森公式の連分数解と closed-form 解

大阪大学大学院 基礎工学研究科　物性物理科学分野　　沢 田　功

The continued-fraction and the closed-form solutions to the Mori formula

Isao Sawada, sawada@eagle.mp.es.osaka-u.ac.jp
Division of Materials Physics, Graduate School of Engineering Science, Osaka Univ.

森公式における解析解

森公式 [1] とは、$PO \equiv [(O, A^\dagger)(A, A^\dagger)^{-1}]\ A$ で定義される射影演算子 P を用いて、運動方程式（今は、Heisenberg 方程式）を統計力学の礎である generalized Langevin 方程式（GLE）に変形する変換公式であるが、変換後の GLE をそう呼んでいる。演算子 $A(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\ A\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}, A = A(0)$ に対する森公式は次の通り。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\ [H, A(t)]_- \ \equiv\ \mathrm{i}LA(t)\ =\ -\int_0^t \varphi_A(t-s)\ A(s)\ \mathrm{d}s\ +\ f_A(t) \tag{1}$$

但し、今は内積にカノニカル相関 $(B(t), C)\ \equiv\ \beta^{-1}\int_0^\beta \langle\, B(t-\mathrm{i}\hbar\lambda)C\rangle\, \mathrm{d}\lambda - \langle B(t)\rangle\langle C^\dagger\rangle$ をとる。系に内在した揺らぎ $f_A(t) \equiv \mathrm{e}^{(1-P)\ \mathrm{i}Lt} f_A,\ f_A = \dot{A} \equiv \mathrm{i}LA$ が Heisenberg 方程式とは異なる時間発展をするため、$f_A(t)$ の記憶関数 $\varphi_A(t) = (f_A(t), f_A^\dagger)(A, A^\dagger)^{-1} = (2\pi\mathrm{i})^{-1}\oint \mathrm{d}z\ \mathrm{e}^{zt}\ \overline{\varphi}_A(z)$ については森による連分数解 [2] が知られていた。

$$\overline{\varphi}_A(z)\ =\ \cfrac{\Delta_1}{z\ +\ \cfrac{\Delta_2}{z\ +\ \cfrac{\Delta_3}{z\ +\ \cdots}}} \tag{2}$$

静的な量 $\Delta_n \equiv (f_n,\ f_n^\dagger)\ (f_{n-1},\ f_{n-1}^\dagger)^{-1}$ は、$f_0 = A$、$\Delta_0 = 0$ として、隣接三項間漸化式 $f_{n+1}\ =\ \mathrm{i}L\ f_n\ +\ \Delta_n\ f_{n-1}$ [3] を用いて表現できる。

一方、(2) と等価な closed-form 解 [4, 5] が、松原振動数を $\omega_n = 2n\pi T$ とする温度グリーン関数 $\chi_A(\mathrm{i}\omega_n) = \mathrm{V}^{-1}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_n\tau}(-)\langle \mathrm{T}_\tau A^\dagger(\tau)\ A(0)\rangle$ を解析接続して得られる、遅延応答関数 $\chi_{AA}(\omega^+) \equiv \chi'_{AA}(\omega^+) + \mathrm{i}\chi''_{AA}(\omega^+)$ を用いて次のように与えられる。

$$\overline{\varphi}_A(-\mathrm{i}\omega^+) = \frac{-\ \psi_{\dot{A}}(-\mathrm{i}\omega^+)}{1\ -\ \dfrac{\psi_{\dot{A}}(-\mathrm{i}\omega^+)}{\mathrm{i}\omega^+}},\quad \psi_{\dot{A}}(-\mathrm{i}\omega^+) = -\ [W]^{-1}\frac{\chi_{\dot{A}\dot{A}}(\omega^+) - \chi_{\dot{A}\dot{A}}(0^+)}{-\mathrm{i}\omega^+} \tag{3}$$

但し、$\omega^+\ \equiv\ \lim_{\epsilon\to 0^+}(\omega\ +\ \mathrm{i}\epsilon)$, $[W]\ \equiv\ \beta(A, A^\dagger)/\mathrm{V}\ =\ -\chi'_{AA}(0^+)$, V は系の体積である。$\langle f_A(t)\rangle = 0$ を満たす、揺らぎの内積で表現できている記憶関数は、一般化された揺動散逸定理を記述しており、線形応答理論に基づく緩和関数 $\Xi(t) = (A(t), A^\dagger)(A, A^\dagger)^{-1}$ と次の関係をもつ。

$$\Xi_A(z) = \frac{1}{z\ +\ \overline{\varphi}_A(z)} \tag{4}$$

連分数解 (2) の応用：高温極限における S=1/2 交替鎖の動力学

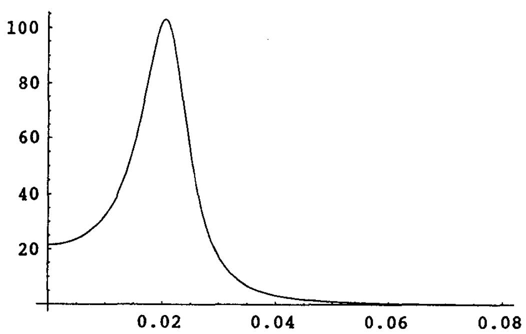
緩和関数 $\Xi(t)$ は $T=\infty$ において自己相関関数 $\langle A(t)A^{\dagger}\rangle = \mathrm{Tr}\{1\ A(t)A^{\dagger}\}/\mathrm{Tr}\{1\}$ に収束する。S=1/2 交替鎖における、ある格子点 j にある spin-pair の z 成分、$A=S^{z}_{j,1}+S^{z}_{j,2}$の自己相関関数を計算する。系のハミルトニアンを

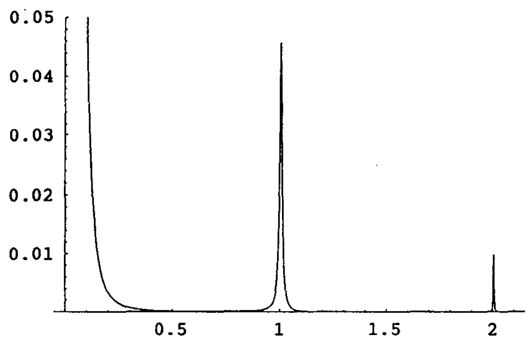
$$H \;=\; \sum_{i} \boldsymbol{S}_{i,1}\,\boldsymbol{S}_{i,2} \;-\; \alpha \sum_{i} \boldsymbol{S}_{i-1,2}\,\boldsymbol{S}_{i,1} \tag{5}$$

と書く。添字 1,2 は格子点にある左右のスピンを表わす。先の漸化式を用いると、$T=\infty$ ではαの奇数次の寄与はなく、$\Delta_1=\alpha^2/2, \Delta_2=1+\alpha^2/2, \Delta_3=(3/4)(4+3\alpha^2)/(2+\alpha^2)$ である。

(A)　$\alpha^2 \ll 1$ の時、

$$\Delta_4=\frac{3}{2}+\frac{91}{48}\alpha^2,\ \Delta_5=1+\frac{299}{48}\alpha^2,\ \Delta_6=\frac{2393}{96}\alpha^2,\ \Delta_7=\frac{73949}{14358},\ \Delta_{n\geq 8}=O(1) \tag{6}$$





$\Xi_A^{'}(-\mathrm{i}\omega^{+})$ as a function of ω at $T=\infty$ for $|\alpha|=0.05$

となり、(4) を用いて $\Xi_A^{'}(-\mathrm{i}\omega^{+})$ には、上図に示す通り、原点中心の散乱 peak 上に、$|\omega|\simeq|\alpha/2|$, 1, 2 が中心の散乱 peak が出現する。これは、$\alpha=0$ で (5) の保存量であった A による $\Xi_A^{'}(-\mathrm{i}\omega^{+})=\delta(\omega)$ がαの増加で幅をもつと同時に、$\{\Delta_n\}$ におけるΔ_6の急激な落ち込みが 3 つの peaks を生んだと解析できる。$\{f_n\}$ を見れば、格子点 j が仮想的に得たエネルギーが、2 格子点 $(j-1,j)$, $(j,j+1)$、3 格子点 $(j-2,j-1,j)$, $(j-1,j,j+1)$, $(j,j+1,j+2)$ 内における single or double singlet-triplet の励起に費やされていることが理解できる。半値幅 $\simeq|\alpha|$ は $\Delta_{n\geq 8}=\Delta_7$ の近似により生じる。

(B)　$\alpha^2 \gg 1$ の時には、

$$\Delta_4=\frac{5}{3}\alpha^2+\frac{179}{72},\qquad \Delta_{n\geq 5}=O(\alpha^2) \tag{7}$$

となり、$\Xi_A^{'}(-\mathrm{i}\omega^{+})$ には、$|\omega|\simeq 0$, $|\alpha|$ が中心の散乱 peak (半値幅 $\simeq|1/\alpha|$ は $\Delta_{n\geq 5}=\Delta_4$ の近似により生じる。) が同程度の強度で出現する。

(A)、(B) 共に、$\{\Delta_n\}$ の振る舞いに、ある次数 l [(A) で $l=6$, (B) で $l=3$] で一時的な鋭い減少が見られる。こうした $\Delta_l=0$ 様の傾向が、一様なスピン鎖にない、交替鎖の特徴であり、上述の Heisenberg 模型に限らず、XY 模型や Ising 模型でも、$A=S^{z}_{j,1}+S^{z}_{j,2}$ の動力学に見出される。

closed-form 解 (3) の応用：T=0 の 2-バンド電子系における電流演算子の量子揺らぎ (1) 中の揺らぎ $f_A(t)$ の性質を調べるために、(3) の記憶関数を計算する。相互作用のない 2-バンド電子系における、正電荷を e とした電流演算子 $J = (e/\hbar)\sum_{\mathbf{k}\sigma}[\ \nabla_{\mathbf{k}} t(\mathbf{k}) p^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c.\ ]$ の運動を追う。銅と酸素が作る模型は

$$H = \epsilon_d \sum_{i\sigma} d^{\dagger}_{i\sigma} d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{\mathbf{k}\sigma} p^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} p_{\mathbf{k}\sigma} + N_{\mathrm{L}}^{-1/2} \sum_{i\mathbf{k}\sigma} \Big(\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} t(\mathbf{k}) p^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{i\sigma} + h.c.\ \Big) \tag{8}$$

で表わされ、$p^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ 及び $d^{\dagger}_{i\sigma} = N_{\mathrm{L}}^{-1/2}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} d^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ は O $2p_\sigma$ 結合軌道、Cu $3d_{x^2-y^2}$ のワニエ軌道におけるホールの生成演算子、$t(\mathbf{k}) \equiv [W(\mathbf{k})]^{1/2}$は格子間隔 a、最隣接遷移積分 t_{dp}を用いて書ける。O 及び Cu の化学ポテンシャルから測定したエネルギーレベルがϵ_p、ϵ_dで、バンドギャップは $\Delta \equiv \epsilon_p - \epsilon_d$である。対角化された (8)、$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma\gamma=\pm} E_\gamma(\mathbf{k})\ a^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma\gamma} a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}$は、分散 $E_\gamma(\mathbf{k}) \equiv (1/2)[\epsilon_p + \epsilon_d + \gamma\sqrt{\Delta^2 + 4W(\mathbf{k})}]$ を持ち 、$\Delta_\gamma(\mathbf{k}) = [\ (E_\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_d)^2 + W(\mathbf{k})\ ]^{1/2}$ として、$a^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma\gamma} = [(E_\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_d)/\Delta_\gamma(\mathbf{k})] p^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} + [t(\mathbf{k})/\Delta_\gamma(\mathbf{k})] d^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ である。したがって、(3) に必要な非保存成分はバンド間成分のみで記述できる。

$$\dot{J} = \dot{J}_{\mathrm{inter}} = \frac{e}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} F(\mathbf{k})\ [E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k})]\ (\ \mathrm{i}\ a^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma+} a_{\mathbf{k}\sigma-} + h.c.\ ) \tag{9}$$

但し、$F(\mathbf{k}) = (1/2)\sum_{\eta=\pm} [\Delta_\eta(\mathbf{k})/\Delta_{-\eta}(\mathbf{k})]\ \nabla_{\mathbf{k}} E_\eta(\mathbf{k})$ である。

$T = 0$ で化学ポテンシャルが $E_-(\mathbf{k})$ 内にあるとき、系の特徴的なエネルギーは $\omega_- \equiv E_+(\mathbf{k}_{\mathrm{F}}) = \epsilon_d + \epsilon_p$ と $\omega_+ \equiv E_+^{\mathrm{top}} - E_-^{\mathrm{bot}} = [\Delta^2 + 4w_d]^{1/2}$ 間にある。但し、d を系の次元として、$w_d \equiv (2t_{dp})^2 d$ である。$d = 2$ で $t(\mathbf{k}) = 2t_{dp} a[({k_x}^2 + {k_y}^2)/2\pi]^{1/2}$の模型をとると、$\hbar = e = a = 1$ の単位系で、$T = 0$ における記憶関数は次式で与えられる。

$$\varphi_J(t) = \frac{2}{\pi}\int_{\omega_-}^{\omega_+} \mathrm{d}\omega\ \cos\omega t\ \Delta^2 \frac{4W_J w_2\ \omega^2}{[4w_2 P_J(\omega)]^2\ +\ \Delta^4}\ \Theta(|\omega|) \tag{10}$$

ここで、$4w_2 P_J(\omega) \equiv 4W_J w_2\ \omega - (\Delta^2/\pi)F(\omega)$、$W_J w_2 \equiv 2\epsilon_p\epsilon_d/\pi\omega_- + (\Delta^2/2\pi)(\omega_-^{-1} - \omega_+^{-1})$、$F(\omega) \equiv \log|(\omega_+ - \omega)(\omega_- + \omega)/(\omega_+ + \omega)(\omega_- - \omega)|$、そして、$\Theta(|\omega|) \equiv \theta(|\omega| - \omega_-)\theta(\omega_+ - |\omega|)$ である。(10) の数値計算 [5] は、特徴的時間が $t_0 \equiv \omega_+^{-1}$で、$t \lesssim t_0$では$\varphi_A(t) - \varphi_A(0^+) \propto -t^2$、$t >> t_0$では$t^{-1}$の包絡線を示している。(9) のバンド間遷移は外場による励起ではなく、自発的は遷移をあらわし、スペクトルは (10) の$\Theta(|\omega|)$ によって制限される。したがって、この揺らぎは白色の Langevin force とは異なり、記憶関数が時間のべきで特徴付けられる、自発的に強く色づいた揺らぎであると結論できる。同様の振る舞いは成分別の粒子数演算子 $N_d = \sum_{\mathbf{k}\sigma} d^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma}$, $N_p = \sum_{\mathbf{k}\sigma} p^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} p_{\mathbf{k}\sigma}$に対する揺らぎついても見出されている。

[1] H. Mori: Prog. Theor. Phys. **33** (1965) 423
[2] H. Mori: Prog. Theor. Phys. **34** (1965) 399
[3] M. Howard Lee: Phys. Rev. B **26** (1982) 2547
[4] J. Okada, I. Sawada and Y. Kuroda: J. Phys. Soc Jpn. **64** (1995) 4092
[5] I. Sawada: J. Phys. Soc Jpn. **66** (1997) 2218
[6] I. Sawada: J. Phys. Soc Jpn. **65** (1996) 3100