)$$

となる。すなわち、 N_2 、 χ_T 、 A_s は、それぞれ、 $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ のとき、

$$T = T_{\text{CDW}}, T_{\text{TSDW}}, T_{\text{SS}},$$

で発散する。

温度領域②の大きさを考える。 $\tilde{g}_1 < 0$ の強結合領域では、

$$|\tilde{g}(0, \mathbf{q})| \sim O(1), \quad (\tilde{g}(0, \mathbf{q}) : \text{クロス・オーバー温度での鎖間の結合定数}),$$

なので、(4.47)～(4.49)より、温度領域 $T_c < T < T^{\text{cro}}$ 、(T_c : 転移温度)、が狭い。

$\tilde{g}_1 > 0$ の弱結合領域では、 $|\tilde{g}(0, \mathbf{q})| \ll 1$ 、であり、温度領域 $T_c < T < T^{\text{cro}}$ 、は広い。この温度領域②を考える有効性は、次節で述べるゆらぎ間の競争を考察するとき、特に現われる。

§ 4.3 2種類のゆらぎ間の競争

第3章で求めたスピンに依存したBGDモデルの基底状態の相図、図3・10(a)、(b)、からわかるように、鎖が1本だけの系では、 $T = 0$ で、いくつかのゆらぎが同時に発散する。これは、1次元系では、いくつかの秩序が共存し得ることを唆しているように見える。また、Machida et al.^{5), 6)} は、 $2k_F$ -CDWとSS、あるいは、SDWとSSが共存可能であることを主張した。しかし、1次元系では、フェルミ面が2点で与えられるため、2種類の秩序

に対応するエネルギー・ギャップがフェルミ面に共存することは考えにくい。

この問題を考察するには、まず、転移温度以上での、いくつかのゆらぎ間の競争の問題を考えなければならない。図4・3の温度領域①では、系は1次元的であり、鎖間相互作用は弱い。ここでは、第3章の議論を用いることができ、2～3種類のゆらぎが同時に成長することが可能である。温度が低下し、領域②になると、鎖内のゆらぎに対応したいくつかの鎖間相互作用が重要な働きをする。

この節では、温度領域②において、くりこみ群の方法を用いて、いくつかの種類のゆらぎ間の競争の問題を考察する。スピンに依存したBGDモデルの基底状態の相図、図3・10(a), (b), において、結合定数の領域XIを考える。この領域では、 $2k_F$ -CDWとSSの両方の相関関数が、 $T=0$ で同時に発散するが、 $2k_F$ -CDWの方が優勢である。したがって、温度領域②では、 $2k_F$ -CDWとSSに対応した2種類の鎖間相互作用が存在するが、 $2k_F$ -CDWの方が強い。

前節では、鎖間相互作用について、最低次までのリー方程式を用いたが、ゆらぎ間の競争を調べるには、鎖間相互作用について、第2発散項までのリー方程式を用いる必要がある。^{7), 8)} 前節と同様に、

$$J_{cij} = J_{1ij}^{\parallel} = J_{1ij}^{\perp}, \quad \text{および}, \quad K_{sij} = \tilde{K}_{1ij}^{\perp} = \tilde{K}_{2ij}^{\perp},$$

とおき、条件

$$\sum_j^N |\tilde{g}_{ij}| \gg |\tilde{g}_{ii}|,$$

を用いる。さらに、フーリエ変換(4・28)を用いて、第2発散項までで、次のリー方程式を得る。

$$\frac{\partial \tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q})}{\partial \xi} = 2\tilde{J}_c^2(\xi, \mathbf{q}) + 2\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q}) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'} \{\tilde{J}_c^2(\xi, \mathbf{q}') + \tilde{K}_s^2(\xi, \mathbf{q}')\}, \quad (4\cdot57)$$

$$\frac{\partial \tilde{K}_s(\xi, \mathbf{q})}{\partial \xi} = 2\tilde{K}_s^2(\xi, \mathbf{q}) + 2\tilde{K}_s(\xi, \mathbf{q}) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'} \{\tilde{J}_c^2(\xi, \mathbf{q}') + \tilde{K}_s^2(\xi, \mathbf{q}')\}, \quad (4\cdot58)$$

鎖間相互作用 $\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q})$, $\tilde{K}_s(\xi, \mathbf{q})$, の鎖に垂直方向の強さが、遮蔽されたクーロン型の

とき、上の2つの方程式を解くことにより、次の結果が得られる(詳細は参考文献8)。

- (1) $\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q})$ が発散するCDWの転移温度で、SSのゆらぎに対応した鎖間相互作用 $\tilde{K}_s(\xi, \mathbf{q})$ は消える。
- (2) SSの鎖間相互作用により、 $2k_F$ -CDWの転移温度が、特別の場合を除き、下げられる。この特別な場合は、SSの鎖間相互作用が、遮蔽されないクーロン型るときである。
- (3) $\tilde{J}_c(\xi, \mathbf{q})$ の遮蔽が弱くなると、転移温度は上がり、遮蔽が強くなると、転移温度が下がる。

以上の、 $2k_F$ -CDWがSSより優勢であるときの結果は、SSが優勢の場合も、 $2k_F$ -CDWとSSを交換するだけで、全く同じである。また、他の種類のゆらぎ間にも、類似の競争関係が成り立つ。すなわち、TSDWと $2k_F$ -CDWまたはLSDWの間、TSDWとTS1の間、LSDWとTS0の間、TS1とSSまたはTS0の間に競争が生じる。ただし、前節で述べたように、それぞれのゆらぎに対応した鎖間相互作用($2k_F$ -CDWに対し \tilde{J}_{cij} 、LSDWに対し \tilde{J}_{Lij} 、SSに対し \tilde{K}_{sij} 、TS0に対し \tilde{K}_{T0ij})が、

$$\tilde{J}_{cij}(\tilde{J}_{Lij}) \equiv \tilde{J}_{ij} = (-)\tilde{J}_{ij}^{\perp},$$

$$\tilde{K}_{sij}(\tilde{K}_{T0ij}) \equiv (-)\tilde{K}_{ij}^{\perp} = \tilde{K}_{2ij}^{\perp},$$

で与えられるため、 $2k_F$ -CDWとLSDW、SSとTS0の間に競争は生じない。また、前章の相図、図3・10からわかるように、同時に成長する他の種類のゆらぎの組み合わせはないので、上に述べたもの以外の競争を考える必要はない。

§4・4 準1次元電子系の秩序状態^{7),9)}

この節では、転移温度以下、すなわち、図4・3の領域③を考察する。前節で述べたように、転移温度で鎖間相互作用は、1種類のものだけになる。そこで、ボゾン表示の方法を用い鎖間相互作用に平均場近似を適用して、秩序状態を考察する。

§4・4・1 鎖間相互作用の位相ハミルトニアン

§4・2で考察したように、 $2k_F$ -CDWの秩序形成に重要な働きをする鎖間相互作用の結合定数は、

$$J_{cij} = J_{ij}^{\parallel} = J_{ij}^{\perp},$$

である。そこで、この相互作用ハミルトニアンをボゾン表示する。

ハミルトニアン

$$H_{\text{CDW}} = \frac{1}{L} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} J_{cij} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \alpha, \beta}} (\delta_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha, -\beta}) \\ \times a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{j, k_2-q, \beta}^\dagger a_{j k_2 \beta} b_{i k_1 \alpha}, \quad (4.59)$$

は、場の演算子を用いて、

$$H_{\text{CDW}} = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} J_{cij} \int dx (\psi_{j2\uparrow}^\dagger \psi_{j1\uparrow} + \psi_{j2\downarrow}^\dagger \psi_{j1\downarrow}) \\ \cdot (\psi_{i1\uparrow}^\dagger \psi_{i2\uparrow} + \psi_{i1\downarrow}^\dagger \psi_{i2\downarrow}) \quad (4.60)$$

と書き直すことができる。このハミルトニアンは、 i 番目の鎖と j 番目の鎖の上の $2k_F$ -CDW のオーダー・パラメータの相関を表わしている。(4.60) 式を、フェルミオンの場の演算子のボゾン表示(3.72)を用いて位相表示すると、

$$H_{\text{CDW}} = \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i \neq j}} \frac{J_{ij}^c}{2\pi^2 \alpha_0^2} \int dx \cos [\theta_+(j, x) - \theta_+(i, x)] \\ \times \cos \phi_+(j, x) \cos \phi_+(i, x), \quad (4.61)$$

となる。ここで、 $J_{ij}^c \equiv 4 J_{cij}$ であり、 $\langle i, j \rangle$ は、 i 番目の鎖と j 番目の鎖の対に関して和をとることを表わしている。

LSDW の秩序形成に重要な働きをする鎖間相互作用の結合定数は、 $J_{Lij} \equiv J_{1ij}^{\parallel} = J_{1ij}^{\perp}$,

であるから、 $2k_F$ -CDW のときと同様に、この相互作用ハミルトニアンは、

$$H_{\text{LSDW}} = \frac{1}{L} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} J_{Lij} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \alpha, \beta}} (\delta_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha, -\beta}) \\ \times a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{j, k_2-q, \beta}^\dagger a_{j k_2 \beta} b_{i k_1 \alpha} \\ = \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i \neq j}} \frac{J_{ij}^L}{2\pi^2 \alpha_0^2} \int dx \cos [\theta_+(j, x) - \theta_+(i, x)] \\ \times \sin \phi_+(j, x) \sin \phi_+(i, x), \quad (4.62)$$

となる。ここで、 $J_{ij}^L \equiv 4 J_{Lij}$ ，である。このハミルトニアンは、それぞれの鎖上の LSDW のオーダー・パラメータの相関を表わしている。

SS に対しては、結合定数を、 $K_{sij} \equiv K_{1ij}^\perp = K_{2ij}^\perp$ ，ととればよいから、相互ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
 H_{SS} &= \frac{1}{L} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} K_{sij} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \alpha}} \{ a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, -\alpha}^\dagger a_{j, k_2, -\alpha} b_{j, k_1, \alpha} \\ &\quad - a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, -\alpha}^\dagger a_{j, k_1, \alpha} b_{j, k_2, -\alpha} \} \\
 &= \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ i \neq j}} \frac{K_{ij}^s}{2\pi^2 \alpha_0^2} \int dx \cos [\theta_-(j, x) - \theta_-(i, x)] \\
 &\quad \times \cos \phi_+(j, x) \cos \phi_+(i, x), \tag{4.63}
 \end{aligned}$$

となる。ここで、 $K_{ij}^s \equiv 4 K_{sij}$ ，であり、このハミルトニアンは、それぞれの鎖上の SS のオーダー・パラメータの相関を表わしている。

TS 0 に対しては、結合定数を、 $K_{T0ij} \equiv -K_{1ij}^\perp = K_{2ij}^\perp$ ，ととればよいから、相互作用ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
 H_{TS0} &= -\frac{1}{L} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} K_{T0ij} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \alpha}} \{ a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, -\alpha}^\dagger a_{j, k_2, -\alpha} b_{j, k_1, \alpha} \\ &\quad + a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, -\alpha}^\dagger a_{j, k_1, \alpha} b_{j, k_2, -\alpha} \} \\
 &= \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ i \neq j}} \frac{K_{ij}^{T0}}{2\pi^2 \alpha_0^2} \int dx \cos [\theta_-(j, x) - \theta_-(i, x)] \\
 &\quad \times \sin \phi_+(j, x) \sin \phi_+(i, x), \tag{4.64}
 \end{aligned}$$

である。ここで、 $K_{ij}^{T0} \equiv 4 K_{T0ij}$ ，であり、このハミルトニアンは、 i 番目と j 番目の鎖の上のオーダー・パラメータの相関を表わしている。

TS 1 に対しては、結合定数を、 $K_{T1ij} \equiv -K_{1ij}^\parallel = K_{2ij}^\parallel$ ，ととればよいから、相互作用ハミルトニアンは、

$$H_{TS1} = -\frac{1}{L} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} K_{T1ij} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \alpha}} \{ a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, \alpha}^\dagger a_{j, k_2, \alpha} b_{j, k_1, \alpha}$$

$$+ a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{i, k_2-q, \alpha}^\dagger a_{j k_1 \alpha} b_{j k_2 \beta} \}, \quad (4.65)$$

である。上式右辺の第1項と第2項は、電子間の momentum transfer を無視するかぎり、同じものである。さらに、(4.64)式は、

$$H_{TS1} = \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ i \neq j}} \frac{K_{ij}^{T1}}{2\pi^2 \alpha_0^2} \int dx \cos [\theta_-(j, x) - \theta_-(i, x)] \\ \times \cos \phi_-(j, x) \cos \phi_-(i, x), \quad (4.66)$$

となる。ここで、 $K_{ij}^{T1} \equiv 4 K_{T1ij}$ 、であり、このハミルトニアンは、 i 番目と j 番目の鎖上のTS1のオーダー・パラメータの相関を表わしている。

TSDWに対しては、多少異なる。結合定数は、 $L_{Tij} \equiv L_{2ij}^\perp$ 、ととればよいから、相互作用ハミルトニアンは、

$$H_{TSDW} = -\frac{1}{L} \sum_{\substack{i, j \\ i \neq j}} L_{Tij} \sum_{\substack{k_1, k_2, q \\ \alpha}} a_{i, k_1+q, \alpha}^\dagger b_{j, k_2-q, -\alpha}^\dagger a_{j k_2 \alpha} b_{i k_1, -\alpha} \\ = \sum_{\substack{\langle i, j \rangle \\ i \neq j}} \frac{L_{ij}^T}{2\pi^2 \alpha_0^2} \int dx \cos [\theta_+(j, x) - \theta_+(i, x)] \\ \times \cos [\phi_-(j, x) - \phi_-(i, x)], \quad (4.67)$$

となる。ここで、 $L_{ij}^T \equiv -2 L_{Tij}$ 、である。このハミルトニアンは、 i 番目と j 番目の鎖上のオーダー・パラメータの相関と一致しない。これは、これは、オーダー・パラメータの相関をつくると、その中に、スピンの保存しない相互作用項が含まれるためである。しかし、この違いは、以下の平均場近似を考えると、ほとんど影響ない。

§ 4.4.2 領域 XI での平均場近似

スピンに依存したBGDモデルの基底状態の相図、図3・10の領域XIを考える。この領域では、 $2k_F$ -CDWとSSのオーダー・パラメータの相関関数が、 $T \rightarrow 0$ で共に発散するが、 $2k_F$ -CDWの方が優勢である。前節で述べたことから、転移温度以下では、鎖間相互作用としては、 $2k_F$ -CDWに関係したものだけが存在する。そこで、 H_{CDW} を平均場近似で次のように変形する。

$$H_{\text{CDW}}^{\text{MF}} = \frac{4v_{\text{F}} \tilde{J}^c \Delta_{\text{J}}}{\pi \alpha_0^2} \int dx \cos \theta_+(x) \cos \phi_+(x), \quad (4.68)$$

$$\Delta_{\text{J}} \equiv \langle \cos \theta_+ \rangle_{H_{\text{T}}} \langle \cos \phi_+ \rangle_{H_{\text{T}}},$$

$$\tilde{J}^c \equiv J_{ij}^c / 2\pi v_{\text{F}},$$

$$H_{\text{T}} = H_{\rho} + H_{\sigma} + H_{\text{CDW}}^{\text{MF}}.$$

ここで、相互作用を最近接鎖間に限定し、最近接鎖の数を4として、それらの間の相互作用はすべて等しいとした。

§ 4.4.3 SCHA での相関関数の計算

以下では、SCHA を全ハミルトニアン

$$H_{\text{T}} = H_{\rho} + H_{\sigma} + H_{\text{CDW}}^{\text{MF}},$$

の非調和項すべてに適用して、 $2k_{\text{F}}$ -CDW, SS, LSDW の相関関数を計算する。⁹⁾ 位相 θ_+ と ϕ_+ の非調和項に対する SCHA は、次式によって与えられる。

$$\begin{aligned} \tilde{J}^c \cos \theta_+ &\approx -|\tilde{J}^c| \exp\left[-\frac{1}{2} \langle \theta_+'^2 \rangle_H\right] \\ &\quad \times \left\{1 + \frac{1}{2} \langle \theta_+'^2 \rangle_H - \frac{1}{2} \theta_+'^2\right\}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

$$\theta_+' = \begin{cases} \theta_+ - \pi, & \tilde{J}^c > 0, \\ \theta_+, & \tilde{J}^c < 0, \end{cases} \quad (4.70)$$

$$\begin{aligned} \tilde{g}_1^{\perp} \cos 2\phi_+ &\approx -|\tilde{g}_1^{\perp}| \exp\left[-2 \langle \phi_+^2 \rangle_H\right] \\ &\quad \times \left\{1 + 2 \langle \phi_+^2 \rangle_H - 2 \phi_+^2\right\} \end{aligned} \quad (4.71)$$

$$\cos \phi_+ \approx \exp\left[-\frac{1}{2} \langle \phi_+^2 \rangle_H\right] \left\{1 + \frac{1}{2} \langle \phi_+^2 \rangle_H - \frac{1}{2} \phi_+^2\right\}. \quad (4.72)$$

ここで、相図、図 3・10 の領域 XI を考えたので、 $\tilde{g}_1^\perp < 0$ 、である。(4・69)～(4・72) 式を用いて、全ハミルトニアン、

$$H_T^S = H_\rho^S + H_\sigma^S \quad (4\cdot73)$$

$$H_\rho^S = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{\alpha}) \left\{ \left(\frac{\partial \theta'_+}{\partial x} \right)^2 + q_\rho^2 \theta'^2_+(x) \right\} + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_-}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \quad (4\cdot74)$$

$$H_\sigma^S = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1^\parallel) \left\{ \left(\frac{\partial \phi_+}{\partial x} \right)^2 + q_\sigma^2 \phi^2_+(x) \right\} + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{g}_1^\parallel) \left(\frac{\partial \phi_-}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \quad (4\cdot75)$$

$$q_\rho^2 = \frac{8 |\tilde{J}^c| A_J^S}{(1 - \tilde{\alpha}) \alpha_0^2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\langle \theta'^2_+ \rangle_{H_\rho^S} + \langle \phi^2_+ \rangle_{H_\sigma^S}) \right], \quad (4\cdot76)$$

$$q_\sigma^2 = \frac{8 |\tilde{g}_1^\perp|}{(1 - \tilde{g}_1^\parallel) \alpha_0^2} \exp \left[-2 \langle \phi^2_+ \rangle_{H_\sigma^S} \right] + \frac{8 |\tilde{J}^c| A_J^S}{(1 - \tilde{g}_1^\parallel) \alpha_0^2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\langle \theta'^2_+ \rangle_{H_\rho^S} + \langle \phi^2_+ \rangle_{H_\sigma^S}) \right], \quad (4\cdot77)$$

$$A_J^S = \langle \cos \theta'_+ \rangle_{H_\rho^S} \langle \cos \phi_+ \rangle_{H_\sigma^S}. \quad (4\cdot78)$$

ここで、 $2k_F$ -CDW 転移温度以下では、 θ_+ と ϕ_+ のゆらぎは小さいので、(4・76) 式、(4・77) 式から、 $q_\rho \approx 0$ 、 $q_\sigma \approx 0$ 、である。

ハミルトニアン H_T^S がハーモニックであるから、前章の議論と同様にして、 $2k_F$ -CDW、SS、LSDW の相関関数を、次のように書くことができる。

$$N_2(x, \tau) = \frac{1}{2\pi^2 \alpha_0^2} [E_{+,-}^S(x, \tau) + E_{+,+}^S(x, \tau)] D_{+,-}^S(x, \tau) e^{i2k_F x}, \quad (4\cdot79)$$

$$A_S(x, \tau) = \frac{1}{2\pi^2 \alpha_0^2} [E_{+,-}^S(x, \tau) + E_{+,+}^S(x, \tau)] D_{-,-}^S(x, \tau), \quad (4.80)$$

$$\begin{aligned} \chi_L(x, \tau) &= \frac{1}{2\pi^2 \alpha_0^2} [E_{+,-}^S(x, \tau) - E_{+,+}^S(x, \tau)] \\ &\quad \times D_{+,-}^S(x, \tau) e^{i2k_F x}, \end{aligned} \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned} D_{+,-}^S(x, \tau) &\equiv \langle T_\tau \exp [i \theta'_+(x, \tau)] \exp [-i \theta'_+(0, 0)] \rangle_{H_\rho^S} \\ &= \exp \left[T \sum_n \int d k \frac{v_F (1 + \tilde{\alpha})}{\omega_n^2 + \alpha_\rho^2 (k^2 + q_\rho^2)} (e^{i k x + i \omega_n \tau} - 1) \right], \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned} D_{-,-}^S(x, \tau) &\equiv \langle T_\tau \exp [i \theta_-(x, \tau)] \exp [-i \theta_-(0, 0)] \rangle_{H_\rho^S} \\ &= \exp \left[T \sum_n \int d k \frac{v_F (1 - \tilde{\alpha}) (1 + q_\rho^2 / k^2)}{\omega_n^2 + \alpha_\rho^2 (k^2 + q_\rho^2)} \right. \\ &\quad \left. \times (e^{i k x + i \omega_n \tau} - 1) \right], \end{aligned} \quad (4.83)$$

$$\begin{aligned} E_{+,\mp}^S(x, \tau) &\equiv \langle T_\tau \exp [i \phi_\pm(x, \tau)] \exp [\mp i \phi_\pm(0, 0)] \rangle_{H_\sigma^S} \\ &= \exp \left[T \sum_n \int d k \frac{v_F (1 + \tilde{g}_1^\parallel)}{\omega_n^2 + \alpha_\sigma^2 (k^2 + q_\sigma^2)} (\pm e^{i k x + i \omega_n \tau} - 1) \right] \end{aligned} \quad (4.84)$$

$$\alpha_\rho^2 \equiv v_F^2 (1 - \tilde{\alpha}^2), \quad \alpha_\sigma^2 \equiv v_F^2 (1 - \tilde{g}_1^{\parallel 2}), \quad \omega_n = 2\pi n T.$$

上の相関関数において、指数関数の肩の和と積分が発散するかどうか重要である。発散は和の $n=0$ の項、および、運動量積分の下限から起こり、大きな n の項、および、積分の上限からは発散は生じない。(4.82)式と(4.84)式において、指数関数の肩の被積分関数は、 $q_\rho \neq 0$ 、 $q_\sigma \neq 0$ 、のために、 $n=0$ 、 $k=0$ 、で有限である。従って、(4.82)式と(4.84)式の値は零ではなく、 $x, \tau \rightarrow \infty$ の極限においてさえ、 $N_2(x, \tau)$ は有限となる。これは、 $2k_F$ -CDWの長距離秩序が存在することを示す。このことは、 $A_J \neq 0$ 、を考えたので、当然の結果である。(4.83)式において、指数関数の肩の積分は、項 q_ρ^2/k^2 が存在するために、 $\tau \neq 0$ のとき、 $-\infty$ に発散する。 $\tau=0$ のとき、項 q_ρ^2/k^2 による発散は、項 $[e^{i k x} - 1]$

が掛けられることによって除かれる。そこで、任意の x に対して、 $\tau \neq 0$ のとき、 $D_{-,-}^S(x, \tau) = 0$ 、である。したがって、 $E_{+,\mp}^S(x, \tau)$ が有限なので、任意の 2 点間の SS のオーダー・パラメータの相関関数は零である。さらに、 $\chi_L(x, \tau)$ のふるまいは附録 4-C での考察から、次のようになる。有限距離はなれた $\chi_L(x, \tau)$ は零にならず生き残るが、そのフーリエ変換は $k = 2k_F$ 、 $\omega = 0$ 、において発散しない。すなわち、長距離秩序はできない。

他の有限距離はなれた相関関数は、 $q_\rho \neq 0$ 、 $q_\sigma \neq 0$ 、であるかぎり、すべて零である。相図、図 3・10 の $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ に制限された領域 XII では、 $2k_F$ -CDW と SS をおきかえることにより、上と同様の結果を得ることができる。また、 $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ に制限された領域 VII と VIII でも、 $2k_F$ -CDW と SS を、それぞれ、LSDW と TSO におきかえることにより、同様の結果を得る。

§ 4・4・4 弱結合領域

つぎに、弱結合領域

$$\tilde{g}_1^{\parallel} > |\tilde{g}_1^{\perp}|$$

における秩序状態を研究する。後方散乱の結合定数 \tilde{g}_1^{\parallel} と \tilde{g}_1^{\perp} に、有効結合定数として、くりこみ群の固定点の値

$$\tilde{g}_1^{\parallel*} = (\tilde{g}_1^{\parallel 2} - \tilde{g}_1^{\perp 2})^{1/2} \text{ と } \tilde{g}_1^{\perp*} = 0$$

を、それぞれ、用いる。こうして、スピン密度演算子により表わされるハミルトニアン H_σ のかわりに、有効ハミルトニアン

$$H_\sigma^* = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{g}_1^{\parallel*}) \left(\frac{\partial \phi_+}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{g}_1^{\parallel*}) \left(\frac{\partial \phi_-}{\partial x} \right)^2 \right] dx, \quad (3 \cdot 170)$$

を用いることにより、上の強結合領域の場合と同様の考察を行なう。結果は次のとうりである。弱結合領域のすべて I ~ VI において、最も有勢なゆらぎの長距離秩序ができると、他のゆらぎの相関関数は、例外なしに零となる。領域

$$0 < \tilde{g}_1^{\parallel} < |\tilde{g}_1^{\perp}|$$

は、くりこみ群の方法と SCHA の方法で一致していないところであり、ここでは考察しない。

以上の結果⁹⁾は、 $2k_F$ -CDW と SS だけの競争について、鎖間相互作用が長距離型のモデルを用いて考察した Seidel-Prigodin⁷⁾のものと、一致している。また、Macida et al.^{5),6)}

では、丸味をもったフェルミ面を念頭においているので、完全に1次元のフェルミ面を用いた上の議論と、必ずしも相反するものではない。

§ 4・5 $4k_F$ -CDW 相関関数とウムクラップ散乱, 電気伝導度

§ 4・5・1 $4k_F$ -CDW

この節では、まず、 $4k_F$ -CDW の相関関数について述べる。これまで述べてきた CDW は $2k_F$ のものである。 $4k_F$ -CDW も実験的に、いろいろ観測されている。¹⁰⁾ また、理論的に $4k_F$ -CDW の重要性をはじめに指摘したのは、Emery¹¹⁾ である。

$4k_F$ -CDW のオーダー・パラメータは、次式で与えられる。

$$O_4 = \psi_{1\uparrow}^\dagger \psi_{1\downarrow}^\dagger \psi_{2\downarrow} \psi_{2\uparrow} + \psi_{2\uparrow}^\dagger \psi_{2\downarrow}^\dagger \psi_{1\downarrow} \psi_{1\uparrow}。 \quad (4\cdot85)$$

これより、 $4k_F$ -CDW 相関関数は、ボゾン表示(3・72)を用いて、位相 θ_+ によって、

$$N_4(x, \tau) = \frac{4}{(2\pi\alpha_0)^2} \langle T_\tau \cos 2\theta_+(x, \tau) \cos 2\theta_+(0, 0) \rangle_H, \quad (4\cdot86)$$

と表わされる。ここで、 $N_4(x, \tau)$ が、電荷密度演算子による位相 θ_+ のみで表わされ、スピン密度演算子による位相 ϕ_\pm に依存しないことは、注意すべきである。いま、ハミルトニアンがハーモニックな場合を考えると、(4・86)式は、

$$\begin{aligned} N_4(x, \tau) = & \frac{2}{(2\pi\alpha_0)^2} \{ \exp [4 \langle T_\tau \theta_+(x, \tau) \theta_+(0, 0) \rangle_H \\ & - 4 \langle \theta_+^2(0, 0) \rangle_H] + 2 \exp [- 4 \langle T_\tau \theta_+(x, \tau) \\ & \times \theta_+(0, 0) \rangle_H - 4 \langle \theta_+^2(0, 0) \rangle_H], \end{aligned} \quad (4\cdot87)$$

となる。

第3章、または、前節の議論と同様にして、(4・87)式から次の結果を得る。(4・74)式のように、 θ_+ に関するハミルトニアンにエネルギー・ギャップがあるとき、 $x, \tau \rightarrow \infty$ で、 $N_4(x, \tau)$ は有限となり、 $4k_F$ -CDWの長距離秩序が存在する。エネルギー・ギャップがないとき、BGDモデルのハミルトニアンの電荷密度部分 H_ρ ((3・82)式)を用いると、

$$N_4(4k_F, 0) \sim T^{4\eta_+ - 2}, \quad (4\cdot88)$$

となる。¹¹⁾ ここで、 $N_4(4k_F + k, \omega)$ は $N_4(x, \tau)$ のフーリエ変換である。また、BGDモ

デルについて、ボゾン表示の方法を用いることなく、くりこみ群の方法によると、

$$N_4(4k_F, 0) \sim T^{2+4\tilde{\alpha}} \quad (4.89)$$

が得られる。¹²⁾ (4.89) 式の結果は、くりこみ群の方法を用いているため、 $\tilde{\alpha} \ll 1$ のときは正しいが、 $|\tilde{\alpha}|$ の値が大きくなると、正しくなくなる。実際、(4.88) 式と(4.89)式の温度の指数は、 $T \rightarrow 0$ のときは一致するが、 $N_4(4k_F, 0)$ が発散するかどうかの境界値は異なる。 $|\tilde{\alpha}|$ の値が大きいときは、ボゾン表示の方法による結果の方が信用できる。そこで、 $4k_F$ -CDW に対しては(4.88) 式を用い、 $|\tilde{g}_1^\perp| \ll 1$ のときの BGD モデルの基底状態の相図を描いたのが、図 4.4 である。この図からわかるように、 \tilde{g}_2 が正で 1 に近いとき、すなわち、

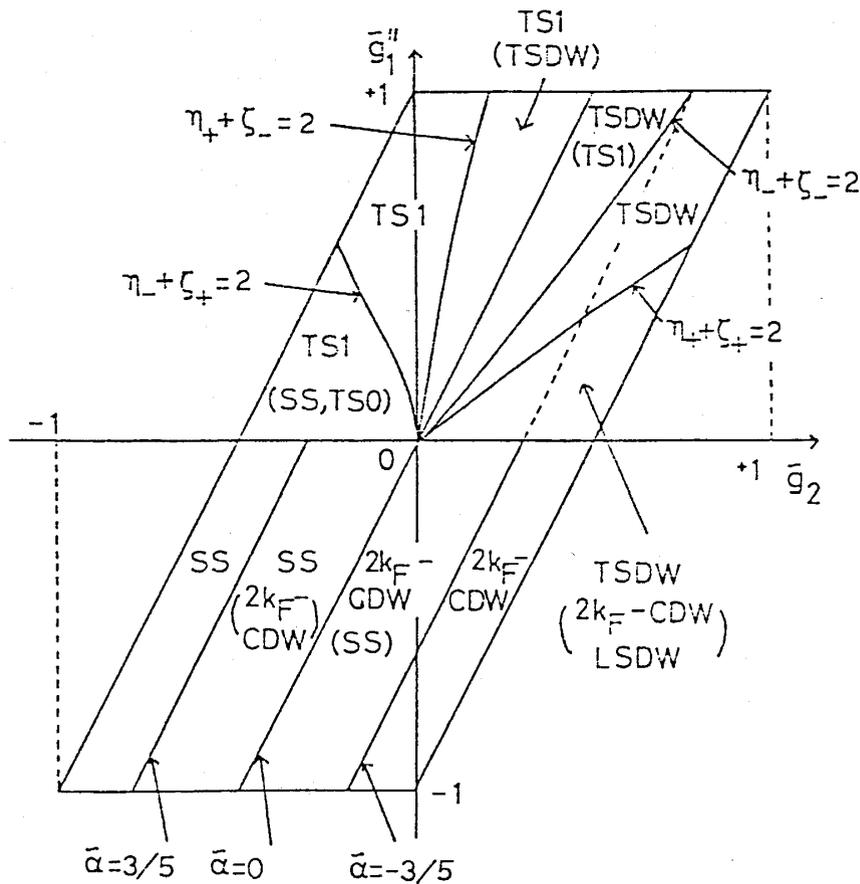


図 4.4 : BGD モデルの $|\tilde{g}_1^\perp| \ll 1$, $\tilde{g}_1^\perp < 0$ のときの基底状態の相図。

$\eta_\pm = [(1 \pm \tilde{\alpha}) / (1 \mp \tilde{\alpha})]^{1/2}$, $\zeta_\pm = [(1 \pm \tilde{g}_1^\parallel) / (1 \mp \tilde{g}_1^\parallel)]^{1/2}$,
 である。このとき、何の長距離秩序も存在せず、各領域で、図中に示したゆらぎの相関関数が、絶対零度で発散する。() 内に示したゆらぎは劣性なものである。領域 $-1 < \tilde{\alpha} < -3/5$ では、 $4k_F$ -CDW の相関関数も、絶対零度で発散する。ボゾン表示された位相ハミルトニアンが有効な領域、 $|\tilde{\alpha}| < 1$, $|\tilde{g}_1^\perp| < 1$, を考察の対象とする。

電子間のクーロン斥力が強いとき、 $4k_F$ -CDW の不安定性が生じる。

§ 4・5・2 ウムクラップ散乱

つぎに、 $4k_F$ -CDW に密接に関係したウムクラップ散乱について考察する。伝導電子のバンドが、ちょうど半分満たされているとき、あるいは、波数 $4k_F$ の周期ポテンシャルがあるとき、電子間に2体の相互作用としてのウムクラップ散乱が生じる。ウムクラップ散乱のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H_U = (g_3^\perp / 2) \sum_\alpha \int dx \{ \psi_{1\alpha}^\dagger(x) \psi_{1,-\alpha}^\dagger(x) \psi_{2,-\alpha}(x) \psi_{2\alpha}(x) - \text{h. c.} \}. \quad (4.90)$$

このハミルトニアンに、ボゾン表示(3.72)を用い、BGDモデルの H_ρ を加えると、

$$H_\rho^U = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 \mp \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_+}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F}{4\pi} (1 \pm \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_-}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F \tilde{g}_3^\perp}{\pi \alpha_0^2} \cos 2\theta_+(x) \right], \quad (4.91)$$

となる。¹³⁾ このハミルトニアンは、 θ_\pm を ϕ_\pm へ、 $\tilde{\alpha}$ を \tilde{g}_1^\parallel へおきかえると、BGDモデルのスピンドensity部分 H_ρ と同形となる。したがって、 $|\tilde{g}_3^\perp| \ll 1$ のとき、 H_ρ^U の非調和項にSCHAを用いると、 $\tilde{\alpha} < 0$ では H_ρ^U にエネルギー・ギャップが生じ、 $\tilde{\alpha} > 0$ では生じないことがわかる。すなわち、 $\tilde{\alpha} < 0$ で $4k_F$ -CDW の長距離秩序が形成され、 $\tilde{\alpha} > 0$ では、 $4k_F$ -CDW の不安定性は生じない。これらより、

$$|\tilde{g}_1^\perp| \ll 1, \quad |\tilde{g}_3^\perp| \ll 1,$$

のときの基底状態の相図を、図4・5に示す。

以上の考察より、 $4k_F$ -CDW について、次のことがわかる。 $4k_F$ -CDW と $2k_F$ -CDW、TSDW、LSDW との間に競争は生じることなく、 $4k_F$ -CDW と $2k_F$ -CDW、あるいは $4k_F$ -CDW と TSDW などは共存する。また、 $2k_F$ -CDW、TSDW、LSDW などの長距離秩序ができると、必ず $4k_F$ -CDW の長距離秩序もできる。逆に、 $2k_F$ -CDW、TSDW、LSDW などの長距離秩序ができていなくても、 $4k_F$ -CDW の長距離秩序が形成されることがある。SS、TS1、TS0 とは共存せず、これらの長距離秩序ができると、 $2k_F$ -CDW などと共に、 $4k_F$ -CDW のゆらぎも消える。

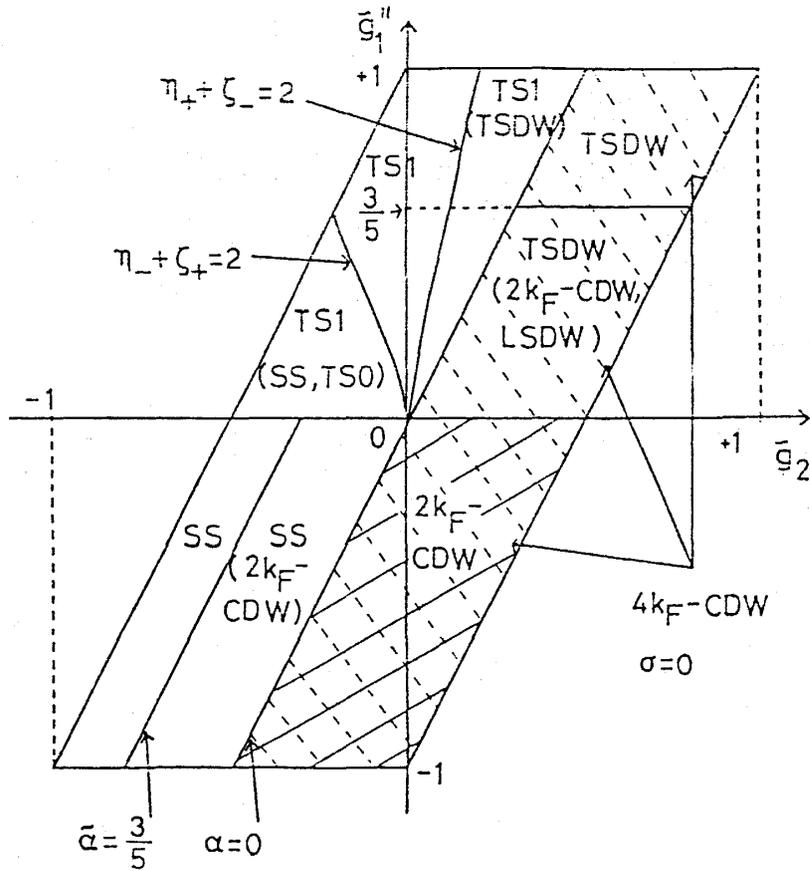


図4・5：非常に弱いウムクラップ散乱 $|\tilde{g}_3^\perp| \ll 1, \tilde{g}_3^\perp < 0$, を含むスピンの依存したBGDモデル ($|\tilde{g}_1^\perp| \ll 1, \tilde{g}_1^\perp < 0$) の基底状態の相図。実斜線と破斜線を引いた領域では、 $2k_F$ -CDWと $4k_F$ -CDWの長距離秩序が存在し、破斜線のみを引いた領域では、 $4k_F$ -CDWだけの長距離秩序が存在する。他の領域では、何の長距離秩序も存在しない。また各領域で、図中に示されたゆらぎの相関関数が絶対零度で発散する。 $4k_F$ -CDWの長距離秩序が形成されている領域では、系は絶縁体であり、電気伝導度は $\sigma = 0$ である。他の領域は完全導体であり $\sigma = \infty$ である。

§4・5・3 電気伝導度

最後に、電気伝導度について考察する。電気伝導度は、線形応答の久保公式から、

$$\sigma(\omega) = -\{Q^R(0, \omega) - Q^R(0, 0)\} / i\omega, \tag{4.92}$$

$$Q^R(k, \omega) = Q(k, i\omega_n) |_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+}, \tag{4.93}$$

によって与えられる。ここで、 $Q(k, i\omega_n)$ は、電流-電流応答関数

$$Q(x, \tau) = -\langle T_\tau j(x, \tau) j(0, 0) \rangle_H, \quad (4.94)$$

のフーリエ変換である。電流密度 $j(x, it)$ は、電荷密度演算子

$$\begin{aligned} \rho(x, \tau) &= e \sum_{i, \alpha} \psi_{i\alpha}^\dagger(x, \tau) \psi_{i\alpha}(x, \tau) \\ &= \frac{e}{\pi} \frac{\partial \theta_+(x, \tau)}{\partial x}, \end{aligned} \quad (4.95)$$

から、連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, it) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, it) = 0 \quad (4.96)$$

を満足するように決める。ただし、 $\tau = it$ である。 $\rho(x, \tau)$ の運動方程式を H_ρ ((3.82) 式) より求めることにより、 $j(x, \tau)$ を次のように得る。

$$\begin{aligned} j(x, \tau) &= -2e v_F (1 + \tilde{\alpha}) P_+(x, \tau) \\ &= \frac{e v_F}{\pi} (1 + \tilde{\alpha}) \frac{\partial \theta_-(x, \tau)}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4.97)$$

ここで、係数 $(1 + \tilde{\alpha})$ は、相互作用項を含む H_ρ を用いて、 $\rho(x, \tau)$ から $j(x, \tau)$ を求めたために付いた。自由粒子に対する電流の表式は、

$$\begin{aligned} j'(x, \tau) &= e v_F \sum_\alpha [\psi_{1\alpha}^\dagger \psi_{1\alpha} - \psi_{2\alpha}^\dagger \psi_{2\alpha}] \\ &= \frac{e v_F}{\pi} \frac{\partial \theta_-(x, \tau)}{\partial x}, \end{aligned} \quad (4.98)$$

となる。この $j'(x, \tau)$ は、 H_ρ を用いると、連続の方程式 (4.96) を満足しない。

$j(x, \tau)$ を用いて、 $Q(k, i\omega_n)$ は

$$Q(k, i\omega_n) = -\left(\frac{e v_F}{\pi}\right)^2 (1 + \tilde{\alpha})^2 k^2 G_-^\rho(k, i\omega_n), \quad (4.99)$$

となる。これより、電気伝導度のふるまいが、ハミルトニアン H_ρ の θ_+ に関するエネルギー・ギャップ q_ρ の有無により、 $\omega \rightarrow 0$ のとき、次のようになることがわかる。

$$\sigma(\omega) \rightarrow \begin{cases} -i\omega, & q_\rho \neq 0, \\ i/(\omega + i0^+), & q_\rho = 0. \end{cases} \quad (4.99)$$

すなわち、エネルギー・ギャップ $q_\rho \neq 0$ があるとき、電気伝導度の実数部、虚数部は共に、 $\omega = 0$ で零となり、系は絶縁体となる。エネルギー・ギャップがないとき ($q_\rho = 0$)、電気伝導度の実数部は δ -関数となり、 $\omega = 0$ は特異点になる。これは、系に電子の散乱機構がないためであり、系が完全導体になっていることを示している。この完全導体の状態は、超伝導状態とは区別されなければならない。

系が絶縁体になるかどうかは、電荷密度演算子の位相 θ_+ のハミルトニアンに、ギャップができるかどうかによって決まる。すなわち、 $4k_F$ -CDW の長距離秩序ができるかどうかによって決まる。

§ 4.6 波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル中で相互作用している1次元電子系

波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル中で、相互作用していない1次元電子系では、ポテンシャルの1周期当たり、2個の電子がある。したがって、フェルミ面にギャップができ、 $T = 0$ で系は絶縁体である。 $2k_F$ - または、 $4k_F$ -CDW が形成されている系では、周期ポテンシャルによって、CDW がピン止めされ、 $T = 0$ で系は絶縁体となる。この節では、波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル中で相互作用している1次元電子系で、電子間相互作用の強さによって、 $T = 0$ で系が金属的になり得ることを、ボゾン表示の方法を用いて示す。¹³⁾

§ 4.6.1 ハミルトニアン

ポテンシャル $v(x)$ による、電子の後方散乱を表わすハミルトニアンは、

$$H_p = \sum_{j,s} \int dx v(x - x_j) \{ \psi_{1s}^\dagger(x) \psi_{2s}(x) + \psi_{2s}^\dagger(x) \psi_{1s}(x) \}, \quad (4.100)$$

である。フェルミの場の演算子に対するボゾン表示 (3.72) を用い、(4.100) 式を位相演算子で表わすと

$$H_p = \sum_j \frac{2V}{\pi \alpha_0} \cos \phi_+(x_j) \cos \{ 2k_F x_j + \theta_+(x_j) \}, \quad (4.101)$$

となる。ここで、短距離型のポテンシャル $v(x - x_j) = V \delta(x - x_j)$ を用いた。

ポテンシャルを位置 $x_j = n_j \pi / k_F$ (n_j : 整数), におき、距離 π / k_F 離れた点での位相

の差が小さいと仮定して、 j に関する和を、 x に関する積分におきかえる。

$$H_p = \frac{4v_F \tilde{V}}{\pi \alpha_0^2} \int dx \cos \phi_+(x) \cos \theta_+(x). \quad (4.102)$$

ここで、関係式

$$k_F = \alpha_0^{-1} = N/2L, \quad (N: \text{系の電子数}),$$

を用いた。また、 \tilde{V} は $V/2\pi v_F$ を表わす。

相互作用している 1 次元電子系として、スピンの依存した BGD モデルの $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ の領域を考える。この領域では、 $T=0$ でハミルトニアンのスピン密度部分にエネルギー・ギャップ $q_c \approx 0$ がある。したがって、温度領域 $T \ll q_c$ を考えるかぎり、スピン密度演算子で表わされた位相 ϕ_+ は凍結され、省くことができる。波数 $2k_F$ - 周期ポテシシャル中の電子系では、 $2k_F$ - と同様に、 $4k_F$ も逆格子ベクトルとなる。したがって、この系では、電子間のウムクラップ散乱が存在する。ただし、ここでは問題を簡単化するために、ウムクラップ散乱を省いて考える。

ハミルトニアン H_p を用いて、全ハミルトニアンの電荷密度部分は、

$$H_\rho = \int \left[\frac{v_F}{4\pi} (1 - \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_+}{\partial x} \right)^2 + \frac{v_F}{4\pi} (1 + \tilde{\alpha}) \left(\frac{\partial \theta_-}{\partial x} \right)^2 + \frac{4v_F \tilde{V}}{\pi \alpha_0^2} \cos \theta_+(x) \right] dx, \quad (4.103)$$

となる。ここで、 ϕ_+ が凍結され定数となることを考慮して、 $\cos \phi_+ = 1$ 、とおいた。

§ 4.6.2 基底状態

まず、ハミルトニアン H_ρ に § 3.6 で説明したくりこみ群の方法を適用すると、次の結果が得られる。

$$\eta_+ < 4, \quad (-1 < \tilde{\alpha} < 15/17), \quad \text{で } \tilde{V} \rightarrow \infty,$$

$$\eta_+ > 4, \quad (1 > \tilde{\alpha} > 15/17), \quad \text{で } \tilde{V} \rightarrow 0$$

となる。すなわち、 $\eta_+ = 4$ が境界となり、 $\eta_+ > 4$ で系は金属的となる。ただし、 $\tilde{V} \ll 1$ を仮定する。次に、SCHA を用いると、次の結果が得られる。 $|\tilde{V}| \ll 1$ のとき、 $\eta_+ < 4$ で H_ρ にエネルギー・ギャップ $q_\rho \approx 0$ が存在し、 $\eta_+ > 4$ で $q_\rho = 0$ である。ただし、温度

は $T=0$ とする。この結果は、くりこみ群によるものと一致している。また、 $T=0$ で、 $\eta_+ < 4$ のとき、CDWの長距離秩序ができており、 $\eta_+ > 4$ のとき、長距離秩序はできないが、SSの相関関数が発散することがわかる。

一般に、ウムクラップ散乱とスピン密度演算子を考慮に入れ、波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル中で、スピンに依存した BGD モデルを調べた結果を、図 4・6 に示す。¹⁴⁾ このとき

$$|\tilde{g}_3^\perp| \ll 1, \quad |\tilde{g}_1^\perp| \ll 1, \quad |\tilde{V}| \ll 1,$$

を仮定し、すべての非調和項に SCHA を適用した。領域 $\tilde{g}_1^\parallel < 0$ での結果は、上に得たものと一致している。

ランダム・ポテンシャル中で相互作用している 1次元電子系が、局在性を示すかどうかについては、何人かの人達により、最近調べられた。¹⁵⁾⁻²¹⁾ それらの一部と周期ポテンシャル中

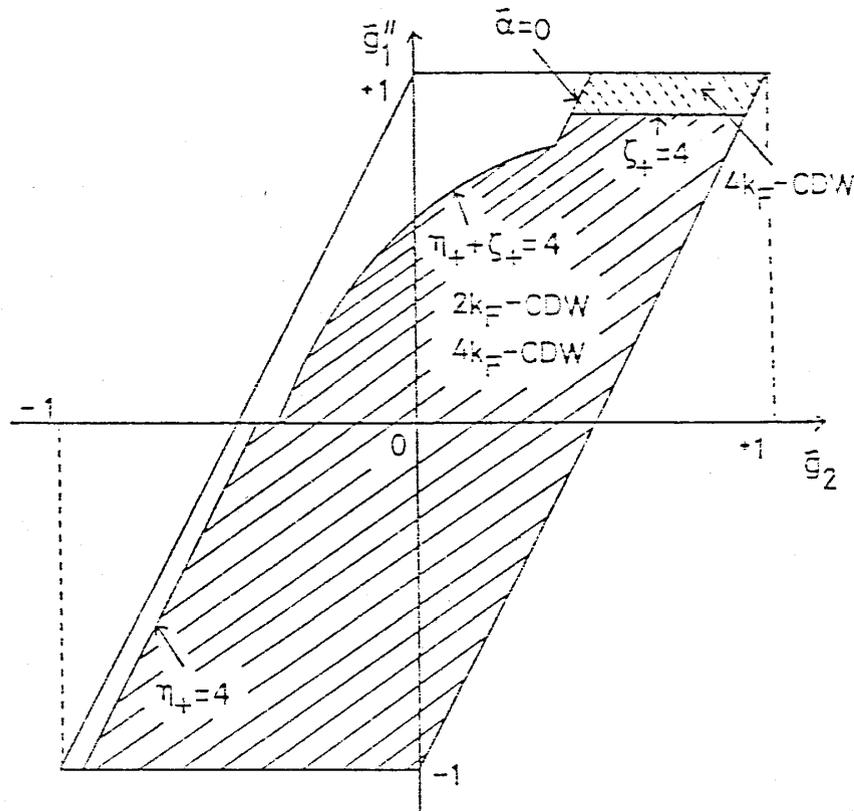


図 4・6：波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル ($|\tilde{V}| \ll 1$) 中で相互作用している 1次元電子系、ウムクラップ散乱をともなったスピンに依存した BGD モデル ($|\tilde{g}_3^\perp| \ll 1, |\tilde{g}_1^\perp| \ll 1, \tilde{g}_3^\parallel < 0, \tilde{g}_1^\parallel < 0$) の基底状態の相図。実斜線を引いた領域では、 $2k_F$ -CDW と $4k_F$ -CDW の長距離秩序が存在し、系は絶縁体である。破斜線を引いた領域では、 $4k_F$ -CDW の長距離秩序のみが存在し、系は絶縁体である。他の領域では、系は完全導体である。() 内に示されたゆらぎの相関関数は、絶対零度で発散するが、対応する長距離秩序は存在しない。

中のものとの比較を、表4・1に示す。¹⁴⁾ 表中には、系が金属的となる結合定数の領域を示した。スピンの依存したBGDモデルでランダムポテンシャルの場合は、未だ十分な計算がないように思われる。スピンをもたない朝永モデルの結果は、周期ポテンシャル中の場合、および、ランダム・ポテンシャル中の場合の両方共、Apel¹⁹⁾によって最初に計算されたものであるが、それとは、結合定数の規格化の大きさが、多少異なる。^{*} 表に書いた周期ポテンシャル中のものは、筆者ら¹⁴⁾が計算したものである。

この表から、波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル中の方が、スピンの依存したBGDモデルの領域 $\tilde{g}_1^{\parallel} > 0$ のもの¹⁷⁾を除いて、ランダム・ポテンシャル中のものより、金属的になる領域が狭いということがわかる。また、系の電気伝導度のふるまいは、両者で、定性的には似ているが、基底状態で長距離秩序が存在するかどうかは、本質的に異なるであろう。

附録4-A リー方程式(4・8)の導出

第2発散項までのリー方程式を求めるには、バーテックス関数を3次まで、自己エネルギーを2次まで計算する。まず、次元をもたないバーテックス r_{1i} を考察する。これに対応する2次のバーテックスは、表4-A・1に示すように5つあり、

$$r_{1i}^{(2)} = \frac{2\tilde{g}_{1i}^2 + 2 \sum_{k \neq i} (\tilde{J}_{1ik}^2 + \tilde{K}_{1ik} \tilde{K}_{2ik})}{\tilde{g}_{1i}} \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right) \quad (4-A \cdot 1)$$

と計算される。1次の対数発散が現われる3次のバーテックスは、第3章の(3・17)式、(3・18)式で、

$$\tilde{g}_1^{\parallel} = \tilde{g}_1^{\perp} \equiv \tilde{g}_{1i}, \quad \tilde{g}_2^{\parallel} = \tilde{g}_2^{\perp} \equiv \tilde{g}_{2i},$$

とおくことにより、

$$r_{1i}^{(3)} = [2\tilde{g}_{1i} \tilde{g}_{2i} - 2\tilde{g}_{2i}^2] \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (4-A \cdot 2)$$

を得る。ここで、鎖内結合については、各鎖が同等として、

$$\tilde{g}_{1i} = \tilde{g}_{1j}, \quad \tilde{g}_{2i} = \tilde{g}_{2j}, \quad (i \neq j),$$

^{*}) Apel¹⁹⁾は、 $\tilde{g}_i \equiv g_i / 2\pi v_F$ のかわりに、 $r_i \equiv g_i / \pi v_F$ を用いた。

表4・1：波数 $2k_F$ -周期ポテンシャル中、および、ランダム・ポテンシャル中で相互作用している1次元電子系の基底状態の比較。表中には、系が金属的となる結合定数の領域を示す。スピンの依存しないBGDモデルは $\tilde{g}_1 \equiv \tilde{g}_1^{\parallel} = \tilde{g}_1^{\perp}$ である。スピンに依存した朝永モデルは、前方散乱の結合定数 \tilde{g}_2^{\parallel} と \tilde{g}_2^{\perp} だけをもつものであり、スピンをもたない朝永モデルは、後方散乱 \tilde{g}_1 と前方散乱 \tilde{g}_2 をもつものである。また、

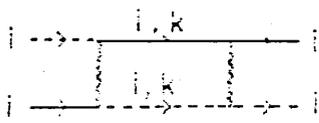
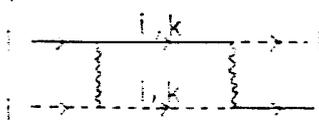
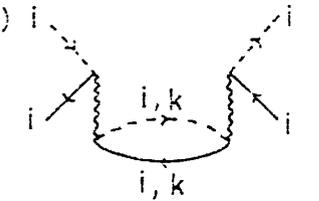
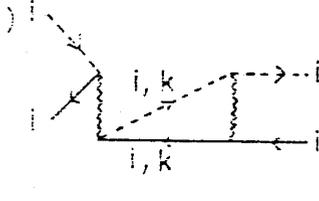
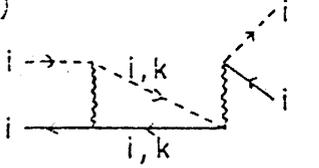
$$\begin{aligned} \eta_+ &\equiv [(1 + \tilde{\alpha}) / (1 - \tilde{\alpha})]^{1/2}, \\ \zeta_+ &\equiv [(1 + \tilde{g}_1^{\parallel}) / (1 - \tilde{g}_1^{\parallel})]^{1/2}, \\ \eta_T &\equiv [(1 - \tilde{g}_2^{\parallel} - \tilde{g}_2^{\perp}) / (1 + \tilde{g}_2^{\parallel} + \tilde{g}_2^{\perp})]^{1/2}, \\ \zeta_T &\equiv [(1 - \tilde{g}_2^{\parallel} + \tilde{g}_2^{\perp}) / (1 + \tilde{g}_2^{\parallel} - \tilde{g}_2^{\perp})]^{1/2}, \\ \eta &= [(1 + \tilde{g}_1 - \tilde{g}_2) / (1 - \tilde{g}_1 + \tilde{g}_2)]^{1/2}, \end{aligned}$$

である。周期ポテンシャルの場合は、スピンをもたない朝永モデルの場合を除いて、電子間のウムクラップ散乱も考慮されている。

	周期ポテンシャル	ランダム・ポテンシャル
スピンに依存したBGDモデル $\tilde{g}_1^{\parallel} < 0$ 領域	$\eta_+ > 4$	
スピンに依存したBGDモデル $\tilde{g}_1^{\parallel} > 0$ 領域	$\tilde{\alpha} > 0$ $\eta_+ + \zeta_+ > 4$	
スピンに依存しないBGDモデル $\tilde{g}_1 > 0$ 領域	$\eta_+ > 3$ $(\tilde{g}_1 \ll 1)$	$\eta_+ > 2$ (文献 20))
スピンに依存した朝永モデル	$\tilde{g}_2^{\parallel} + \tilde{g}_2^{\perp} < 0$ $\eta_T + \zeta_T > 4$	$\eta_T + \zeta_T > 3$ (文献 21))
スピンをもたない朝永モデル	$\eta > 2^*)$ (文献 19))	$\eta > \frac{3}{2}^*)$ (文献 16), 19))

*) 文献 19) における結合定数の規格化を訂正した。

表4-A・1：準1次元電子系，2次の後方散乱のバーテックス。

<p>(a)</p>  $g_{1i}g_{2i} + \sum_{k \neq i} K_{1ik}K_{2ki}$	<p>(b)</p>  $g_{1i}g_{2i} + \sum_{k \neq i} K_{2ik}K_{1ki}$
<p>(c)</p>  $2g_{1i}^2 + 2 \sum_{k \neq i} J_{1ik}^2$	<p>(c)</p>  $g_{1i}g_{2i} + \sum_{k=i} J_{1ik}L_{2ki}$
<p>(e)</p>  $g_{1i}g_{2i} + \sum_{k \neq i} J_{1ik}L_{2ki}$	

とした。また，本文中に述べたように，リー方程式の右辺で，結合定数の3次の寄与をする3次のバーテックスとしては，鎖内結合によるものだけを考慮した。

2次の自己エネルギーは，鎖間結合の2次の項を無視して，(3・21)式で，

$$\tilde{g}_1^{\parallel} = \tilde{g}_1^{\perp} \equiv \tilde{g}_{1i}, \quad \tilde{g}_2^{\parallel} = \tilde{g}_2^{\perp} \equiv \tilde{g}_{2i},$$

とにおいて，

$$\Sigma^{(2)} = [\tilde{g}_{1i}^2 + \tilde{g}_{2i}^2 - \tilde{g}_{1i}\tilde{g}_{2i}] (\omega - \epsilon_k) \left(\ln \frac{\omega}{2D} - i \frac{\pi}{2} \right), \quad (4-A \cdot 3)$$

$$\epsilon_k = v_F (|k| - k_F),$$

杉山忠男

となる。自己エネルギー Σ と自由粒子のグリーン関数 $G^{(0)}$ から

$$d \equiv [1 - G^{(0)} \Sigma]^{-1},$$

を求め、さらに multiplicative renormalization の関係を用い、それらのセルフコンシステントな解を、(3・12) 式と同様なリー方程式へ代入して、(4・8) 式を得る。

附録 4-B 相互作用 J_{2ij}, L_{1ij} に対するリー方程式

J_{2ij}, L_{1ij} に対するリー方程式は、附録 4-A に述べたものと類似の方法により、最低次までで、

$$\frac{\partial \tilde{J}'_{2ij}}{\partial \xi} = \tilde{J}'_{1ij} + \tilde{L}'_{1ij} + \tilde{L}'_{2ij} - \tilde{K}'_{2ij}, \quad (4-B-1)$$

$$\frac{\partial \tilde{L}'_{1ij}}{\partial \xi} = 2 [\tilde{J}'_{1ij} \tilde{L}'_{2ij} - \tilde{K}'_{1ij} \tilde{K}'_{2ij} + \tilde{L}'_{1ij} + \tilde{K}'_{1ij}], \quad (4-B-2)$$

となる。

これらの方程式には、鎖内結合定数が含まれていない。したがって、鎖内結合定数が鎖間結合定数に比べて十分強い高温領域で、 J_{2ij}, L_{1ij} への鎖内結合定数によるくりこみがなく、温度が低下しても、 J_{2ij}, L_{1ij} はあまり成長しない。これとは対照的に、

$$J_{cij} \equiv J_{1ij}^{\parallel} = J_{1ij}^{\perp} \quad (J_{Lij} \equiv J_{1ij}^{\parallel} = -J_{1ij}^{\perp}),$$

$$L_{Tij} \equiv L_{2ij}^{\perp},$$

$$K_{sij} \equiv K_{1ij}^{\perp} = K_{2ij}^{\perp} \quad (K_{T1ij} \equiv -K_{1ij}^{\parallel} = K_{2ij}^{\parallel}, K_{T0ij} \equiv -K_{1ij}^{\perp} = K_{2ij}^{\perp}),$$

は、(4・25) ~ (4・27) 式からわかるように、温度の低下と共に、各鎖内相関関数の成長にもなって成長する。さらに、リー方程式 (4-B-1), (4-B-2) には、 k に関する和の項がなく $J_{cij} (J_{Lij}), L_{Tij}, K_{sij} (K_{T1ij}, K_{T0ij})$ 、にくらべ、この点でも J_{2ij}, L_{1ij} へのくりこみはわずかである。

附録 4-C 相関関数 $\chi_L(x, \tau)$ のふるまい

零でない有限の x, τ をもつ $\chi^L(x, \tau)$ が零でないことは、(4・81) 式, (4・82) 式, (4・84) 式から容易にわかる。そこで、ここでは、

$$\chi_L(2k_F, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{1/T} d\tau e^{-i2k_F x} \chi_L(x, \tau), \quad (4-C\cdot 1)$$

を調べる。いま、(4・81)式で $D_{+,-}^S(x, \tau)$ は、 x, τ がどんな値をとっても、零でない有限の値である。そこで、項 $E_{+,-}^S(x, \tau) - E_{+,+}^S(x, \tau)$ を

$$\begin{aligned} & E_{+,-}^S(x, \tau) - E_{+,+}^S(x, \tau) \\ &= \exp[-\langle \phi_+^2(0, 0) \rangle_{H_\sigma^S}] \{ \exp[\langle T_\tau \phi_+(x, \tau) \phi_+(0, 0) \rangle_{H_\sigma^S}] \\ & \quad - \exp[-\langle T_\tau \phi_+(x, \tau) \phi_+(0, 0) \rangle_{H_\sigma^S}] \}, \end{aligned} \quad (4-C\cdot 2)$$

$$\exp[-\langle \phi_+^2(0, 0) \rangle_{H_\sigma^S}] = \exp[-T \sum_n \int dk \frac{v_F(1 + \tilde{g}_1^{\parallel})}{\omega_n^2 + a_\sigma^2(k^2 + q_\sigma^2)}], \quad (4-C\cdot 3)$$

$$\begin{aligned} & \exp[\pm \langle T_\tau \phi_+(x, \tau) \phi_+(0, 0) \rangle_{H_\sigma^S}] \\ &= \exp[\pm T \sum_n \int dk \frac{v_F(1 + \tilde{g}_1^{\parallel})}{\omega_n^2 + a_\sigma^2(k^2 + q_\sigma^2)} e^{ikx + i\omega_n \tau}], \end{aligned} \quad (4-C\cdot 4)$$

と書くとき、(4-C・3)式の値は有限である。ゆえに、(4-C・1)式の値が有限であることを示すには、(4-C・2)式の右辺の指数関数の差の部分の x, τ に関する積分が有限となることを示せば十分である。そのために、まず次の積分を行う。

$$\begin{aligned} & \int dk \frac{e^{ikx + i\omega_n \tau}}{\omega_n^2 + a_\sigma^2(k^2 + q_\sigma^2)} \\ &= \frac{\exp[-(q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2)^{1/2} |x|]}{a_\sigma^2 (q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2)^{1/2}} e^{i\omega_n \tau}. \end{aligned} \quad (4-C\cdot 5)$$

被積分関数が有限である積分が発散するかどうか調べるには、積分変数の大きいところでのふるまいを考えればよい。(4-C・2)式の右辺の指数関数の差的部分を、 x の大きいところで次のように展開する。

$$\begin{aligned} & \sum_n \left[\frac{2v_F(1 + \tilde{g}_1^{\parallel})}{a_\sigma^2} \cdot \frac{\exp[-(q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2)^{1/2} |x|]}{a_\sigma^2 (q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2)^{1/2}} e^{i\omega_n \tau} \right. \\ & \quad \left. + O(\exp[-3(q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2)^{1/2} |x|]) \right]. \end{aligned} \quad (4-C\cdot 6)$$

(4-C・6)式の x -積分、 n -和、 τ -積分を考える。次の不等式が成り立つ。

$$\frac{\exp[-(q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2)^{1/2}|x|]}{[q_\sigma^2 + \omega_n^2/a_\sigma^2]^{1/2}} \leq \frac{a_\sigma e^{-|q_\sigma x|}}{[a_\sigma^2 q_\sigma^2 + \omega_n^2]^{1/2}} \quad (4-C-7)$$

そこで、 x -積分は、

$$\int dx \frac{a_\sigma e^{-|q_\sigma x|}}{[a_\sigma^2 q_\sigma^2 + \omega_n^2]^{1/2}} \sim \frac{2a_\sigma}{|q_\sigma| [a_\sigma^2 q_\sigma^2 + \omega_n^2]^{1/2}} \quad (4-C-8)$$

となる。さらに、有限温度で、

$$T \sum_n \frac{e^{i\omega_n \tau}}{[a_\sigma^2 q_\sigma^2 + \omega_n^2]^{1/2}} < \frac{2\omega_D}{a_\sigma |q_\sigma|} \quad (4-C-9)$$

である。ここで、 n の上限を ω_D/T で切断した。(4-C-9)式の τ -積分は、

$$\int_0^{1/T} \frac{2\omega_D}{a_\sigma |q_\sigma|} d\tau = \frac{2\omega_D}{a_\sigma |q_\sigma| T} \quad (4-C-10)$$

この式の値は、 $T \neq 0$ で有限である。

絶対零度において、(4-C-9)式の n -和は積分

$$\int d\omega \frac{e^{i\omega \tau}}{[a_\sigma^2 q_\sigma^2 + \omega^2]^{1/2}} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} K_0(a_\sigma |q_\sigma|), \quad (4-C-11)$$

で与えられる。ここで、 K_0 は0次の変形ベッセル関数である。 K_0 の漸近形は

$$K_0(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \sum_n \frac{(\nu, n)}{(2z)^n}, \quad (z \rightarrow \infty), \quad (3-E-9)$$

$$(\nu, n) \equiv \frac{\Gamma(\nu + n + \frac{1}{2})}{n! \Gamma(\nu - n + \frac{1}{2})}, \quad (\Gamma \text{ はガンマ関数}),$$

であるから、(4-C-11)式を τ に関して積分したとき、 τ の大きいところからの発散はない。

また、 τ は下限 $\sim 1/\omega_D$ をもつので、 τ の下限からの発散もない。

以上より、(4-C-2)式の右辺の指数関数の差の部分 x, τ に関する積分は有限であることがわかる。結局、 $\chi_L(2k_F, 0)$ は発散しない。

第4章 参考文献

- 1) I. E. Dzyaloshinskii and E. I. Kats, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **55** (1968), 338 (Sov. Phys. -JETP **28** (1969), 178).
- 2) L. Mihály and J. Sólyom, J. Low Temp. Phys. **24** (1976), 579.
- 3) N. Menyárd, Solid State Commun. **21** (1977), 495.

- 4) T. Sugiyama, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **79** (1982), 299 (Proc. Int. Conf. Low Dim. Cond., Boulder, 1981 August).
- 5) K. Machida, T. Koyama and T. Matsubara, *Phys. Rev.* **B23** (1981), 99.
- 6) K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50** (1981), 2195.
- 7) Chr. Seidel and V. N. Prigodin, *J. of Phys.* **C14** (1981), 5625.
- 8) T. Sugiyama, *Prog. Theor. Phys.* **70** (1983), 343.
- 9) T. Sugiyama, *J. Magn. Magn. Mater.* **31-34** (1983), 509 (Proc. ICM, Kyoto 1982 September).
- 10) 例えば, 鹿児島誠一編著, 一次元電気伝導体 (裳華房, 1982) 参照。
- 11) V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **37** (1976), 107.
- 12) P. A. Lee, T. M. Rice and R. A. Klemm, *Phys. Rev.* **B15** (1977), 2984.
- 13) H. Fukuyama and H. Takayama, *Electronic Properties of Inorganic Quasi One Dimensional Compounds*, edited by P. Monceau in *Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures*, Series B (D. Reidel Publishing Company), to be published.
- 14) T. Sugiyama, J. Kumagai and K. Okamoto, *Prog. Theor. Phys.* **71** (1984), No. 4.
- 15) S. T. Chui, *Phys. Rev.* **B16** (1977), 617.
- 16) S. T. Chui and J. W. Bray, *Phys. Rev.* **B16** (1977), 1329.
- 17) S. T. Chui and J. W. Bray, *Phys. Rev.* **B19** (1979), 4020.
- 18) K. Okamoto, *Prog. Theor. Phys.* **68** (1982), 1443.
- 19) W. Apel, *J. of Phys.* **C15** (1982), 1973.
- 20) W. Apel and T. M. Rice, *Phys. Rev.* **B15** (1982), 7063; *J. of Phys.* **C16** (1983), L271.
- 21) Y. Suzumura and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **52** (1983), 2870.

第5章 ベーテ仮説の方法

最近、後方散乱モデル、近藤モデルなどがベーテ仮説を用いて解かれ、注目されている。¹⁾⁻⁶⁾ この章では、これらの方法の基礎になっているもの、すなわち、電子の分散が2次で、接触型相互作用をする1次元電子系のモデル(以後、ヤン・ゴードンモデルと呼ぶ)に対する、ベーテ・ヤン⁷⁾⁻⁹⁾の方法について、詳しく述べる。

§5・1 ベーテ仮説

第1量子化の形でのヤン・ゴードンモデルのハミルトニアンは

$$h = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 4c \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \delta(x_i - x_j), \quad (5.1)$$

によって与えられる。ここで、 $\hbar/2m$ (\hbar : プランク定数, m : 粒子の質量) を落した。(5.1)式からわかるように、結合定数 c は、運動量の次元をもっている。また、 \hbar はスピン変数を含まない。シュレーディンガー方程式

$$h \psi = E \psi, \quad (5.2)$$

を満足する N 体のフェルミ粒子系の波動関数 ψ を求めたい。ここで、 E は系の全エネルギーである。(5.1)式において、ハミルトニアンの運動エネルギー部分が、座標の2階微分で与えられているため、波動関数そのものは、 N 個の座標の中の任意の2個が等しくなる点で連続にすることが可能であるが、波動関数の座標に関する微分は、上のような点で不連続である。

波動関数 ψ が、 N 個の準粒子の平面波の重ね合わせで表わされるという、ベーテ仮説を導入する。⁷⁾ 1次元系で、2粒子の古典的な弾性衝突を考えると、粒子の運動量に変化しないか、交換されるかのどちらかであり、2粒子の弾性衝突だけを含む、 N 粒子の1次元電子系は、始状態での運動量の組 (p_1, p_2, \dots, p_N) は、終状態でも保たれる。ベーテ仮説はこのような系に対して適用される。

シュレーディンガー方程式(5.2)を満足する波動関数 ψ は、スピン変数を含まない。そこで ψ を次のように書くことができると仮定する。

$$\psi(x_i) = \sum_{Q, P \in S_N} \xi_{QP} \theta(x_Q) \exp \left[i \sum_j k_{P_j} x_{Q_j} \right]. \quad (5.3)$$

ここで、 S_N は N -成分順列群、 $\theta(x_Q)$ は $\theta(x_{Q1} < x_{Q2} < \dots < x_{QN})$ のステップ関数、 ξ_{QP} は $N! \times N!$ 行列をなす数係数である。いま、全エネルギー E は、個々の準粒子の運動エネルギーの和、

$$E = \sum_{j=1}^N k_j^2, \quad (5.4)$$

によって表わされる。

いまの場合、ハミルトニアン(5.1)がスピンを現わに含まないため、波動関数 ψ を、スピン関数を含まない形に書くことができたが、 ψ がフェルミ粒子系を表わすかぎり、粒子の置換に対し反対称であるという要請を満足しなければならない。一般に、スピン関数と座標関数によって表わされた全波動関数の、粒子の置換に対する対称性を考察するには、ヤングの図形が用いられる。¹⁰⁾⁻¹²⁾

↑スピンをもつ $(N-M)$ 個の電子と、↓スピンをもつ M 個の電子の系を考える。この系の全波動関数は、 N 個の電子の配置によって決められるスピン関数と座標関数の積で与えられる。いま、全波動関数は、2つの電子の交換に対し反対称であるから、スピン関数が対称であれば座標関数が反対称となり、スピン関数が反対称であれば、座標関数が対称である。この状況は図5.1に示すスピン関数と座標関数に対するヤング図形で表わされる。1つの箱には、1つの電子の波動関数が入る。

ヤング図形では、同じ行の波動関数を対称化し、同じ列の波動関数を反対称化する。以上の対称性の議論は、後に、波動関数 ψ の中の ξ_{QP} に対する Yang の解をつくるとき用いる。

§ 5.2 S行列とその因子化条件

いろいろな数係数 ξ_{QP} の間の関係(S行列)を定め、S行列がコンシステントになる条件を求める。 i 番目の粒子と j 番目の粒子が相互作用するとき、波動関数(5.3)の中で関与する項は、

$$\begin{aligned} & \dots + \xi_{QP} \theta(x_{Qj} - x_{Qi}) \exp [i k_{Pi} x_{Qi} + i k_{Pj} x_{Qj}] \\ & \quad + \xi_{QP'} \theta(x_{Qj} - x_{Qi}) \exp [i k_{Pj} x_{Qi} + i k_{Pi} x_{Qj}] \\ & \quad + \xi_{Q'P} \theta(x_{Qi} - x_{Qj}) \exp [i k_{Pi} x_{Qj} + i k_{Pj} x_{Qi}] \\ & \quad + \xi_{Q'P'} \theta(x_{Qi} - x_{Qj}) \exp [i k_{Pj} x_{Qj} + i k_{Pi} x_{Qi}] + \dots, \end{aligned} \quad (5.5)$$

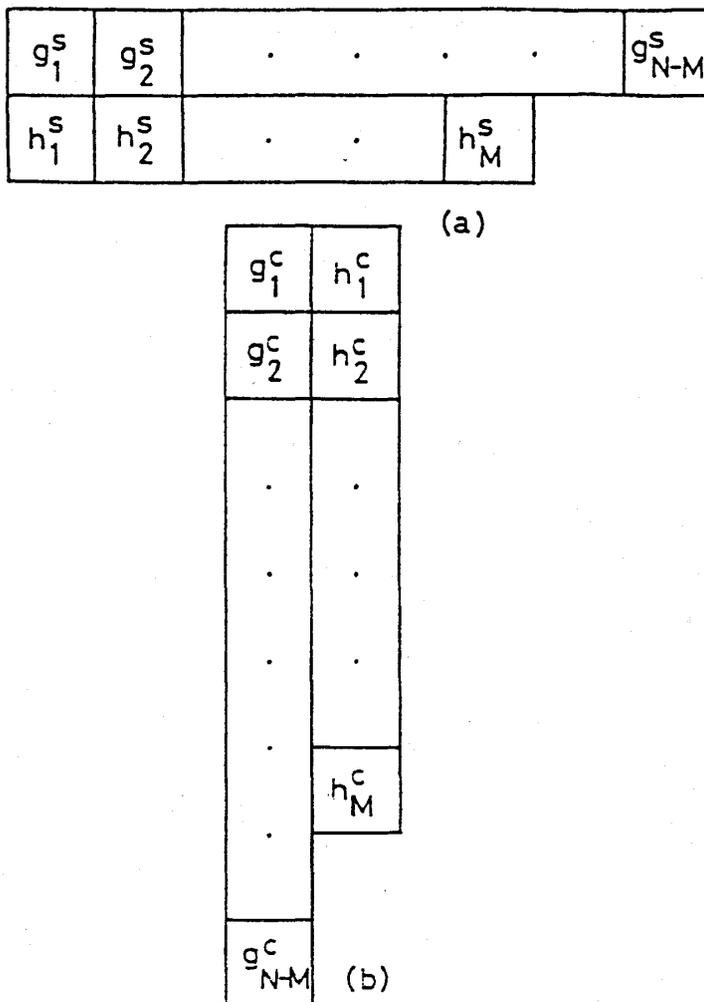


図5・1：(N-M)個の↑スピンとM個の↓スピンをもつN粒子系に対するヤング図形。(a)図はスピン関数を表わし、(b)図は座標関数を表わす。i番目の↑スピンの電子のスピン関数が g_i^s で、座標関数が g_i^c であり、j番目の↓スピンのスピン関数が h_j^s で、座標関数が h_j^c である。

である。ここで、

$$Q'j = Qi, \quad Q'i = Qj, \quad P'j = Pi, \quad P'i = Pj$$

である。

波動関数の連続の条件を考える。条件

$$\psi(\dots, x_i, x_j, \dots) |_{x_i=x_j} = \psi(\dots, x_j, x_i, \dots) |_{x_i=x_j},$$

は、(5.5)式を考慮に入れると、 ξ_{QP} に次の条件を課す。

$$\xi_{QP} + \xi_{QP'} = \xi_{Q'P} + \xi_{Q'P'} \quad (5.6)$$

波動関数(5.3)がシュレーディンガー方程式(5.2)を満足する条件を考える。(5.5)式の1つの項を x_{Qi} で2階微分すると,

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \{ \xi_{QP} \theta(x_{Qj} - x_{Qi}) \exp [i k_{Pi} x_{Qi} + i k_{Pj} x_{Qj}] \\ & = \xi_{QP} \{ \delta'(x_{Qj} - x_{Qi}) \exp [i(k_{Pi} + k_{Pj}) x_{Qi}] \\ & \quad + 2 \delta(x_{Qj} - x_{Qi}) i k_{Pi} \exp [i(k_{Pi} + k_{Pj}) x_{Qi}] \\ & \quad + \theta(x_{Qj} - x_{Qi}) k_{Pi}^2 \exp [i k_{Pi} x_{Qi} + i k_{Pj} x_{Qj}] \} , \end{aligned}$$

となる。上式右辺第1項からの寄与は、 x_{Qi} と x_{Qj} に関する微分を考えると零になる。第3項からの寄与は、エネルギーの表式(5.4)を与える。これより、シュレーディンガー方程式(5.2)は,

$$\begin{aligned} 0 &= (h - E) \psi = \dots + 2 \delta(x_{Qj} - x_{Qi}) \exp [i(k_{Pi} + k_{Pj}) x_{Qi}] \\ & \quad \times \{ i(k_{Pi} - k_{Pj}) [\xi_{QP} - \xi_{QP'} + \xi_{Q'P} - \xi_{Q'P'}] \\ & \quad + 2c [\xi_{QP} + \xi_{QP'} + \xi_{Q'P} + \xi_{Q'P'}] \} , \end{aligned} \quad (5.7)$$

となる。ただし,

$$\delta(x) \theta(x) = \frac{1}{2} \delta(x)$$

を用いた。(5.6)式と(5.7)式より,

$$[i(k_{Pi} - k_{Pj}) - 2c] \xi_{Q'P'} = i(k_{Pi} - k_{Pj}) \xi_{QP} + 2c \xi_{Q'P} ,$$

$$[i(k_{Pi} - k_{Pj}) - 2c] \xi_{QP'} = i(k_{Pi} - k_{Pj}) \xi_{Q'P} + 2c \xi_{QP} ,$$

を得る。これらを、次のように書くことができる。

$$\xi_{P'} = Y_{Pi, Pj}^{i, j} \xi_P , \quad (5.8)$$

$$Y_{P_i, P_j}^{i, j} = \frac{i(k_{P_i} - k_{P_j}) P^{ij} + 2c}{i(k_{P_i} - k_{P_j}) - 2c} \quad (5.9)$$

ここで,

$$\xi_{P'} = \xi_{QP'} \text{ または, } \xi_{Q'P'}, \quad \xi_P = \xi_{QP} \text{ または, } \xi_{Q'P}$$

であり, P^{ij} は, i 番目と j 番目の座標を交換する演算子である。(5.9) 式は, P_i 番目と P_j 番目の運動量の交換に対応する S 行列である。この S 行列が, コンシステントにつくられるための条件を求める。¹³⁾

まず, 2つの粒子の相互作用を考える。このとき,

$$\xi_{21} = Y_{12}^{12} \xi_{12}, \quad \xi_{12} = Y_{21}^{12} \xi_{21},$$

が成り立つので, 一般に次の関係を得る。

$$Y_{ij}^{ab} Y_{ji}^{ab} = 1 \quad (5.10)$$

運動量 p_1, p_2 ($p_1 > p_2$) をもち, はじめの位置が, それぞれ x_1, x_2 ($x_1 < x_2$) にある 2 粒子が相互作用する状況を, 図 5.2 に図示する。時間は下から上へ経過するものとし, この図のバーテックスが, S 行列 Y_{12}^{12} を表わす。

つぎに, 運動量 p_1, p_2, p_3 ($p_1 > p_2 > p_3$) をもち, はじめの位置が, それぞれ x_1, x_2, x_3 ($x_1 < x_2 < x_3$) にある 3 粒子が, すべての対の間の 3 回の衝突の後, それらの運動量の位置を逆転させる状況を, 図 5.3 (a), (b) に示す。(a) 図, (b) 図ともに, 初めと終わりの運動量の並び方は同じであり, それぞれ S 行列を用いて,

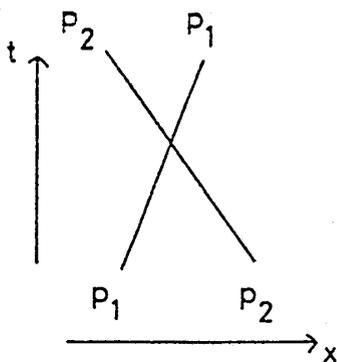


図 5.2 : 2 粒子の相互作用。

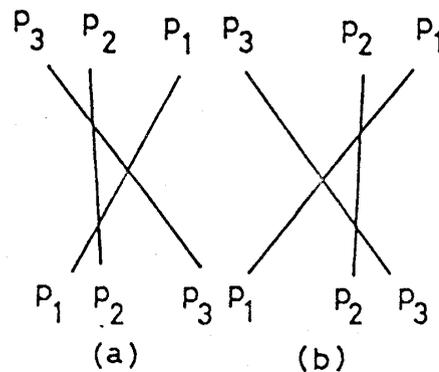


図 5.3 : 3 粒子の相互作用。(a) 図と (b) 図に対する S 行列は同じはずである。

$$\xi_{321} = Y_{23}^{12} Y_{13}^{23} Y_{12}^{12} \xi_{123},$$

$$\xi_{321} = Y_{12}^{23} Y_{13}^{12} Y_{23}^{23} \xi_{123},$$

と表わされる。これらより、一般的に、

$$Y_{ij}^{bc} Y_{ik}^{ab} Y_{jk}^{bc} = Y_{jk}^{ab} Y_{ik}^{bc} Y_{ij}^{ab}, \quad (5.11)$$

が成り立つことがわかる。

図5・4に示す、2粒子ずつの衝突が1回ずつ起きる4粒子系を考える。このとき、1と2の粒子、3と4の粒子の衝突が、どちらが先に起きていても同じである。したがって、一般的に

$$Y_{ij}^{ab} Y_{kl}^{cd} = Y_{kl}^{cd} Y_{ij}^{ab}, \quad (5.12)$$

が成り立つ。

図5・5に示す、4つの粒子間のすべての対の衝突が起きる場合を考える。この相互作用はS行列を用いて、

$$\xi_{4321} = Y_{34}^{12} Y_{12}^{34} Y_{14}^{23} Y_{24}^{34} Y_{13}^{12} Y_{23}^{23} \xi_{1234}, \quad (5.13)$$

と表わされる。図で、各運動量の直線を平行移動しても、最初と最後の状態(運動量の並び方)に変化はない。いま、運動量 p_3 の直線を右へ平行移動してみる。直線 p_3 が、点 O_{14} と O_{24} の間を通るとき、相互作用は、S行列を用いて、

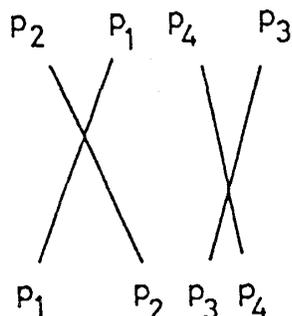


図5・4 2粒子ずつ、別々に相互作用する場合。

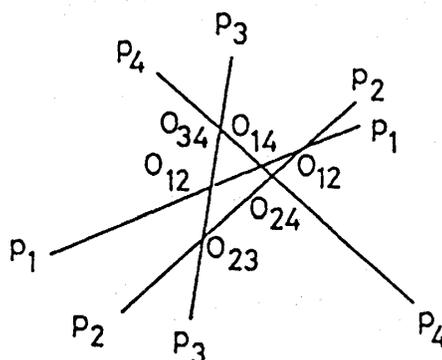


図5・5 4粒子が相互作用する1つの例。

$$\xi_{4321} = Y_{12}^{34} Y_{13}^{23} Y_{14}^{12} Y_{34}^{23} Y_{24}^{34} Y_{23}^{23} \xi_{1234}, \quad (5.14)$$

と表わされる。(5.13)式と(5.14)式を比較し、(5.12)式を用いると、

$$Y_{13}^{23} Y_{14}^{12} Y_{34}^{23} = Y_{34}^{12} Y_{14}^{23} Y_{13}^{12}, \quad (5.15)$$

であることがわかる。これは(5.11)の関係である。

以上の考察を一般化して、次の事がわかる。2粒子の衝突の順序がどのように変化しても、最初の状態と最後の状態が、それぞれ不変であるための必要十分条件は、関係式(5.10)～(5.12)が成り立つことである。(5.10)～(5.12)式を、S行列の因子化条件という。(5.9)式が、実際に(5.10)～(5.12)式を満たしていることは、容易に確かめられる。この因子化条件は、後方散乱モデルや近藤モデルの厳密解を導くとき、利用される。⁵⁾ また、2次元古典系のバクスターモデル¹⁴⁾を解くときにも、重要な働きをする。

§5.3 周期境界条件とヤンの解

波動関数に対する周期境界条件は、同じ座標 x_j 依存性をもつ項に対して課される。そこで ψ の中で同じ x_j に依存した指数関数の項を集めて、(5.3)式を

$$\psi_{YG} = \sum_{R \in S_N} \psi_R(\dots, x_j, \dots), \quad (5.16)$$

$$\psi_R(\dots, x_j, \dots) = \exp \left[i \sum_j k_{Rj} x_j \right] \theta(x_j) \sum_{Q \in S_N} \xi_{Q, RQ}, \quad (5.17)$$

と書き直す。周期境界条件は、

$$\begin{aligned} \psi_R(\dots, x_j = 0, \dots) &= \psi_R(\dots, x_j = L, \dots), \\ j &= 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (5.18)$$

である。ここで、 L は系の長さである。(5.18)式は、

$$\xi_{\tilde{Q}, R\tilde{Q}} = \exp [i k_{Rj} L] \xi_{Q, RQ}, \quad (5.19)$$

を意味する。ここで、 Q と \tilde{Q} は、

$$Q = Q(j+1), Q(j+2), \dots, QN, Q1, \dots, Qj, \quad (5.20)$$

$$\tilde{Q} = Q_j, Q(j+1), \dots, Q_N, Q_1, \dots, Q(j-1), \quad (5.21)$$

の順列である。

(5.8) 式の両辺に演算子 P^{ij} を掛ける。

$$\xi_{Q'P'} = P^{ij} \xi_{QP'} = P^{ij} Y_{P'i, P'j}^{i,j} \xi_{QP} \equiv X_{ij} \xi_{QP}, \quad (5.22)$$

ここで, $P \equiv RQ$ とおくと, $Pi = P'j$, $Qi = Q'j$ より,

$$Pi = RQi = RQ'j = P'j$$

となり, $P' = RQ'$ であるから, (5.22) 式は,

$$\xi_{Q', RQ'} = X_{ij} \xi_{QP}, \quad (5.23)$$

と書ける。これより,

$$\xi_{\tilde{Q}, R\tilde{Q}} = X_{j+1,j} X_{j+2,j} \dots X_{Nj} X_{1j} \dots X_{j-1,j} \xi_{Q, RQ}, \quad (5.24)$$

が得られる。

さらに,

$$\phi_{Q, RQ} \equiv (-1)^{\delta(Q)} \xi_{Q, RQ}, \quad (5.25)$$

を定義する。ここで, 記号 $(-1)^{\delta(Q)}$ は, Q が偶順列のとき +1, 奇順列のとき -1 を意味する。このとき, (5.19) 式, (5.24) 式より,

$$IZI \phi_{Q, RQ} = \exp [i k_{Rj} L] \phi_{Q, RQ}, \quad (5.26)$$

$$Z \equiv X_{Q(j+1), Qj} X_{Q(j+2), Qj} \dots X_{QN, Qj} X_{Q1, Qj} \dots X_{Q(j-1), Qj}, \quad (5.27)$$

$$I_{QQ'} \equiv (-1)^{\delta(Q)} \delta_{Q, Q'}.$$

を得る。ここで, R として恒等順列をとっても一般性を失わない。また, 添字 Q を落とす。

$IP^{ij} I = -P^{ij}$ を用いて,

$$Z'_j \phi = \exp [i k_j L] \phi, \quad (5.28)$$

$$Z'_j = X'_{j+1,j} X'_{j+2,j} \cdots X'_{Nj} X'_{1j} \cdots X'_{j-1,j} \quad (5.29)$$

$$X'_{ij} = \frac{i(k_i - k_j) - 2c P^{ij}}{i(k_i - k_j) - 2c} \quad (5.30)$$

を得る。

前に述べたヤング図形(図5・1)が表わす対称性を満足する波動関数を探す。ここでは座標関数 ψ を考えているので、同じスピンをもつ電子の交換に対し、波動関数が反対称となる ϕ すなわち、同じスピンの粒子について対称な ϕ を求める。このような ϕ として、Yang⁸⁾ は次のものを見出した。整数 y_j を、 M 個の \downarrow スピンをもつ粒子の中で、 j 番目の粒子の位置とし、 M 個の相異なる数 A_1, A_2, \dots, A_M をとると、

$$\phi(y_1, \dots, y_M) = \sum_{P \in S_M} A_P f(A_{P1}, y_1) \cdots f(A_{PM}, y_M), \quad (5.31)$$

$$f(A_r, y_\delta) = \prod_{j=-\infty}^{y_\delta-1} \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_{j+1} - A_r) + c} \quad (5.32)$$

は、係数 A_P を適当に定めることにより、(5.28) 式の固有関数となり、かつ、上の条件を満足する。以下、 A_P の満たすべき関係を定め、(5.28) 式の固有値を求める。ただし、

$$k_m = k_{m+N} \quad (m = 1, 2, \dots, N)$$

とする。

まず、 \uparrow スピン同士の交換に対し、 ϕ が不変なことは自明である。つぎに、 \downarrow スピン同士の交換に対し ϕ が不変となるように、 A_P と $A_{P'}$ の関係を定める。ここで、 $P' \delta = P \gamma$ 、 $P' \gamma = P \delta$ とする。 $X'_{r\delta}$ を ϕ に作用させると、(5.22) 式からわかるように、座標と共に、運動量も交換される。このことを記号 $*$ を用いて、

$$X'_{r\delta} \phi(\dots, y_\gamma, y_\delta, \dots) = \phi^*(\dots, y_\delta, y_\gamma, \dots), \quad (5.33)$$

と表わす。上式の右辺が、 $\phi(\dots, y_\gamma, y_\delta, \dots)$ に等しいはずなので、

$$\begin{aligned} & A_P f(A_\gamma, y_\gamma) f(A_\delta, y_\delta) + A_{P'} f(A_\delta, y_\gamma) f(A_\gamma, y_\delta) \\ &= A_P f^*(A_\gamma, y_\delta) f^*(A_\delta, y_\gamma) + A_{P'} f^*(A_\delta, y_\delta) f^*(A_\gamma, y_\gamma), \end{aligned} \quad (5.34)$$

が成り立つ。ここで、記号 $*$ は、(5.33) 式のとおり意味である。(5.34) 式に (5.32) 式

を用い、運動量の並び方に注意すると、

$$\begin{aligned} A_P + A_{P'} & \frac{i(k_r - A_r) - c}{i(k_\delta - A_r) + c} \times \frac{i(k_\delta - A_\delta) + c}{i(k_r - A_\delta) - c} \\ & = A_P \frac{i(k_r - A_r) + c}{i(k_\delta - A_r) + c} \times \frac{i(k_\delta - A_\delta) - c}{i(k_r - A_\delta) - c} \\ & \quad + A_{P'} \frac{i(k_\delta - A_r) - c}{i(k_\delta - A_r) + c} \times \frac{i(k_r - A_\delta) + c}{i(k_r - A_\delta) - c}, \end{aligned}$$

が成り立つ。これより、次の関係を得る。

$$A_{P'} = \frac{i(A_r - A_\delta) - 2c}{i(A_r - A_\delta) + 2c} A_P. \quad (5.35)$$

さて、固有方程式(5.28)を考察する。まず、(5.28)式で移動する j 番目のスピンの \uparrow のとき、左隣の y_r の位置のスピンを \downarrow とすると、

$$X'_{rj} \phi(\dots, y_r, \dots) = \phi^*(\dots, y_r + 1, \dots), \quad (5.36)$$

となる。上式左辺の $\phi(\dots, y_r, \dots)$ では、運動量が、 $\dots, k_{y_r-1}, k_{y_r}, k_{y_j}, \dots$ と並び、右辺の $\phi^*(\dots, y_r + 1, \dots)$ では、 $\dots, k_{y_r-1}, k_{y_j}, k_{y_r}, \dots$ と並んでいる。 \uparrow スピンが順次移動し、その座標が $1 \rightarrow N$ となると、 M 個の \downarrow スピンの座標が1つつつ下がる。すなわち、

$$\phi^*(y_1 + 1, \dots, y_M + 1) \rightarrow \phi^*(y_1, \dots, y_M),$$

となる。 $\phi^*(\dots, y_r, \dots)$ の中の $f^*(A_r, y_r)$ は、

$$\begin{aligned} f^*(A_r, y_r) & = \dots \frac{i(k_{r-1} - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c} \times \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_r - A_r) + c} \\ & = f(A_r, y_r) \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c}, \end{aligned}$$

と表わせるから、

$$\begin{aligned} Z'_j \phi & = X'_{j+1,j} X'_{j+2,j} \dots X'_{Nj} X'_{1j} \dots X'_{(j-1)j} \phi(y_1, \dots, y_M) \\ & = \phi^*(y_1, \dots, y_M) \\ & = \prod_r \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c} \phi(y_1, \dots, y_M), \end{aligned} \quad (5.37)$$

杉山忠男

を得る。

つぎに、移動するスピンの座標が \downarrow のときを考える。このとき、次の3種類の因子が現われる。

(i) 上と同じもの、すなわち、

$$\prod_{\substack{r=1 \\ r \neq j}}^M \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c}。$$

(ii) 移動する \downarrow スピンの座標が $1 \rightarrow N$ となるとき、

$$\begin{aligned} f(A_j, 1) &= \prod_{\ell=-\infty}^0 \frac{i(k_\ell - A_j) - c}{i(k_{\ell+1} - A_j) + c} \\ &= \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq j}}^N \frac{i(k_\ell - A_j) + c}{i(k_\ell - A_j) - c} \times \prod_{\ell=-\infty}^{N-1} \frac{i(k_\ell - A_j) - c}{i(k_{\ell+1} - A_j) + c} \\ &= \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq j}}^N \frac{i(k_\ell - A_j) + c}{i(k_\ell - A_j) - c} f(A_j, N), \end{aligned}$$

ここで、 $k_0 \equiv k_N$ を用いた。

(iii) \downarrow スピンが $1 \rightarrow N$ のとき、 A_p の変化、

$$A_p \rightarrow A_{p'} = \prod_{\substack{\delta=1 \\ \delta \neq r}}^M \frac{i(A_\delta - A_r) + 2c}{i(A_\delta - A_r) - 2c} A_p。$$

以上より、

$$\begin{aligned} Z'_j \phi &= \prod_r \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c} \prod_\ell \frac{i(k_\ell - A_r) + c}{i(k_\ell - A_r) - c} \\ &\quad \times \prod_{\substack{\delta=1 \\ \delta \neq r}}^M \frac{i(A_\delta - A_r) - 2c}{i(A_\delta - A_r) + 2c} \phi, \end{aligned} \tag{5.38}$$

を得る。

(5.37) 式と (5.38) 式より、(5.28) 式は、

$$e^{ik_j L} = \prod_r \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c}, \tag{5.39}$$

となり、補助条件、

$$-\prod_{\delta} \frac{i(A_{\delta} - A_r) - 2c}{i(A_{\delta} - A_r) + 2c} = \prod_{l} \frac{i(k_l - A_r) - c}{i(k_l - A_l) + c} \quad (5.40)$$

が課される。(5.40)式左辺のマイナス符号は、 $\delta = r$ のところから現われる。

以上の導出では、 X'_{ij} の具体的な表現(5.30)を用いることなしに、 ϕ の形と対称性だけから(5.39)式、(5.40)式を導いた。最後に、 X'_{ij} の表現(5.30)が、 ϕ の形(5.31)とコンシステントであることを確かめる。それには、 \uparrow スピンの移動する場合の表式(5.37)の成立を確かめれば十分である。(5.30)式と(5.32)式より、次式が書ける。

$$X'_{rj} f(A_r, y_r) = \frac{i(k_r - k_j)}{i(k_r - k_j) - 2c} f(A_r, y_r) - \frac{2c}{i(k_r - k_j) - 2c} f(A_r, y_r + 1), \quad (5.41)$$

ここで、運動量の並び方は、 \dots, k_r, k_j, \dots であるから、

$$f(A_r, y_r + 1) = \frac{i(k_r - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c} f(A_r, y_r), \quad (5.42)$$

が成り立つ。(5.42)式を(5.41)式へ代入して、

$$X'_{rj} f(A_r, y_r) = \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c} f(A_r, y_r), \quad (5.43)$$

を得る。これより、ただちに、(5.37)式を得ることができる。移動するスピンのときは上のこと以外、前と同様にして、(5.38)式を得ることができる。

§5.4 ヤン・ゴードンモデルのエネルギー

運動量 k_j に対する条件式(5.39)、(5.40)を用いて、ヤン・ゴードンモデルのエネルギーの表式を、結合定数 c が正の場合について導出する。ただし、スピン波の運動量と考えられる A_{α} は、常に定数とする。実際、有限温度では、複素数の A_{α} が重要な働きをするが、基底状態では、 A_{α} は実数となる。^{15), 16)}

擬運動量 k_j が複素数になる可能性を考える。 a_{α} 、 f_{α} を実数として、

$$k_j = a_{\alpha} + i f_{\alpha}$$

とおくと、(5.39)式の左辺の絶対値は、 f_{α} の符号 $f_{\alpha} \geq 0$ に応じて、

$$|e^{ik_j L}| = |e^{ia_{\alpha} L} \cdot e^{-f_{\alpha} L}| \leq 1, \quad (5.44)$$

杉山忠男

となる。一方、右辺の任意の1つの項の絶対値は、

$$\left| \frac{i(k_j - A_r) - c}{i(k_j - A_r) + c} \right| = \left| \frac{i(a_\alpha - A_\alpha) - (c + f_\alpha)}{i(a_\alpha - A_\alpha) + (c - f_\alpha)} \right| \geq 1, \quad (5.45)$$

となり、(5.39)式は $f_\alpha \equiv 0$ である限り、満たされない。したがって、 $c > 0$ のとき、 k_j は実数でなければならない。

(5.39)式、(5.40)式から、系のエネルギーを与える積分方程式を導く。まず、(5.39)式の両辺の対数を取り、

$$k_j = \frac{2\pi}{L} I_j - \frac{2}{L} \sum_{r=1}^M \tan^{-1} \frac{k_j - A_r}{c}, \quad (5.46)$$

を得る。ここで、 I_j は、 M が偶数のとき整数であり、 M が奇数のとき、半整数をとる。

(5.40)式の両辺の対数をとると、

$$-\frac{2}{L} \sum_{j=1}^N \tan^{-1} \frac{k_j - A_r}{c} = \frac{2\pi}{L} J_r - \frac{2}{L} \sum_{\delta=1}^M \tan^{-1} \frac{A_\delta - A_r}{2c}, \quad (5.47)$$

となる。つぎに、 k と A の分布関数を

$$\rho(k) = 1/L(k_{j+1} - k_j), \quad \sigma(A) = 1/L(A_{r+1} - A_r), \quad (5.48)$$

によって定義する。(5.46)式と(5.47)式の両辺の差分を取り、分布関数(5.48)を用いて、熱力学極限($N, M \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$)で、

$$2\pi\rho(k) = 1 + \int_{-B}^B \frac{2c\sigma(A)}{c^2 + (k - A)^2} dA, \quad (5.49)$$

$$2\pi\sigma(A) + \int_{-B}^B \frac{4c\sigma(A')}{4c^2 + (A - A')^2} dA' = \int_{-Q}^Q \frac{2c\rho(k)}{c^2 + (A - k)^2} dk, \quad (5.50)$$

を得る。これは、 k と A に対する積分方程式である。分布関数には、さらに、系の粒子数によって、次の条件が課される。

$$n \equiv \frac{N}{L} = \int_{-Q}^Q \rho(k) dk, \quad (5.51)$$

$$x \equiv \frac{M}{L} = \int_{-B}^B \sigma(A) dA. \quad (5.52)$$

系のエネルギーは、

$$f(x, n - x; c) \equiv \frac{E}{L} = \int_{-Q}^Q k^2 \rho(k) dk, \quad (5.53)$$

となる。(5・49)～(5・53)式は、Yang⁸⁾によって導かれたものである。

さらに、ヤン・ゴードンモデルで $c < 0$ の場合、また、後方散乱モデル、近藤モデルに対するベータ仮説の方法については、他の文献^{1)-6), 9), 15), 16)}を見ていただきたい。今後、1次元電子系多体問題の、より正確な理解に、この方法は大変役立つものと期待される。

第5章 参考文献

- 1) A. A. Belavin, Phys. Lett. 87 B (1979), 117.
- 2) N. Andrei and J. H. Lowenstein, Phys. Rev. Lett. 43 (1979), 1698.
- 3) N. Andrei, Phys. Rev. Lett. 45 (1980), 379.
- 4) P. B. Wiegmann, J. of Phys. C14 (1981), 1463.
- 5) N. Andrei, K. Furuya and J. H. Lowenstein, Rev. Mod. Phys. 55 (1983), 331.
- 6) 近藤淳, 金属電子論(物理学選書16)(裳華房, 1983).
- 7) H. Bethe, Z. Phys. 71 (1931), 205.
- 8) C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. 19 (1967), 1312.
- 9) M. Gaudin, Phys. Lett. 24 A (1967), 55.
- 10) L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Nonrelativistic Theory)* Third Edition, Pergamon Press Ltd. (1977), P. 232.
- 11) 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝, 応用群論一群表現と物理学一, (裳華房, 1976).
- 12) B. L. van der Waerden, *Group Theory and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1974).
- 13) A. B. Zamolodchikov and A. B. Zamolodchikov, Ann. of Phys. 120 (1979), 253.
- 14) R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* Academic Press (1983).
- 15) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. 44 (1970), 348.
- 16) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. 46 (1971), 1388.

謝 辞

本稿の内容に関し、有益な楽しい議論をしていただいた三宅哲先生、及び、岡本清美博士に感謝いたします。特に、第5章は、三宅先生の示唆に負うところ多大です。その他、いちいち名前は上げませんが、本稿は多くの方々との価値ある議論にもとづいています。ここで、改めて感謝の意を表します。