

Quantum Field Theory of One Dimensional Electron-Lattice Systems

長崎総合科学大学 北村 豊幸
(旧：長崎造船大学)

1. 序

Peiels転移が注目されてから、一次元電子-格子系の理論的研究が現象論の立場からも、微視的立場からもなされてきた。しかし、今までの一次元電子-格子系の微視理論では、イオンの与えられた格子点での揺ぎを量子化して phononを導入しているが、イオンそのものの量子化はされていない。また、最近、一次元系電気伝導度におけるCharge Density Wave (CDW) の振舞いが注目されている、福山によってCDWの dynamics を表現するハミルトニアンが提出され impurity pinningの効果などが論じられている¹⁾。しかし、そこでもハミルトニアンはCDWの phaseの揺ぎを量子化して得られているが、系を構成する電子・イオンの量子化からは出発していない。従って、CDWのある電子-格子系において徹底した場の量子論を適用して、phasonやphononの起因とその物理的役割を明らかにする課題が残っている。

最近、アルバータ大学の梅沢等²⁾を中心に一連のボーズ凝縮を boson method の汎関数形式によって取扱って、場の量子論の立場から系の巨視的振舞いの解明に成功している。boson methodの汎関数形式の特徴は次のようである：1) 自発的対称性の破れの効果を、対称性の破れを誘導する無限小項をLagrangianに付加することによって導入する。この対称性を破るLagrangianの存在のため系のもともとの対称性の要請から導かれるWard-高橋恒等式(WTI)において、この対称性を破るLagrangianを零とおくことによってGoldstoneの定理を導くこと。2) 準粒子描像の立場からHilbert空間は準粒子と名づけられる自由量子で張られる、Heisenberg演算子はこのHilbert空間の行列要素で記述する。実際には、WTIを最大限に使って求めた準粒子のnormal積の展開によってHeisenberg演算子を記述する。この関係をdynamical mapといい、いつも弱収束である。3) 次にdynamical rearrangementについて検討する。即ち、準粒子の適当な変換によって、もとの対称性が回復することを示すことである。この要請はdynamical mapの型をも厳

しく制限する。4) bose凝縮における collective mode に関係する準粒子を変換して、時空に依存する基底状態をつくる。この状態が巨視的対象である。この変換は boson 変換と呼ばれこの変換によって Heisenberg 方程式は不変に保たれる。

私達と梅沢等³⁾はこの boson methodを結晶に適用した。彼等は WT I から求めた Goldstone boson が phonon であり、phonon に bose 変換を施し、巨視的対象となる結晶の転移を解明している。

そこで、この稿では boson method を CDW のある一次元電子-格子系に適用してみよう。CDW と格子系の形成は空間的並進対称性の自発的破れをひき起こす。空間的並進対称性を保持する系の Lagrangian $\mathcal{L}(x)$ に、CDW と格子系を誘導する次の二つの無限小項を付加する：

$$\mathcal{L}_\epsilon(x) = \epsilon_A u(x) \Psi^+(x) \Psi(x) + \epsilon_B v(x) \Phi^+(x) \Phi(x) \quad (1.1)$$

ここで、 $\Psi(x)$ 、 $\Phi(x)$ はそれぞれ電子とイオンの量子化された場である。今、

$$m(x) \equiv \Psi^+(x) \Psi(x), \quad n(x) \equiv \Phi^+(x) \Phi(x) \quad (1.2)$$

と定義したとき、 $u(x)$ 、 $v(x)$ はそれぞれ $m(x)$ 、 $n(x)$ の基底状態の値である：

$$\langle 0 | m(x) | 0 \rangle \equiv u(x), \quad \langle 0 | n(x) | 0 \rangle \equiv v(x) \quad (1.3)$$

CDW と格子の形成のため、 $u(x)$ と $v(x)$ はそれぞれ基本周期 a 、 b の周期関数とする：

$$u(x+a) = u(x), \quad v(x+b) = v(x) \quad (1.4)$$

完全な CDW 系においては、 $u(x) = \bar{\rho} + \rho_0 \cos Qx$ ($\bar{\rho}$: 定数, ρ_0 : 振幅, $Q = \frac{2\pi}{a} = 2k_F$, k_F : Fermi 運動量) であるが；ここでは一般的に基本周期 a の関数とする。

こうして CDW による $u(x)$ とイオンの格子による $v(x)$ との二つの空間的並進対称性の破れに伴って二つの Goldstone boson が発生する。この二つの準粒子を使って電子密度とイオン密度を dynamical map することによって、二つの準粒子は CDW の phason と格子系の phonon であることがわかる。WT I と保存則を使って、Hamiltonian、流速密度等の物理諸量が dynamical map される。ここで得られた Hamiltonian は Fukuyama の Hamiltonian¹⁾ に還元することができる。さらに格子や CDW の位相の歪の機構を明らかにする

ことができる。

本稿では、§ 2 に CDW のある一次元電子 - 格子系の汎関数による形式化を行い、WTI を導く。§ 3 では電子密度間相関関数、イオン密度間相関関数、電子 - イオン密度間相関関数を求め、phason 場や phonon 場を導入して $m(x)$, $n(x)$ を dynamical map する。§ 4 では還元公式を求め、S 行列を導入して、Heisenberg 演算子を dynamical map する。§ 5 では phason 場と phonon 場を適当に変換して、空間的並進対称性の dynamical rearrangement を示す。§ 6 ではエネルギー - 運動量テンソルを定義し、それらテンソルを保存則を使って dynamical map する。§ 7 では、phason 場と phonon 場に Boson 変換を施しエネルギー、流束密度等の物理諸量の基底状態を求める。最後に § 8 でこの稿で得られた結論について述べる。

2. Functional Formalism と Ward- 高橋恒等式

Green 関数の Generating functional は次の汎関数積分によって与えられる：

$$W[H, I, J, K] = \frac{1}{N} \int [d\psi] [d\psi^+] [d\phi] [d\phi^+] \exp[i \int d^2 x \mathcal{L}_{\epsilon H I J K}(x)] \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\epsilon H I J K}(x) = & \mathcal{L}(x) + \mathcal{L}_{\epsilon}(x) + H^+(x) \psi(x) + \psi^+(x) H(x) + I(x) \hat{m}(x) \\ & + J^+(x) \phi(x) + \phi^+(x) J(x) + K(x) \hat{n}(x) \end{aligned} \quad (2.2)$$

ここで、 N は $H = I = J = K = 0$ のときの分子に等しい、さらに、

$$m(x) = u(x) + \hat{m}(x), \quad n(x) = v(x) + \hat{n}(x) \quad (2.3)$$

である。

$\psi, \psi^+, \phi, \phi^+$ の汎関数 $F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+]$ は次のように定義する：

$$\begin{aligned} \langle F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+] \rangle_{\epsilon H I J K} \equiv & \frac{1}{N} \int [d\psi] [d\psi^+] [d\phi] [d\phi^+] \cdot \\ & F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+] \exp[i \int d^2 x \mathcal{L}_{\epsilon H I J K}(x)] \end{aligned} \quad (2.4)$$

今 (2.4) の左辺のいくつかの添字の除去は右辺のその添字に対応する source 関数を 0 とおくことと定義する。例えば

$$\langle F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+] \rangle_{\epsilon HI} \equiv \lim_{\substack{J \rightarrow 0 \\ K \rightarrow 0}} \langle F[\dots] \rangle_{\epsilon HIJK}$$

のように定義する。こうして,

$$\langle 0 | T F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+] | 0 \rangle = \langle F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+] \rangle_{\epsilon} \quad (2.5)$$

である。また source 関数 H, I, J, K で母汎関数 $W[H, I, J, K]$ を微分することにより, 任意の Green 関数を構成することができる:

$$\begin{aligned} \langle F[\psi, \psi^+, \phi, \phi^+] \rangle_{\epsilon HIJK} = F \left[-i \frac{\delta}{\delta H^+}, -i \frac{\delta}{\delta H}, -i \frac{\delta}{\delta J^+}, \right. \\ \left. -i \frac{\delta}{\delta J} \right] \cdot W[H, I, J, K] \end{aligned} \quad (2.6)$$

次に, 空間的並進不変から WTI を導こう。今, α を無限小の空間的変位と考えて, $\psi(x, t), \phi(x, t)$ から $\psi(x + \alpha, t), \phi(x + \alpha, t)$ へ変換しても, $\psi(x, t), \phi(x, t)$ は (2.1) において積分変数であるために $W[H, I, J, K]$ は不変である:

$$\frac{\partial W[H, I, J, K]}{\partial \alpha} = 0 \quad (2.7)$$

(2.7) から, 次の master 方程式を得る:

$$\begin{aligned} i \int d^2 x \left[H^+(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + \frac{\partial}{\partial x} \psi^+(x) H(x) + I(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{m}(x) + J^+(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial x} \phi^+(x) J(x) + K(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{n}(x) \right] \rangle_{\epsilon HIJK} \\ = i \int d^2 x \left[\epsilon_A \frac{\partial}{\partial x} u(x) \langle \hat{m}(x) \rangle_{\epsilon HIJK} + \epsilon_B \frac{\partial}{\partial x} v(x) \langle \hat{n}(x) \rangle_{\epsilon HIJK} \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

(2.8) の両辺に $(-i \frac{\delta}{\delta H(x)}) (-i \frac{\delta}{\delta H^+(x)})$ 又は $(-i \frac{\delta}{\delta J(x)}) (-i \frac{\delta}{\delta J^+(x)})$

を作用させ, その後 $H = I = J = K = 0$ とおけばそれぞれ次の式を得る:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} u(x) = i \int d^2 y \left\{ \epsilon_A \langle \hat{m}(x) \hat{m}(y) \rangle_{\epsilon} \frac{\partial}{\partial y} u(y) + \epsilon_B \langle \hat{m}(x) \hat{n}(y) \rangle_{\epsilon} \right. \\ \left. \frac{\partial}{\partial y} v(y) \right\} \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} v(x) = i \int d^2 y \{ \epsilon_A < \hat{n}(x) \hat{m}(x) > \frac{\partial}{\partial y} u(y) + \epsilon_B < \hat{n}(x) \hat{n}(y) > \epsilon \\ \frac{\partial}{\partial y} v(y) \} \end{aligned} \quad (2.10)$$

さらに, (2.8) 式に $(-i \frac{\partial}{\partial H^+(x)})$ 又は $(-i \frac{\partial}{\partial J^+(x)})$ を作用すればそれぞれ次の式を得る:

$$\begin{aligned} \int d^2 y < \psi(x) [\frac{\partial}{\partial y} H^+(y) \psi(y) + \psi^+(y) \frac{\partial}{\partial y} H(y) + \frac{\partial}{\partial y} I(y) \hat{m}(y) \\ + \frac{\partial}{\partial y} J(y) \phi(y) + \phi^+(y) \frac{\partial}{\partial y} J(y) \frac{\partial}{\partial y} K(y) \hat{n}(y) >_{\epsilon_{HIJK}} + i < \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) >_{\epsilon_{HIJK}} \\ = - \int d^2 y [\epsilon_A < \psi(x) \hat{m}(y) >_{\epsilon_{HIJK}} \frac{\partial}{\partial y} u(y) + \epsilon_B < \psi(x) \hat{n}(y) >_{\epsilon_{HIJK}} \\ \frac{\partial}{\partial y} v(y)] \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \int d^2 y < \phi(x) [\frac{\partial}{\partial y} H^+(y) \psi(y) + \psi^+(y) \frac{\partial}{\partial y} H(y) + \frac{\partial}{\partial y} I(y) \hat{m}(y) + \frac{\partial}{\partial y} J(y) \phi(y) \\ + \phi^+(y) \frac{\partial}{\partial y} J(y) + \frac{\partial}{\partial y} K(y) \hat{n}(y) >_{\epsilon_{HIJK}} + i < \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) >_{\epsilon_{HIJK}} \\ = - \int d^2 y [\epsilon_A < \phi(x) \hat{m}(y) >_{\epsilon_{HIJK}} \frac{\partial}{\partial y} u(y) + \epsilon_B < \phi(x) \hat{n}(y) >_{\epsilon_{HIJK}} \\ \frac{\partial}{\partial y} v(y)] \end{aligned} \quad (2.12)$$

3. 相関関数と spectrum representation

WTI (2.9) と (2.10) から, CDW や格子を構成すると系の並進対称性が破れ, その回復のためにそれぞれに対応する Goldstone boson を発生することが示される。それら Goldstone boson の固有状態をそれぞれ $|A(q)\rangle$, $|B(q)\rangle$ とし, それらの spectrum をそれぞれ $\epsilon(q)$, $\omega(q)$ とすれば次のようになる:

$$H |A(q)\rangle = \epsilon(q) |A(q)\rangle \quad (3.1)$$

$$H |B(q)\rangle = \omega(q) |B(q)\rangle \quad (3.2)$$

ここで, H は系の Hamiltonian である。(3.1) は CDW の生成に伴って並進対称性を回復するため発生する CDW の phase の揺ぎで phason mode を表現している。ここでの運

動量 q は基本周期 a に対応して $\mathcal{Q}_A \equiv (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ の運動量空間に限定される。 $\varepsilon(0) = \varepsilon(q) = 0$ の関係を満足する。同様に, (3.2) は phonon mode を表現しており, 運動量 q は基本周期 b に対応して $\mathcal{Q}_B \equiv (-\frac{\pi}{b}, \frac{\pi}{b})$ の運動量空間に限定される。 $\omega(0) = \omega(q) = 0$ の関係を満足する ($G = \frac{2\pi}{b}$)。この二つの mode は WTI (2.9) と (2.10) のようにお互いに結合しているので, 電子密度の演算子 $\hat{m}(x)$, イオン密度の演算子 $\hat{n}(x)$ の状態は両方とも $|A(q)\rangle$ と $|B(q)\rangle$ の状態の結合として表現される。そこで Bloch の定理から

$$\langle 0 | \hat{m}(x) | A(q) \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon(q)}} E(x, q) e^{iqx} \quad (3.3)$$

$$\langle 0 | \hat{m}(x) | B(q) \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi\omega(q)}} \tilde{E}(x, q) e^{iqx} \quad (3.4)$$

$$\langle 0 | \hat{n}(x) | A(q) \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon(q)}} \tilde{F}(x, q) e^{iqx} \quad (3.5)$$

$$\langle 0 | \hat{n}(x) | B(q) \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi\omega(q)}} F(x, q) e^{iqx} \quad (3.6)$$

となる。ここで, $E(x, q)$, $\tilde{F}(x, q)$ は基本周期 a の関数で, q は $\mathcal{Q}_A$ に属する。又 $F(x, q)$, $\tilde{E}(x, q)$ は基本周期 b の関数で, q は $\mathcal{Q}_B$ に属する。そこで, 今基本周期 a, b の完全系として, それぞれ $\{\psi_\lambda(x)\}$, $\{\phi_\lambda(x)\}$ をもってきて $E, \tilde{E}, F, \tilde{F}$ 関数を表現すれば

$$E(x, q) = \sum_\lambda \psi_\lambda(x) \eta_\lambda(q) \quad (3.7)$$

$$\tilde{E}(x, q) = \sum_\lambda \phi_\lambda(x) \tilde{\eta}_\lambda(q) \quad (3.8)$$

$$\tilde{F}(x, q) = \sum_\lambda \psi_\lambda(x) \tilde{\xi}_\lambda(q) \quad (3.9)$$

$$F(x, q) = \sum_\lambda \phi_\lambda(x) \xi_\lambda(q) \quad (3.10)$$

となる。今理論が時間反転に対して不変であれば $E^*(x, q) = E(x, -q)$ 等が成立する。この仮定のもとに密度相関関数は次のようにかかれる:

$$\langle \hat{m}(x) \hat{m}(y) \rangle = \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_A} d^2 q e^{iq(x-y)} \varphi_\lambda(x) A_{\lambda\lambda'}^A(q) \varphi_{\lambda'}^*(y)$$

$$+ \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_B} d^2 q e^{iq(x-y)} \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{A}}(q) \phi_{\lambda'}^*(y) + \dots \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}(x) \hat{m}(y) \rangle &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_A} d^2 q e^{iq(x-y)} \psi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}A}(q) \psi_{\lambda'}^*(y) \\ &+ \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_B} d^2 q e^{iq(x-y)} \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}\tilde{A}}(q) \phi_{\lambda'}^*(y) + \dots, \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}(x) \hat{n}(y) \rangle &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_A} d^2 q e^{iq(x-y)} \varphi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}\tilde{B}}(q) \varphi_{\lambda'}^*(y) \\ &+ \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_B} d^2 q e^{iq(x-y)} \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}B}(q) \phi_{\lambda'}^*(y) + \dots, \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{m}(x) \hat{m}(y) \rangle &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_A} d^2 q e^{iq(x-y)} \psi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{A}\tilde{B}}(q) \psi_{\lambda'}^*(y) \\ &+ \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{\mathcal{Q}_B} d^2 q e^{iq(x-y)} \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{A}B}(q) \phi_{\lambda'}^*(y) + \dots, \end{aligned} \quad (3.14)$$

ここで,

$$\begin{aligned} \Delta_{\lambda\lambda'}^A(q) &= \frac{\eta_\lambda(q) \eta_{\lambda'}^*(q)}{D_A(q)}, & \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{A}}(q) &= \frac{\tilde{\eta}_\lambda(q) \tilde{\eta}_{\lambda'}^*(q)}{D_B(q)}, \\ \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}A}(q) &= \frac{\tilde{\xi}_\lambda(q) \eta_{\lambda'}^*(q)}{D_A(q)}, & \Delta_{\lambda\lambda'}^{B\tilde{A}}(q) &= \frac{\xi_\lambda(q) \tilde{\eta}_{\lambda'}^*(q)}{D_B(q)}, \\ \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}\tilde{A}}(q) &= \frac{\tilde{\xi}_\lambda(q) \tilde{\xi}_{\lambda'}^*(q)}{D_A(q)}, & \Delta_{\lambda\lambda'}^{B\tilde{B}}(q) &= \frac{\xi_\lambda(q) \xi_{\lambda'}^*(q)}{D_B(q)}, \\ \Delta_{\lambda\lambda'}^{A\tilde{B}}(q) &= \frac{\eta_\lambda(q) \tilde{\xi}_{\lambda'}^*(q)}{D_A(q)}, & \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{A}B}(q) &= \frac{\tilde{\eta}_\lambda(q) \xi_{\lambda'}^*(q)}{D_B(q)} \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$D_A(q) = q_0^2 - \varepsilon^2(q) - \varepsilon_A C_A - \varepsilon_B C_{\tilde{A}}, \quad D_B(q) = q_0^2 - \omega^2(q) - \varepsilon_A C_{\tilde{B}} - \varepsilon_B C_B \quad (3.16)$$

今、完全系として

$$\psi_\lambda(x) = e^{i\lambda Qx}, \quad \phi_\lambda(x) = e^{i\lambda Gx}$$

をとり, WTI (2.9) と (2.10) を検討する。そのため

$$\tilde{\psi}(x) \equiv \frac{\partial}{\partial x} u(x) = \sum_\lambda a_\lambda \psi_\lambda(x), \quad \tilde{\phi}(x) \equiv \frac{\partial}{\partial x} v(x) = \sum_\lambda b_\lambda \phi_\lambda(x) \quad (3.17)$$

のように $\tilde{\psi}$, $\tilde{\phi}$ を定義し展開して WTI (2.9) (2.10) の関係を調べると,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x) = & -\epsilon_A \sum_{\lambda\lambda'} \psi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^A(0) a_{\lambda'} - \epsilon_A \sum_{\lambda\eta} \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda,\eta A}^{\tilde{A}}(0) a_{\eta\tilde{A}} \\ & - \epsilon_B \sum_{\lambda,\eta} \psi_\lambda(x) \Delta_{\lambda,\eta A}^{\tilde{A}\tilde{B}}(0) b_{\eta A} - \epsilon_B \sum_{\lambda,\eta} \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{A}\tilde{B}}(0) b_{\lambda'} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(x) = & -\epsilon_A \sum \psi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}A}(0) a_{\lambda'} - \epsilon_A \sum \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda,\eta A}^{\tilde{B}A}(0) a_{\eta\tilde{A}} \\ & - \epsilon_B \sum \psi_\lambda(x) \Delta_{\lambda,\eta A}^{\tilde{B}}(0) b_{\eta A} - \epsilon_B \sum \phi_\lambda(x) \Delta_{\lambda\lambda'}^{\tilde{B}}(0) b_{\lambda'} \end{aligned} \quad (3.19)$$

となる。ここで, Goldstone boson 発生のため $\epsilon_A, \epsilon_B \rightarrow 0$ のとき $\Delta(q)$ の引数 q が 0 のときのみ (3.18) と (3.19) の右辺の各項は有限の値をとり, $q \neq 0$ のときは $\epsilon_A, \epsilon_B \rightarrow 0$ で零になることを使っている。さらに, $\frac{Q}{G} = \frac{A}{\tilde{A}}$ なる既約分数をとってある。次に, (3.18), (3.19) 式に $\psi_\lambda(x), \phi_\lambda(x)$ を乗じて積分し, δ 関数の引数が 0 となる項のみをとり出すことによって次の式を得る:

$$a_\lambda = \frac{\eta_\lambda}{C_A} A + \delta_{\lambda,m\tilde{A}} \frac{\tilde{\eta}_{m\tilde{A}}}{C_{\tilde{B}}} \tilde{A} + \delta_{\lambda,m\tilde{A}} \frac{\tilde{\eta}_{m\tilde{A}}}{C_B} B + \frac{\eta_\lambda}{C_{\tilde{A}}} B \quad (3.20)$$

$$\delta_{\lambda,m\tilde{A}} a_{m\tilde{A}} = \delta_{\lambda,m\tilde{A}} \frac{\eta_{m\tilde{A}}}{C_A} A + \frac{\tilde{\eta}_\lambda}{C_{\tilde{B}}} \tilde{A} + \frac{\tilde{\eta}_\lambda}{C_B} B + \delta_{\lambda,m\tilde{A}} \frac{\eta_{m\tilde{A}}}{C_{\tilde{A}}} \tilde{B} \quad (3.21)$$

$$b_\lambda = \delta_{\lambda,m\tilde{A}} \frac{\tilde{\xi}_{m\tilde{A}}}{C_A} A + \frac{\xi_\lambda}{C_{\tilde{B}}} \tilde{A} + \frac{\xi_\lambda}{C_B} B + \delta_{\lambda,m\tilde{A}} \frac{\xi_{m\tilde{A}}}{C_{\tilde{A}}} \tilde{B} \quad (3.22)$$

$$\delta_{\lambda, m\tilde{A}} b_{m\tilde{A}} = \frac{\tilde{\xi}_{\lambda}}{C_A} A + \delta_{\lambda, m\tilde{A}} \frac{\xi_{m\tilde{A}}}{C_{\tilde{B}}} \tilde{A} + \delta_{\lambda, m\tilde{A}} \frac{\xi_{m\tilde{A}}}{C_B} B + \frac{\tilde{\xi}_{\lambda}}{C_{\tilde{A}}} \tilde{B} \quad (3.23)$$

ここで

$$A \equiv \sum \eta_{\lambda}^* a_{\lambda}, \quad B \equiv \sum \xi_{\lambda}^* b_{\lambda}, \quad \tilde{A} \equiv \sum \tilde{\eta}_{n\tilde{A}}^* a_{n\tilde{A}},$$

$$\tilde{B} \equiv \sum \tilde{\xi}_{n\tilde{A}}^* b_{n\tilde{A}} \quad (3.24)$$

である。(3.20) と (3.21), (3.22) と (3.23) をくらべると

$$\tilde{\eta}_{\lambda} = \delta_{\lambda, m\tilde{A}} \tilde{\eta}_{m\tilde{A}}, \quad \tilde{\xi}_{\lambda} = \delta_{\lambda, m\tilde{A}} \tilde{\xi}_{m\tilde{A}} \quad (3.25)$$

となり, (3.25) を使えば, WTI として次の式を得る:

$$a_{\lambda} = \eta_{\lambda} \mathcal{A} + \delta_{\lambda, m\tilde{A}} \tilde{\eta}_{m\tilde{A}} \mathcal{B} \quad (3.26)$$

$$b_{\lambda} = \delta_{\lambda, m\tilde{A}} \tilde{\xi}_{m\tilde{A}} \mathcal{A} + \xi_{\lambda} \mathcal{B} \quad (3.27)$$

ここで,

$$\mathcal{A} = \frac{A}{C_A} + \frac{\tilde{B}}{C_{\tilde{A}}}, \quad \mathcal{B} = \frac{\tilde{A}}{C_{\tilde{B}}} + \frac{B}{C_B} \quad (3.28)$$

である。今, CDW として $\cos Qx$ であるとすれば, $Q/G < 1$ の限り, $\tilde{A} = 0$ となる。

以上から, CDW の phason 場と格子系の phonon 場が存在し, それぞれ

$$\eta^0(x) = \int_{\mathcal{Q}_A} dq \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon(q)}} [A(q) e^{iqx - i\epsilon(q)t} + A^+(q) e^{-iqx + i\epsilon(q)t}] \quad (3.29)$$

$$\xi^0(x) = \int_{\mathcal{Q}_B} dq \frac{1}{\sqrt{4\pi\omega(q)}} [B(q) e^{iqx - i\omega(q)t} + B^+(q) e^{-iqx + i\omega(q)t}] \quad (3.30)$$

となり,

$$\lambda_A(\partial) \eta^0(x) = 0 ; \lambda_A(\partial) \equiv -\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \epsilon^2 (-i\nabla) \quad (3.31)$$

$$\lambda_B(\partial) \xi^0(x) = 0 ; \lambda_B(\partial) \equiv -\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \omega^2 (-i\nabla) \quad (3.32)$$

を満足する。phason 場とphonon 場は次の同時刻交換関係を満足するように規格化する：

$$[\eta^0(x), \eta^0(x')]_{x_0=x'_0} = i\delta_A(x-x') = i\int_{\mathcal{Q}_A} \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x')} \quad (3.33)$$

$$[\xi^0(x), \xi^0(x')]_{x_0=x'_0} = i\delta_B(x-x') = i\int_{\mathcal{Q}_B} \frac{dq}{2\pi} e^{iq(x-x')} \quad (3.34)$$

(3.3) ~ (3.3) 式から

$$m(x) = u(x) + E(x, -i\nabla) \eta^0(x) + \tilde{E}(x, -i\nabla) \xi^0(x) + \dots, \quad (3.35)$$

$$n(x) = v(x) + F(x, -i\nabla) \xi^0(x) + \tilde{F}(x, -i\nabla) \eta^0(x) + \dots, \quad (3.36)$$

となり、 $\dots$ は二つ以上の準粒子のnormal積の展開である。

4. 還元公式と Dynamical Map

まず、還元公式を求めるため、 $\hat{m}(x)$, $\hat{n}(x)$ の準粒子場 $\eta^0(x)$, $\xi^0(x)$ に関して一次の項を対角化しておく：

$$\begin{pmatrix} \tilde{m}(x) \\ \tilde{n}(x) \end{pmatrix} \equiv \hat{M}(x, -i\nabla) \begin{pmatrix} \hat{m}(x) \\ \hat{n}(x) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} E(x, -i\nabla) & \tilde{E}(x, -i\nabla) \\ \tilde{F}(x, -i\nabla) & F(x, -i\nabla) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{m}(x) \\ \hat{n}(x) \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

こうして、 $\tilde{m}(x)$, $\tilde{n}(x)$ の $\eta^0(x)$ と $\xi^0(x)$ に関する展開は次のようになる：

$$\tilde{m}(x) = \eta^0(x) + \dots, \quad (4.2)$$

$$\tilde{n}(x) = \xi^0(x) + \dots, \quad (4.3)$$

ここで, $\dots$ は二次以上の準粒子場の正規積の展開である。今,

$$i \int dx \eta^0(x) \left(\frac{\partial}{\partial t} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial t}} \right) < 0 | \eta^0(x) = \int_{\mathcal{Q}_A} dq A^+(q) < A(q) | \quad (4.4)$$

$$i \int dx \eta^0(x) | 0 > \left(\frac{\partial}{\partial t} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial t}} \right) \eta^0(x) = \int_{\mathcal{Q}_A} dq | A(q) > A(q) \quad (4.5)$$

が成立するため, 和達等の論文³⁾と同様な議論をすることにより,

$$\begin{aligned} -i \int dx \eta^0(x) \tilde{I}(x, \partial) < 0 | T [\tilde{m}(x) \dots] | 0 > &= \int_{\mathcal{Q}_A} dq A^+(q) < A(q) | \\ S T [\dots] | 0 > + \int_{\mathcal{Q}_A} dq < 0 | T [\dots] | A(q) > A(q) &\quad (4.6) \end{aligned}$$

なる $\tilde{m}(x)$ の還元公式を得る。ここで S は S 行列であり, 基底状態は安定である:

$$S | 0 > = | 0 > \quad (4.7)$$

さらに,

$$\tilde{I}(x, \partial) = \lambda_A(-\partial) \quad (4.8)$$

である。同様な議論により

$$\begin{aligned} -i \int dx \xi^0(x) \tilde{K}(x, \partial) < 0 | T \tilde{n}(x) \dots | 0 > &= \int_{\mathcal{Q}_B} dq B^+(q) < B(q) | \\ S T [\dots] | 0 > + \int_{\mathcal{Q}_B} dq < 0 | T [\dots] | B(q) > B(q) &\quad (4.9) \end{aligned}$$

ここで,

$$\tilde{K}(x, \partial) = \lambda_B(-\partial) \quad (4.10)$$

である。電子の場やイオンの場も準粒子場 $\psi^0(x)$, $\phi^0(x)$ を使って,

$$\Psi(x) = E_\Psi(x, -i\nabla) \psi^0(x) + \dots, \quad (4.11)$$

$$\phi(x) = F_\phi(x, -i\nabla) \phi^0(x) + \dots \quad (4.12)$$

と展開でき、和達等の論文³⁾と同様な議論を行って次の量を導入する：

$$H^+(x) \equiv -\psi^0(x) H_\psi(x, \partial), \quad H(x) \equiv -\bar{H}_\psi(x, \partial) \psi^0(x) \quad (4.13)$$

$$J^+(x) \equiv -\phi^0(x) J_\phi(x, \partial), \quad J(x) \equiv -\bar{J}_\phi(x, \partial) \phi^0(x) \quad (4.14)$$

$$H_\psi(x, \partial) \equiv \lambda_\psi(-\partial) E_\psi(x, -i\nabla); \quad \lambda_\psi(-\partial) \psi^0(x) = 0 \quad (4.15)$$

$$J_\phi(x, \partial) \equiv \lambda_\phi(-\partial) F_\phi(x, -i\nabla); \quad \lambda_\phi(-\partial) \phi^0(x) = 0 \quad (4.16)$$

こうして、Heisenberg 演算子 $O_H(x)$ の dynamical map に対する LSZ 公式を得る：

$$S O_H(x) = : \langle O_H(x) \exp(-iA) \rangle : \quad (4.17)$$

ここで、

$$\begin{aligned} A \equiv & \int d^2x \{ \psi^{0+}(x) H_\psi(x, \partial) \psi(x) + \psi^+(x) \bar{H}_\psi(x, \partial) \psi^0(x) \\ & + \eta^0(x) \tilde{I}(x, \partial) \tilde{m}(x) + \phi^{0+}(x) J_\phi(x, \partial) \phi(x) + \phi^+(x) \bar{J}_\phi(x, \partial) \\ & \phi^0(x) + \xi^0(x) \tilde{K}(x, \partial) \tilde{n}(x) \} \end{aligned} \quad (4.18)$$

である。今、もし、

$$I(x) = \eta^0(x) \tilde{I}(x, \partial) \tilde{M}_{11}(x, -i\nabla) + \xi^0(x) \tilde{K}(x, \partial) \tilde{M}_{21}(x, -i\nabla) \quad (4.19)$$

$$K(x) = \eta^0(x) \tilde{I}(x, \partial) \tilde{M}_{12}(x, -i\nabla) + \xi^0(x) \tilde{K}(x, \partial) \tilde{M}_{22}(x, -i\nabla) \quad (4.20)$$

とすれば S 行列は

$$S = : W[H, I, J, K] : \quad (4.21)$$

となる。

5. 空間的並進対称のDynamical Rearrangement

系の空間的並進対称性の回復を検討するために, WTI (2.9) ~ (2.12) の右辺にあらわれる ϵ -項についての関係式を導いておく。まず,

$$\begin{aligned}
 & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \left[\epsilon_A \frac{\partial}{\partial y} u(y) \langle \tilde{m}(y) O_H(x) \rangle_\epsilon + \epsilon_B \frac{\partial}{\partial y} v(y) \langle \tilde{n}(y) O_H(x) \rangle_\epsilon \right] \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \left[\epsilon_A \tilde{\psi}(y) \left\{ E(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \eta^0(y) O_H(x) \rangle_\epsilon + \tilde{E}(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. \langle \xi^0(y) O_H(x) \rangle_\epsilon \right\} + \epsilon_B \tilde{\phi}(y) \left\{ F(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \xi^0(y) O_H(x) \rangle_\epsilon + \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. \tilde{F}(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \eta^0(y) O_H(x) \rangle_\epsilon \right\} \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \int d^2 z \left[\epsilon_A \tilde{\psi}(y) \cdot \right. \\
 & \quad \left. E(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \eta^0(y) \eta^0(z) \rangle_\epsilon \langle \frac{\partial O_H(x)}{\partial \eta^0(z)} \rangle_\epsilon + \epsilon_A \tilde{\psi}(y) \cdot \right. \\
 & \quad \left. \tilde{E}(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \xi^0(y) \xi^0(z) \rangle_\epsilon \langle \frac{\partial O_H(x)}{\partial \xi^0(z)} \rangle_\epsilon + \epsilon_B \tilde{\phi}(y) F(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \right. \\
 & \quad \left. \langle \xi^0(y) \xi^0(z) \rangle_\epsilon \langle \frac{\partial O_H(x)}{\partial \xi^0(z)} \rangle_\epsilon + \epsilon_B \tilde{\phi}(y) \langle \eta^0(y) \eta^0(z) \rangle_\epsilon \langle \frac{\partial O_H(x)}{\partial \eta^0(z)} \rangle_\epsilon \right] \\
 & \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

なる関係式において, 右辺のそれぞれの項は次のようになる:

$$\begin{aligned}
 & i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \epsilon_A \tilde{\psi}(y) E(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \eta^0(y) \eta^0(z) \rangle_\epsilon = -i \frac{A}{C_A} \cdot \\
 & \quad \int d^2 y \lambda_A(\partial_y) \langle \eta^0(y) \eta^0(z) \rangle_\epsilon \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \epsilon_A \tilde{\psi}(y) \tilde{E}(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \xi^0(y) \xi^0(z) \rangle_\epsilon \\
 &= -i \frac{\tilde{A}}{C_B} \int d^2 y \lambda_B(\partial_y) \langle \xi^0(y) \xi^0(z) \rangle_\epsilon \quad (5.3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \epsilon_B \tilde{\phi}(y) F(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) \langle \xi^0(y) \xi^0(z) \rangle_\epsilon \\
 &= -i \frac{B}{C_B} \int d^2 y \lambda_B(\partial_y) \langle \xi^0(y) \xi^0(z) \rangle_\epsilon \quad (5.4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \ \epsilon_B \tilde{\phi}(y) \tilde{F}(y, -i \frac{\partial}{\partial y}) < \eta^0(y) \eta^0(z) >_{\epsilon} \\
& = -i \frac{\tilde{B}}{C_A} \int d^2 y \ \lambda_A(\partial_y) < \eta^0(y) \eta^0(z) >_{\epsilon}
\end{aligned} \tag{5.5}$$

(5.2) ~ (5.5) 式を, (5.1) 式に代入すれば, 次の関係式を得る:

$$\begin{aligned}
& i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^2 y \left[\epsilon_A \frac{\partial}{\partial y} u(y) < \tilde{m}(y) O_H(x) >_{\epsilon} + \epsilon_B \frac{\partial}{\partial y} v(y) < \tilde{n}(y) O_H(x) >_{\epsilon} \right] \\
& = -i \mathcal{A} \int d^2 y \ \tilde{I}(y, \partial_y) < \tilde{m}(y) O_H(x) >_{\epsilon} - i \mathcal{B} \int d^2 y \ \tilde{K}(y, \partial_y) \cdot \\
& \quad < \tilde{n}(y) O_H(x) >_{\epsilon}
\end{aligned} \tag{5.6}$$

次に空間的並進対称性の dynamical rearrangement を証明することである。今電子の場合 $\Psi(x)$, イオンの場合 $\Phi(x)$ が, 準粒子場 η^0 , ξ^0 , ψ^0 , ϕ^0 によって,

$$\Psi(x) = \Psi[x; \eta^0(x), \xi^0(x), \psi^0(x), \phi^0(x)] \tag{5.7}$$

$$\Phi(x) = \Phi[x; \eta^0(x), \xi^0(x), \psi^0(x), \phi^0(x)] \tag{5.8}$$

のように dynamical map されたと仮定しよう。 α なる量の空間的並進が

$$\eta^0(x, t) \rightarrow \eta^0(\alpha; x) = \eta^0(x + \alpha, t) + \mathcal{A} \alpha \tag{5.9}$$

$$\xi^0(x, t) \rightarrow \xi^0(\alpha; x) = \xi^0(x + \alpha, t) + \mathcal{B} \alpha \tag{5.10}$$

$$\psi^0(x, t) \rightarrow \psi^0(\alpha; x) = \psi^0(x + \alpha, t) \tag{5.11}$$

$$\phi^0(x, t) \rightarrow \phi^0(\alpha; x) = \phi^0(x + \alpha, t) \tag{5.12}$$

なる準粒子場の変換によって

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi(x + \alpha) \tag{5.13}$$

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi(x + \alpha) \tag{5.14}$$

のように変換されることを証明することである。このとき, (5.7), (5.8) の dynamical map は次のことを意味する:

$$\Psi(x+\alpha) = \Psi[x; \eta^0(\alpha; x), \xi^0(\alpha; x), \Psi^0(\alpha; x), \Phi^0(\alpha; x)] \quad (5.15)$$

$$\Phi(x+\alpha) = \Phi[x; \eta^0(\alpha; x), \xi^0(\alpha; x), \Psi^0(\alpha; x), \Phi^0(\alpha; x)] \quad (5.16)$$

さらに $\Psi(x)$ 又は $\Phi(x)$ で構成される Heisenberg 演算子を, それぞれ $O_A[x; \Psi(x)]$, $O_B[x; \Phi(x)]$ としたとき, 次の形で展開される:

$$O_A[x; \Psi(x)] = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(x + \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x)) \hat{O}_{A\lambda}[x; \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \cdot \xi^0(x) - \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x), \partial \eta^0(x), \partial \xi^0(x), \Psi^0(x), \Phi^0(x)] \quad (5.17)$$

$$O_B[x; \Phi(x)] = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}(x + \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \xi^0(x)) \hat{O}_{B\lambda}[x; \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \cdot \eta^0(x) - \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \xi^0(x), \partial \eta^0(x), \partial \xi^0(x), \Psi^0(x), \Phi^0(x)] \quad (5.18)$$

ここで, $\hat{O}_{A\lambda}$, $\hat{O}_{B\lambda}$ はそれぞれ引数の準粒子場の正規積の展開によって与えられる,

さて, 以上の準備のもとに空間的並進の dynamical rearrangement を証明しよう。和達等の論文³⁾と同様な議論によって, (5.9) ~ (5.12) の変換の結果は $\tilde{I}$, $\tilde{K}$, H^+ , J^+ に次の変換をもたらす:

$$\begin{aligned} \tilde{I}(x, t) &\rightarrow \tilde{I}(x+\alpha, t) = -\eta^0(x+\alpha, t) \tilde{I}(x+\alpha, \partial) \\ &\quad - \alpha \mathcal{A} \tilde{I}(x+\alpha, \partial) \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} \tilde{K}(x, t) &\rightarrow \tilde{K}(x+\alpha, t) = -\xi^0(x+\alpha, t) \tilde{K}(x+\alpha, \partial) \\ &\quad - \alpha \mathcal{B} \tilde{K}(x+\alpha, \partial) \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$H^+(x, t) \rightarrow H^+(x+\alpha, t) = -\Psi^0(x+\alpha, t) H_{\Psi}(x+\alpha, \partial) \quad (5.21)$$

$$J^+(x, t) \rightarrow J^+(x+\alpha, t) = -\Phi^0(x+\alpha, t) J_{\Phi}(x+\alpha, \partial) \quad (5.22)$$

こうして, A は

$$\begin{aligned} A(\alpha) = & - \int d^2 x \left[H^+(x+\alpha) \psi(x) + \psi^+(x) H(x+\alpha) + \tilde{I}(x+\alpha) \tilde{m}(x) \right. \\ & \left. + J^+(x+\alpha) \phi(x) + \phi^+(x) J(x+\alpha) + \tilde{K}(x+\alpha) \tilde{n}(x) \right] \end{aligned} \quad (5.23)$$

と変換され, (5.23) から

$$S(\alpha) \equiv : e^{-iA(\alpha)} : \quad (5.24)$$

$$S(\alpha) \psi(\alpha; x) \equiv : \psi(x) e^{-iA(\alpha)} : \quad (5.25)$$

となる。今, (5.23) から

$$\begin{aligned} \frac{\partial A(\alpha)}{\partial \alpha} = & - \int d^2 x \left[\frac{\partial}{\partial x} H^+(x+\alpha) \psi(x) + \psi^+(x) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{H}(x+\alpha) + \frac{\partial}{\partial x} \tilde{I}(x+\alpha) \tilde{m}(x) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial x} J^+(x+\alpha) \phi(x) + \phi^+(x) \frac{\partial}{\partial x} J(x+\alpha) + \frac{\partial}{\partial x} \tilde{K}(x+\alpha) \tilde{n}(x) \right] \\ & + \mathcal{A} \int d^2 x \tilde{I}(x+\alpha, \partial) \tilde{m}(x) + \mathcal{B} \int d^2 x \tilde{K}(x+\alpha, \partial) \tilde{n}(x) \end{aligned} \quad (5.26)$$

となるが, (2.8) と (5.6) 式から

$$\frac{\partial A(\alpha)}{\partial \alpha} = 0 \quad (5.27)$$

となる。こうして,

$$\frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha} = -i : \frac{\partial A(\alpha)}{\partial \alpha} e^{-iA(\alpha)} : = 0 \quad (5.28)$$

さらに, (2.11) と (5.6) 式から

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} S(\alpha) \psi(\alpha; x) = \frac{\partial}{\partial x} S(\alpha) \psi(\alpha; x) \quad (5.29)$$

となる。これは,

$$\psi(\alpha; x) = \psi(x+\alpha, t) \quad (5.30)$$

を意味する。これで $\Psi(\alpha; x)$ の空間的並進の dynamical rearrangement が証明された。 $\Phi(\alpha; x)$ についても同様に証明される。

ここで (5.17) と (5.18) の一般公式を $m(x)$ と $n(x)$ に適用してみよう, 先ず $m(x)$ について,

$$\begin{aligned}
 m(x) &= \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(x + \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x)) \hat{m}_{\lambda}(x; \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \xi^0(x) \\
 &\quad - \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x), \partial \eta^0, \partial \xi^0, \Psi^0, \Phi^0) \\
 &= \sum_{\lambda} \{ \psi_{\lambda}(x) + \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\lambda}(x) \} \{ a_{\lambda}' + a_{\lambda}''(\mathcal{B}^{-1} \cdot \\
 &\quad (-i\nabla) \xi^0(x) - \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x)) + \dots \} \\
 &= \sum_{\lambda} a_{\lambda}' \psi_{\lambda}(x) + \mathcal{B}^{-1}(0) \eta^0(x) \frac{\partial}{\partial x} \sum_{\lambda} a_{\lambda}' \psi_{\lambda}(x) + \mathcal{B}^{-1}(0) \xi^0(x) \cdot \\
 &\quad \sum_{\lambda} a_{\lambda}'' \psi_{\lambda}(x) - \mathcal{A}^{-1}(0) \eta^0(x) \sum_{\lambda} a_{\lambda}'' \psi_{\lambda}(x) + \dots \quad (5.31)
 \end{aligned}$$

ここで, 上式を (3.35) 式と比較すると

$$u(x) = \sum_{\lambda} a_{\lambda}' \psi_{\lambda}(x) \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned}
 E(x, 0) &= \mathcal{A}^{-1}(0) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} u(x) - \sum_{\lambda} a_{\lambda}'' \psi_{\lambda}(x) \right\} \\
 &= \mathcal{A}^{-1}(0) \sum_{\lambda} (a_{\lambda} - \delta_{\lambda, m_A} a_{m_A}'') \psi_{\lambda}(x) \quad (5.33)
 \end{aligned}$$

$$\tilde{E}(x, 0) = \mathcal{B}^{-1}(0) \sum_{\lambda} a_{\lambda}'' \psi_{\lambda}(x) = \mathcal{B}^{-1}(0) \sum_{\lambda} \delta_{\lambda, m_A} a_{m_A}'' \psi_{\lambda}(x) \quad (5.34)$$

となる。ここで,

$$\eta_{\lambda}(0) = \mathcal{A}^{-1}(0) (a_{\lambda} - \delta_{\lambda, m_A} a_{m_A}''), \quad \hat{\eta}_{\lambda}(0) = \delta_{\lambda, m_A} a_{m_A}'' \quad (5.35)$$

とすれば, WTI (3.26) を満足していることが示される。同様にして,

$$\begin{aligned}
 n(x) &= \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}(x + \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \xi^0(x)) \hat{n}_{\lambda}(x; \mathcal{A}^{-1}(-i\nabla) \eta^0(x) \\
 &\quad - \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \xi^0(x), \partial \eta^0, \partial \xi^0, \Psi^0, \Phi^0) \\
 &= \sum_{\lambda} b'_{\lambda} \phi_{\lambda}(x) + \mathcal{B}^{-1}(0) \xi^0(x) \frac{\partial}{\partial x} \sum_{\lambda} b'_{\lambda} \phi_{\lambda}(x) + \mathcal{A}^{-1}(0) \eta^0(x) \sum_{\lambda} b''_{\lambda} \phi_{\lambda}(x) \\
 &\quad - \mathcal{B}^{-1}(0) \xi^0(x) \sum_{\lambda} b''_{\lambda} \phi_{\lambda}(x) + \dots \quad (5.36)
 \end{aligned}$$

から,

$$v(x) = \sum b'_\lambda \phi_\lambda(x) \quad (5.37)$$

$$F(x, 0) = \mathcal{B}^{-1}(0) \sum_\lambda (b_\lambda - \delta_{\lambda, m\tilde{A}} b''_{m\tilde{A}}) \phi_\lambda(x) \quad (5.38)$$

$$\tilde{F}(x, 0) = \mathcal{A}^{-1}(0) \sum_\lambda \delta_{\lambda, m\tilde{A}} b_{m\tilde{A}} \phi_\lambda(x) \quad (5.39)$$

となり,

$$\xi_\lambda(0) = \mathcal{B}^{-1}(0) (b_\lambda - \delta_{m\tilde{A}} b''_{m\tilde{A}}), \quad \tilde{\xi}_\lambda(0) = \mathcal{A}^{-1}(0) \delta_{m\tilde{A}} b''_{m\tilde{A}} \quad (5.40)$$

とすれば, WTI (3.27) を満足している。

6. エネルギー・運動量テンソル

次に, 物理諸量を準粒子場 η^0 , ξ^0 , ψ^0 , ϕ^0 で dynamical map してみよう。そのために先ず, エネルギー密度 $H(x)$, 運動量密度 $P(x)$, エネルギー流束密度 $S(x)$, 弾性テンソル T_{11} を, 次のエネルギー・運動量テンソル T_{ij} で表そう:

$$\begin{aligned} H(x) = T_{00}(x) = & \frac{i}{2} (\psi^+(x) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) - \frac{\partial}{\partial t} \psi^+(x) \psi(x)) \\ & + \frac{i}{2} (\phi^+(x) \frac{\partial}{\partial t} \phi(x) - \frac{\partial}{\partial t} \phi^+(x) \phi(x)) - \mathcal{L}(x) \end{aligned} \quad (6.1)$$

$$\begin{aligned} P(x) = -T_{01} = & \frac{-i}{2} (\psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \psi) - \frac{i}{2} (\phi^+ \frac{\partial}{\partial x} \phi \\ & - \frac{\partial}{\partial x} \phi^+ \phi) \end{aligned} \quad (6.2)$$

$$\begin{aligned} S(x) = T_{10} = & -\frac{1}{2m} (\frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \frac{\partial}{\partial t} \psi + \frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \psi) \\ & -\frac{1}{2M} (\frac{\partial}{\partial x} \phi^+ \frac{\partial}{\partial t} \phi + \frac{\partial}{\partial t} \phi^+ \frac{\partial}{\partial x} \phi) \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$T_{11} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial x} \phi^+ \frac{\partial}{\partial x} \phi - \mathcal{L}(x) \quad (6.4)$$

ここで, m, M はそれぞれ電子; イオンの質量である。さらに流束密度 $j(x)$ を次のように与える:

$$j(x) = -\frac{i}{2m} \left\{ \psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \psi \right\} - \frac{i}{2M} \left\{ \phi^+ \frac{\partial}{\partial x} \phi - \frac{\partial}{\partial x} \phi^+ \phi \right\} \quad (6.5)$$

これらの物理諸量は, 相互作用に微分項を含んでいない限り, 次の連続の方程式を満足している:

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ n(x) + m(x) \} + \frac{\partial}{\partial x} j(x) = 0 \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x) + \frac{\partial}{\partial x} T_{11}(x) = 0 \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H(x) + \frac{\partial}{\partial x} S(x) = 0 \quad (6.8)$$

(3.35) と (3.36), (6.6) ~ (6.8) 式を使って, 物理諸量の dynamical map を求めることができる。そこで, 最初に $P(x)$ を求めてみよう。(3.35), (3.36) と (6.6) から

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} P(x) &= -m \frac{\partial}{\partial t} m(x) - M \frac{\partial}{\partial t} n(x) = -m E(x, -i\nabla) \eta^0(x) \\ &\quad - m \tilde{E}(x, -i\nabla) \xi^0(x) - M F(x, -i\nabla) \xi^0(x) \\ &\quad - M \tilde{F}(x, -i\nabla) \eta^0(x) + \dots \end{aligned} \quad (6.9)$$

となり, さらに (6.7) 式から

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_{11}(x) &= -\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} P(x) \\ &= m E(x, -i\nabla) \ddot{\eta}^0(x) + m \tilde{E}(x, -i\nabla) \dot{\xi}^0(x) \end{aligned}$$

$$+ MF(x, -i\nabla) \dot{\xi}^0(x) + M\tilde{F}(x, -i\nabla) \dot{\eta}^0(x) + \dots \quad (6.10)$$

である。空間的並進の関係式 (5.9) ~ (5.12) の generator を K とすれば, (3.33) と (3.34) の交換関係を使って

$$[\eta^0(x), K] = -i \left(-\frac{\partial}{\partial x} \eta^0(x) + \mathcal{A}(0) \right) \quad (6.11)$$

$$[\xi^0(x), K] = -i \left(-\frac{\partial}{\partial x} \xi^0(x) + \mathcal{B}(0) \right) \quad (6.12)$$

である。したがって,

$$\begin{aligned} K \equiv \int dx P(x) &= K[\Psi^0, \Phi^0] - \int dx \dot{\eta}^0(x) \frac{\partial}{\partial x} \eta^0(x) \\ &\quad - \int dx \dot{\xi}^0(x) \frac{\partial}{\partial x} \xi^0(x) - \mathcal{A}(0) \int dx \dot{\eta}^0(x) - \mathcal{B}(0) \int dx \dot{\xi}^0(x) + \dots \end{aligned} \quad (6.13)$$

となる。上式において $K[\Psi^0, \Phi^0]$ は Ψ^0, Φ^0 の空間的並進を発生する自由運動量演算子である。 $P(x)$ は一次の $\dot{\eta}^0(x)$ と $\dot{\xi}^0(x)$ 項を持つことが解かる。こうして,

$$\begin{aligned} P(x) &= -\mathcal{A}(-i\nabla) \dot{\eta}^0(x) - \mathcal{B}(-i\nabla) \dot{\xi}^0(x) + \sum_{\lambda \neq 0} \psi_\lambda(x) \alpha_\lambda(-i\nabla) \dot{\eta}^0(x) \\ &\quad + \sum_{\lambda \neq 0} \phi_\lambda(x) \beta_\lambda(-i\nabla) \dot{\xi}^0(x) + \dots \end{aligned} \quad (6.14)$$

を得る。ここで, 上式の第一項, 第二項には $\psi_0(x), \phi_0(x)$ がついていることに注意する。

(6.14) を (6.9) に代入すれば

$$mE(x, -i\nabla) + M\tilde{F}(x, -i\nabla) = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{A}(-i\nabla) + \sum_{\lambda \neq 0} \psi_\lambda(x) \tilde{\alpha}_\lambda(-i\nabla) \quad (6.15)$$

$$m\tilde{E}(x, -i\nabla) + MF(x, -i\nabla) = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{B}(-i\nabla) + \sum_{\lambda \neq 0} \phi_\lambda(x) \tilde{\beta}_\lambda(-i\nabla) \quad (6.16)$$

となる。 $\tilde{\alpha}_\lambda(-i\nabla)$ と $\tilde{\beta}_\lambda(-i\nabla)$ はそれぞれ $\alpha_\lambda(-i\nabla)$ と $\psi_\lambda(x)$, $\beta_\lambda(-i\nabla)$ と $\phi_\lambda(x)$

によって決定される。 $\tilde{\alpha}(0)$ と $\tilde{\beta}(0)$ は次の関係がある：

$$\tilde{\alpha}_\lambda(0) = m\eta_\lambda + M\tilde{\xi}_\lambda \quad (6.17)$$

$$\tilde{\beta}_\lambda(0) = m\tilde{\eta}_\lambda + M\xi_\lambda \quad (6.18)$$

次に $T_{11}(x)$ の dynamical map を求めてみよう。(6.14) を (6.7) に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T_{11}(x) &= - \frac{\partial P(x)}{\partial t} = \mathcal{A}(-i\nabla) \ddot{\eta}^0(x) + \mathcal{B}(-i\nabla) \ddot{\xi}^0(x) \\ &\quad + \sum_{\lambda \neq 0} \psi_\lambda(x) \alpha_\lambda(-i\nabla) \ddot{\eta}^0(x) + \sum_{\lambda \neq 0} \phi_\lambda(x) \beta_\lambda(-i\nabla) \ddot{\xi}^0(x) + \dots \\ &= -\mathcal{A}(-i\nabla) \varepsilon^2(-i\nabla) \eta^0(x) - \mathcal{B}(-i\nabla) \omega^2(-i\nabla) \cdot \\ &\quad \xi^0(x) + \sum_{\lambda \neq 0} \psi_\lambda(x) \alpha_\lambda(-i\nabla) \varepsilon^2(-i\nabla) \eta^0(x) + \sum_{\lambda \neq 0} \phi_\lambda(x) \beta_\lambda(-i\nabla) \cdot \\ &\quad \omega^2(-i\nabla) \xi^0(x) + \dots \end{aligned} \quad (6.19)$$

今、 $\varepsilon^2(q)$ を $\omega^2(q)$ は q が小さいところで、 q について 2 次のオーダーであると考えて、2 つの弾性係数 $K_A(q)$, $K_B(q)$ を導入する：

$$\mathcal{A}(q) \varepsilon^2(q) \mathcal{A}(q) \equiv K_A(q) q^2 \equiv U(q) \quad (6.20)$$

$$\mathcal{B}(q) \omega^2(q) \mathcal{B}(q) \equiv K_B(q) q^2 \equiv V(q) \quad (6.21)$$

また、

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda \neq 0} \frac{\partial}{\partial x} \psi_\lambda(x) \Gamma_\lambda^A(-i\nabla) \eta^0(x) &= \sum_{\lambda \neq 0} \psi_\lambda(x) \alpha_\lambda(-i\nabla) \varepsilon^2(-i\nabla) \eta^0(x) \\ \sum_{\lambda \neq 0} \frac{\partial}{\partial x} \phi_\lambda(x) \Gamma_\lambda^B(-i\nabla) \xi^0(x) &= \sum_{\lambda \neq 0} \phi_\lambda(x) \beta_\lambda(-i\nabla) \omega^2(-i\nabla) \xi^0(x) \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$(6.23)$$

なる $\Gamma_\lambda^A(-i\nabla)$ と $\Gamma_\lambda^B(-i\nabla)$ を導入することによって

$$\begin{aligned} T_{11}(x) &= K_A(-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{A}(-i\nabla) \eta^0(x) + K_B(-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{B}^{-1}(-i\nabla) \cdot \\ &\quad \xi^0(x) + \sum_{\lambda \neq 0} \psi_\lambda(x) \Gamma_\lambda^A(-i\nabla) \eta^0(x) + \sum_{\lambda \neq 0} \phi_\lambda(x) \Gamma_\lambda^B(-i\nabla) \xi^0(x) + \dots \end{aligned} \quad (6.24)$$

となる。

7. Boson 変換

次の phason 場と phonon 場を導入しよう：

$$X_A^0(x) \equiv \mathcal{A}(-i\nabla) \eta^0(x) \quad (7.1)$$

$$X_B^0(x) \equiv \mathcal{B}(-i\nabla) \xi^0(x) \quad (7.2)$$

上式は

$$A_A(\partial) X_A^0(x) = 0 \quad (7.3)$$

$$A_B(\partial) X_B^0(x) = 0 \quad (7.4)$$

を満足し、

$$A_A(\partial) \equiv -\rho_A(-i\nabla) \frac{\partial^2}{\partial t^2} - U(-i\nabla) ; \rho_A(-i\nabla) = \mathcal{A}^2(-i\nabla) \quad (7.5)$$

$$A_B(\partial) \equiv -\rho_B(-i\nabla) \frac{\partial^2}{\partial t^2} - V(-i\nabla) ; \rho_B(-i\nabla) = \mathcal{B}^2(-i\nabla) \quad (7.6)$$

である。ここで ρ_A , ρ_B はそれぞれ phason と phonon の有効質量である。 $X_A^0(x)$ と $X_B^0(x)$ は、それぞれ (6.14) 式の第 1 項、第 2 項の正準共役になっており displacement field と呼んでよいものである。もちろん X_A^0 , X_B^0 は Hermite である。

Boson 変換はこれら displacement field について行われる：

$$X_A^0(x) \rightarrow X_A^0(x) + u_A(x) \quad (7.7)$$

$$X_B^0(x) \rightarrow X_B^0(x) + u_B(x) \quad (7.8)$$

ここで、 $u_A(x)$ と $u_B(x)$ は c - 数で Heisenberg 方程式を満足している：

$$A_A(\partial) u_A(x) = 0 \quad (7.9)$$

$$A_B(\partial) u_B(x) = 0 \quad (7.10)$$

この変換は結晶の歪みを発生する。

今、Hamiltonian の dynamical map は

$$H = \int dx H(x) = H[\Psi^0, \Phi^0] + H_{A0}[X_A^0] + H_{B0}[X_B^0] \quad (7.11)$$

と書かれる。 H_{A0} と H_{B0} の部分は次のように書かれる：

$$H_{A0} [X_A^0] = \frac{1}{2} \int dx \{ \dot{X}_A^0(x) \rho_A (-i\nabla) \dot{X}_A^0(x) + \frac{\partial}{\partial x} X_A^0(x) \cdot K_A (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} X_A^0(x) \} \quad (7.12)$$

$$H_{B0} [X_B^0] = \frac{1}{2} \int dx \{ \dot{X}_B^0(x) \rho_B (-i\nabla) \dot{X}_B^0(x) + \frac{\partial}{\partial x} X_B^0(x) \cdot K_B (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} X_B^0(x) \} \quad (7.13)$$

Boson 変換は基底状態のエネルギー密度に次の変化をもたらす：

$$W [u_A, u_B] = \frac{1}{2} \int dx \{ \dot{u}_A(x) \rho_A (-i\nabla) \dot{u}_A(x) + \frac{\partial}{\partial x} u_A(x) \cdot K_A (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} u_A(x) \} + \frac{1}{2} \int dx \{ \dot{u}_B(x) \rho_B (-i\nabla) \dot{u}_B(x) + \frac{\partial}{\partial x} u_B(x) \cdot K_B (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} u_B(x) \} \quad (7.14)$$

同様にして基底状態の運動量密度の変化が次のように与えられる：

$$K [u_A, u_B] = - \rho_A(0) \int dx \dot{u}_A(x) - \int dx \dot{u}_A(x) \rho_A (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} u_A(x) - \rho_B(0) \int dx \dot{u}_B(x) - \int dx \dot{u}_B(x) \rho_B (-i\nabla) \frac{\partial}{\partial x} u_B(x) \quad (7.15)$$

同様に、 $P(x)$ や $T_{11}(x)$ の基底状態の変化は (6.14)， (6.24) からそれぞれ Boson 変換して求められる。

さて、Heisenberg 演算子 (5.31)， (5.36) の $m(x)$ ， $n(x)$ を $X_A^0(x)$ ， $X_B^0(x)$ でそれぞれ dynamical map してみよう。

$$m(x) = \sum \psi_\lambda (x + X_A^0(x)) \hat{m}_\lambda (x; X_B^0 - X_A^0, \partial X_A^0, \partial X_B^0, \psi^0, \phi^0) \quad (7.16)$$

$$n(x) = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}(x + X_B^0(x)) \hat{n}_{\lambda}(x; X_A^0 - X_B^0, \partial X_A^0, \partial X_B^0, \psi^0, \phi^0) \quad (7.17)$$

(7.7), (7.8) の Boson 変換は (7.16) と (7.17) に次の影響を与える:

$$m^u(x) = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(x + X_A^0 + u_A) \hat{m}_{\lambda}(x; X_B^0 + u_B - X_A^0 - u_A, \partial(X_A^0 + u_A), \partial(X_B^0 + u_B), \psi^0, \phi^0) \quad (7.18)$$

$$n^u(x) = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}(x + X_B^0 + u_B) \hat{m}_{\lambda}(x; X_A^0 + u_A - X_B^0 - u_B, \partial(X_A^0 + u_A), \partial(X_B^0 + u_B), \psi^0, \phi^0) \quad (7.19)$$

(7.18), (7.19) は (7.14) の基底状態のエネルギー変化 $W(u_A, u_B)$ を極小にする u_A, u_B の歪を系にもたらしことを示す。歪の量 u_A, u_B は (7.9), (7.10) で一般的に与えられる。 $u_A(x)$ は周期 a , $u_B(x)$ は周期 b の関数である。

8. 結 論

CDWのある一次元系電子-格子系において、CDWの形成とイオンによる格子の形成という二つの空間的並進対称性の破れに対応して、二つの Goldstone bosonが発生する。これらの Goldstone bosonは (5.31), (5.36) から明らかなように、CDWの位相の揺ぎ、イオンの格子点での揺ぎに対応し、それぞれ phason と phonon であることが示された。

WTI (2.9) と (2.10), 連続の式 (6.6) ~ (6.8) を使って Hamiltonian, 流束密度, 弾性テンソル等の物理諸量が, phason X_A^0 , phonon X_B^0 によって dynamical map された。Boson 変換によって, こうした物理諸量の基底状態での変化が求められた。ここで, phason spectrum として, Lee, Rice and Anderson⁴⁾ の求めた型 $\epsilon(q) = vq$ をとり, (6.20), (7.5) において $\rho_A(0), K_A(0)$ として, $\rho_A(0) = \mathcal{A}^2(0) = \frac{1}{4\pi v'}$ とおけば, $K_A(0) = v^2/4\pi v'$ となり, こうして求めた Hamiltonian, 流束密度, 弾性テンソル等の物理諸量は本質的に福山¹⁾ のものに還元することができる。しかし, (6.13), (7.15) にみられるように流速密度には新しい項があらわれている。実際の物理諸量は具体的な Lagrangian を決め Feynman diagram 等の手法で計算されるが, ここでの議論は一般的に成立する。

次に(7.16)～(7.19)式は格子やCDWの位相の歪みの機構を示唆する。CDWと格子上のイオンは相互に周期をとらえようとする。そのとき(5.31)～(5.40)の議論からわかるように、CDW $u(x)$ とイオン密度 $v(x)$ を Fourier 級数に展開したとき、同じ波数をもつ成分から歪み始め、相互に規制しながら(7.14)の歪みのエネルギーが最小になるように歪むと考えることができる。

これまでの議論は(1.4)の $u(x)$ と $v(x)$ の基本周期がそれぞれ a と b をもつことを前提として展開してきた。この議論は二つの基本周期がある限り格子に既に歪みがある場合にも本質的に同じである。その場合 phonon に光学modeが既にある系を考えることになるが、これらのmodeは興味の対象外である。

最後に情報不足の筆者に情報を提供され有益な議論をして下さった阪大工学部の一柳先生と preprint を送って下さった Alberta 大の松本先生に感謝致します。

参 考 文 献

- 1) H. Fukuyama : J. Phys. Soc. Jpn. **41** ('76) 513.
- 2) H. Matsumoto, N. J. Papastamatiou and H. Umezawa : Nucl. Phys. **B68** ('74) 236; **B82** ('74) 45; **B97** ('75) 61; **B97** ('75) 90.
H. Matsumoto and H. Umezawa : Fortschritte der Physik **24** ('76) 357.
- 3) M. Wadati, H. Matsumoto, Y. Takahashi and H. Umezawa : Phys. Lett. **62A** ('77) 255, 258, preprint.
- 4) P. A. Lee, T. M. Rice and P. W. Anderson : Solid State Commun. **14** ('74) 703.