

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 $A(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$, $A = A(0)$ に対する森公式は次の通り。

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)]_- \equiv iLA(t) = - \int_0^t \varphi_A(t-s) A(s) ds + f_A(t) \quad (1)$$

但し、今は内積にカノニカル相関 $(B(t), C) \equiv \beta^{-1} \int_0^\beta \langle B(t-i\hbar\lambda)C \rangle d\lambda - \langle B(t) \rangle \langle C^\dagger \rangle$ をとる。系に内在した揺らぎ $f_A(t) \equiv e^{(1-P)} iL t f_A$, $f_A = \dot{A} \equiv iLA$ 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 $\varphi_A(t) = (f_A(t), f_A^\dagger)(A, A^\dagger)^{-1} = (2\pi i)^{-1} \oint dz e^{zt} \bar{\varphi}_A(z)$ については森による連分数解 [2] が知られていた。

$$\bar{\varphi}_A(z) = \frac{\Delta_1}{z + \frac{\Delta_2}{z + \frac{\Delta_3}{z + \dots}}} \quad (2)$$

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 $f_{n+1} = iL f_n + \Delta_n f_{n-1}$ [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 $\chi_A(i\omega_n) = V^{-1} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau A^\dagger(\tau) A(0) \rangle$ を解析接続して得られる、遅延応答関数 $\chi_{AA}(\omega^+) \equiv \chi'_{AA}(\omega^+) + i\chi''_{AA}(\omega^+)$ を用いて次のように与えられる。

$$\bar{\varphi}_A(-i\omega^+) = \frac{-\psi_A(-i\omega^+)}{1 - \frac{\psi_A(-i\omega^+)}{i\omega^+}}, \quad \psi_A(-i\omega^+) = -[W]^{-1} \frac{\chi_{AA}(\omega^+) - \chi_{AA}(0^+)}{-i\omega^+} \quad (3)$$

但し、 $\omega^+ \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\omega + i\epsilon)$, $[W] \equiv \beta(A, A^\dagger)/V = -\chi'_{AA}(0^+)$, 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。

$$\bar{\Xi}_A(z) = \frac{1}{z + \bar{\varphi}_A(z)} \quad (4)$$

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

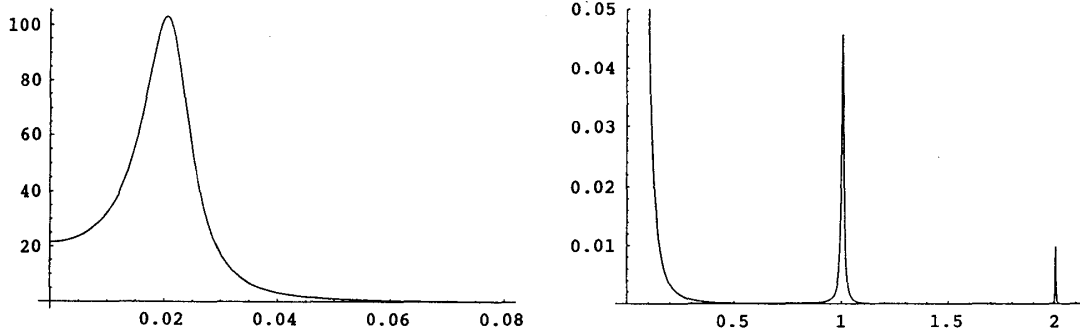
緩和関数 $\Xi(t)$ は $T = \infty$ において自己相関関数 $\langle A(t)A^\dagger \rangle = \text{Tr}\{1 A(t)A^\dagger\}/\text{Tr}\{1\}$ に収束する。 $S=1/2$ 交替鎖における、ある格子点 j にある spin-pair の z 成分、 $A = S_{j,1}^z + S_{j,2}^z$ の自己相関関数を計算する。系のハミルトニアンを

$$H = \sum_i S_{i,1} S_{i,2} - \alpha \sum_i S_{i-1,2} S_{i,1} \quad (5)$$

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、

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



$\Xi'_A(-i\omega^+)$ as a function of ω at $T = \infty$ for $|\alpha| = 0.05$

となり、(4) を用いて $\Xi'_A(-i\omega^+)$ 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 $\Xi'_A(-i\omega^+) = \delta(\omega)$ 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、

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

となり、 $\Xi'_A(-i\omega^+)$ 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、 $A = S_{j,1}^z + S_{j,2}^z$ 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 $J = (e/\hbar) \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\nabla_{\mathbf{k}} t(\mathbf{k}) p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c.]$ の運動を追う。銅と酸素が作るモデルは

$$H = \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{\mathbf{k}\sigma} p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma} + N_L^{-1/2} \sum_{i\mathbf{k}\sigma} \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} t(\mathbf{k}) p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c. \right) \quad (8)$$

で表わされ、 $p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ 及び $d_{i\sigma}^\dagger = N_L^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ は $O\ 2p_\sigma$ 結合軌道、 $\text{Cu } 3d_{x^2-y^2}$ 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)、 $H = \sum_{\mathbf{k}\sigma\gamma=\pm} E_\gamma(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}$ 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、 $a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}^\dagger = [(E_\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_d)/\Delta_\gamma(\mathbf{k})] p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + [t(\mathbf{k})/\Delta_\gamma(\mathbf{k})] d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ 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。

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

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 $\omega_- \equiv E_+(\mathbf{k}_F) = \epsilon_d + \epsilon_p$ と $\omega_+ \equiv E_+^{\text{top}} - E_-^{\text{bot}} = [\Delta^2 + 4w_d]^{1/2}$ 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 $t(\mathbf{k}) = 2t_{dp} a [(k_x^2 + k_y^2)/2\pi]^{1/2}$ のモデルをとると、 $\hbar = e = a = 1$ の単位系で、 $T = 0$ における記憶関数は次式で与えられる。

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

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 $\varphi_A(t) - \varphi_A(0^+) \propto -t^2$ 、 $t \gg t_0$ 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 $N_d = \sum_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma}$ 、 $N_p = \sum_{\mathbf{k}\sigma} p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma}$ に対する揺らぎに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