

物性理論における群論的分岐理論入門¹ (その 2)²

—対称性の破れのための群論入門—

尾崎 正明³

(2003 年 2 月 10 日受理)

は し が き

その 1 では群論と群論的分岐理論の基礎を群 G_0 に不変な多変数関数の変分問題に即して解説した。群 G_0 の既約表現と、その表現空間における固定部分群の考察により、群 G_0 に不変な関数の極値問題の解法が簡単化される事を示した。

その 2 では電荷密度波、反強磁性等の磁性状態から超伝導状態までを統一的に扱える Hartree-Fock-Bogoljubov(HFB) 近似を群論的分岐理論の観点から解説する。

第 6 章で HFB 近似が系の持つ対称性の群 G_0 に不変な関数の極値問題として定式化できることを示す。したがって第 4 章で述べた群論的分岐理論が HFB 近似に適用出来ることになる。平均場ハミルトニアンへの群 G_0 の作用と、それによる平均場ハミルトニアンの固定部分群を定義する。平均場ハミルトニアンの固定部分群が密度行列、オーダーパラメーター、準粒子等の対称性を定めることを示す。

上記の手法の有効性を例示するため、第 7 章では群論的にも比較的理解しやすい正方対称性 D_{4h} を有する 2 次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型を取り上げる。2 次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の対称性の群 G_0 と対称性の破れの解析に必要な範囲の G_0 の既約表現について解説する。平均場ハミルトニアンの空間での G_0 の既約表現の基底を求める。

第 8 章で 2 次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の超伝導以外の対称性の破れた状態を 2 電子相互作用の既約分解、 G_0 の既約表現とその固定部分群に基づいて求める。その中で電荷密度波、電流密度波、スピン密度波、スピン流密度波等が系統的に求められることが示される。

最も一般的な平均場近似の入門と同時に、物性理論における対称性の破れの理解のための、最短で必要最小限の群論の入門コースとなっていると考える。登場する群とその既約表現について、基礎的なところから懇切丁寧に説明しているので、その 1 とあわせて読んでもらえれば、群論の知識が無くても理解可能であると思う。

その 3 (掲載号未定) では第 9 章以降を掲載する。

¹本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

²第 1 部でその 1、その 2 の 2 回に分けて掲載する予定としていたが、都合により 3 回に分けて掲載する。その 1 は物性研究 78 (2002), 511 に掲載

³E-mail: kk.ozaki@f2.dion.ne.jp

目次

第 6 章	変分問題としての Hartree-Fock-Bogoliubov 方程式とその解の対称性	207
6.1	HFB 近似と HFB ハミルトニアン	208
6.2	Bogoljubov 変換と HFB ハミルトニアンの対角化	211
6.3	HFB 自由エネルギーの極値条件と HFB ハミルトニアンの自己無撞着場条件	216
6.4	系のハミルトニアンの対称性	222
6.5	HFB ハミルトニアンと HFB 密度行列への群 G_0 の作用	225
第 7 章	2 次元正方格子上の拡張 Hubbard 模型の対称性の群 G_0 とその既約表現	232
7.1	ハミルトニアンとその対称性の群 G_0	232
7.2	直積群 $H \times K$ の既約表現	237
7.3	$P = L(e_1, e_2)D_{4h}$ の既約表現	240
7.4	スピン回転群 S の既約表現	249
7.5	R の既約表現	253
7.6	G_0 の既約表現とその基底	260
第 8 章	正方格子上の 2 次元拡張 Hubbard 模型の非超伝導状態	266
8.1	一般的諸公式	266
8.2	Γ 点非磁性状態	276
8.3	M 点非磁性状態	283
8.4	Γ 点磁性状態	296
8.5	M 点磁性状態	317
8.6	まとめ	333
付 録 A	定理 6.2 の証明	337
付 録 B	D_{4h} の既約表現行列	340
付 録 C	(7.100) の証明	342
付 録 D	電流密度演算子	344
付 録 E	スピン流密度演算子	347
参考文献		348

その 1 主要目次

第 1 章	対称性の破れとは
第 2 章	群と部分群
第 3 章	既約表現
第 4 章	群不変な関数の変分問題の解の分岐理論
第 5 章	正方対称性を有する系のスピンシングレット超伝導の Ginzburg-Landau 理論

その 3 予定主要目次

第 9 章	2 次元拡張 Hubbard 模型の超伝導状態
第 10 章	2 次元拡張 Hubbard 模型の磁場中のボルテックス状態の対称性
第 11 章	縮退 Hubbard 模型における状態の群論的分類
第 12 章	強磁性, 反強磁性と超伝導の共存状態の対称性

第6章 変分問題としての Hartree-Fock-Bogoliubov 方程式とその 解の対称性

第1部の冒頭で述べた1次元電子系の対称性の破れた状態の平均場ハミルトニアン (mean field Hamiltonian) H_m は

$$\begin{aligned}
 H_m^N &= H_m^0 = \sum_k \sum_s \epsilon(k) a_{ks}^\dagger a_{ks} \\
 H_m^{\text{CDW}} &= H_m^0 + U \sum_k \sum_s a_{(k+\pi)s}^\dagger a_{ks} \\
 H_m^{\text{BOW}} &= H_m^0 + iC \sum_k \sum_s \sin k a_{(k+\pi)s}^\dagger a_{ks} \\
 H_m^{\text{FM}} &= H_m^0 + U \sum_k \{a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}\} \\
 H_m^{\text{SDW}} &= H_m^0 + U \sum_k \{a_{(k+\pi)\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} - a_{(k+\pi)\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}\}
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

の形であらわされる。¹ ここでNは正常状態, CDWは電荷密度波, BOWはボンドオーダー波, FMは強磁性, SDWはスピン密度波状態を示す. k は電子の運動量, 和 $\sum_k$ は1次元第1ブリルアン域 (Brillouin zone): $\{-\pi \leq k \leq \pi\}$ に関する和を意味する. 第1章では取り上げなかったシングレットBCS超伝導状態の平均場ハミルトニアンは

$$H_m^{\text{BCS}} = H_m^0 + C \sum_k \{a_{k\uparrow}^\dagger a_{(-k)\downarrow}^\dagger - a_{k\downarrow}^\dagger a_{(-k)\uparrow}^\dagger\} + C \sum_k \{a_{(-k)\downarrow} a_{k\uparrow} - a_{(-k)\uparrow} a_{k\downarrow}\} \tag{6.2}$$

の形で表される. このように対称性の破れた状態の平均場ハミルトニアン H_m は

$$H_m = H_m^0 + H_m^1 \tag{6.3}$$

の形に書くことが出来る. H_m^1 は歴史的には, 平均的スピン配列を仮定する等の, それぞれの研究現場での物理的洞察によって導入された. H_m^1 はそれぞれの仕方で, 系および H_m^0 の持っていた元の対称性を破っている.

この解説では逆に, 系の正常状態の対称性の群 G_0 の部分群 $G_j \subset G_0$ を群論的分岐理論を用いて系統的に求め, G_j に対応する平均場ハミルトニアン $H_m^{G_j} = H_m^0 + H_m^1$ を求める方法を示す.

この観点から第6章では正常状態から, 磁性状態, 超伝導状態までを統一的に扱うことが出来る, 平均場近似のもっとも一般的な理論である Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 近似を変分法の立場

¹これらの平均場ハミルトニアン H_m に親しんでいない読者は, 詳しい説明は第8章で行うので, ここでは詮索せずに, 状態に対応して多様な H_m が存在することだけを認識されたい.

から取り上げる.^{14, 15)} HFB 理論が系の対称性の群 G_0 に不変な関数の極値問題として定式化できることを示す.

第 6.1 節では HFB 近似と HFB ハミルトニアンを, 第 6.2 節ではボゴリユボフ変換による HFB ハミルトニアンの対角化を述べる. 第 6.3 節では HFB 自由エネルギーの表式を求め, その極値条件から平均場の自己無撞着 (SCF) 条件が導かれることを示す. 第 6.4 節では系のハミルトニアンの対称性の群 G_0 を導入する. 第 6.5 節では HFB ハミルトニアンの固定部分群を定義する. その固定部分群が密度行列の対称性を定めることを示す.

6.1 HFB 近似と HFB ハミルトニアン

様々な場合への応用を考慮して, 次のような一般的なフェルミオン (Fermion) 系のハミルトニアンを考察する.

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j=1}^N (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle a_i^\dagger a_n^\dagger a_m a_j \quad (6.4)$$

ここで $a_i^\dagger$ (a_i) は 1 粒子状態 i (スピン等の内部自由度を含む) のフェルミオンの生成 (消滅) 演算子であり, 次の交換関係を満たす.

$$[a_i, a_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j]_+ = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0 \quad (6.5)$$

ここで $[A, B]_+ \equiv AB + BA$ は反交換子で, μ は化学ポテンシャルである. $\mathcal{H}$ がエルミート演算子であること, および (6.5) より

$$\begin{aligned} T_{ij}^* &= T_{ji} \\ \langle in | V | jm \rangle^* &= \langle jm | V | in \rangle \\ \langle ni | V | jm \rangle &= -\langle in | V | jm \rangle \\ \langle in | V | mj \rangle &= -\langle in | V | jm \rangle \\ \langle ni | V | mj \rangle &= \langle in | V | jm \rangle \end{aligned} \quad (6.6)$$

が成り立つ.

熱平衡状態における物理量 A の平均値 $\langle A \rangle$ は

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(W_0 A) \quad (6.7)$$

で与えられる. ここで W_0 は

$$W_0 = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta \mathcal{H}})} \quad (6.8)$$

で定義され, 統計演算子 (statistical operator) と呼ばれる. ここで $\beta = \frac{1}{k_B T}$ で T は絶対温度, k_B は Boltzmann 定数である. W_0 を使うと系の厳密な自由エネルギー F_0 は次式で与えられる.

$$F_0 = \text{Tr}[W_0 \mathcal{H}] + k_B T \text{Tr}[W_0 \log W_0] \quad (6.9)$$

ここで第2項は系のエントロピー項を表す. このことは W_0 を対角的にする表示を取ると確かめられる. $\mathcal{H}$ の固有値を E_l ($l = 1, 2, \dots$) とすると

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}}) &= \sum_l e^{-\beta E_l} \\ (W_0)_{ij} &= \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_l e^{-\beta E_l}} \delta_{ij} = p_i \delta_{ij} \end{aligned} \quad (6.10)$$

となる. ここで $p_i = (W_0)_{ii}$ は系が状態 i にある確率を表す. したがって

$$\text{Tr}[W_0 \log W_0] = \sum_i (W_0)_{ii} (\log W_0)_{ii} = \sum_i (W_0)_{ii} \log (W_0)_{ii} = \sum_i p_i \log p_i \quad (6.11)$$

となる. 系のエントロピー S_0 は

$$S_0 = -k_B \sum_i p_i \log p_i \quad (6.12)$$

で与えられるので, (6.9) の F_0 は

$$F_0 = \langle \mathcal{H} \rangle - TS_0 \quad (6.13)$$

と書いて, なじみの自由エネルギーの表式を与える. (6.7) の $\langle A \rangle$ や (6.9) の F_0 を求めることは特別の場合を除いては不可能で, 何らかの近似をする必要がある.

そのための最も一般性を有する近似が **Hartree-Fock-Bogoljubov(HFB)** 近似である. そこでは次のような変分変数行列 x, y で定まる **HFB** ハミルトニアン (平均場ハミルトニアン) を準備する.

$$\begin{aligned} H(Z) &= \sum_{i,j=1}^N \left\{ (x'_{ij} - \mu \delta_{ij}) a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} y_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2} (y^\dagger)_{ij} a_i a_j \right\} \\ &= \frac{1}{2} (A^\dagger Z A) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_{ii} \end{aligned} \quad (6.14)$$

ここで

$$\begin{aligned} A^\dagger &= (a_1^\dagger, a_2^\dagger, \dots, a_N^\dagger, a_1, a_2, \dots, a_N) \\ x_{ij} &= x'_{ij} - \mu \delta_{ij}, \quad x^\dagger = x, \quad y^t = -y \\ Z &= \begin{pmatrix} x & y \\ -y^* & -x^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.15)$$

ここで x, y は $N \times N$ の行列で $x^\dagger$ は x のエルミート共役行列を表し, y^t は y の転置行列を表す. したがって Z はエルミート行列である.

Hartree-Fock-Bogoljubov(HFB) 近似とは物理量 A の平均を取るとき, (6.8) の統計演算子 W_0 の代わりに (6.14) の $H(Z)$ を用いた

$$W(Z) = \frac{e^{-\beta H(Z)}}{\text{Tr}(e^{-\beta H(Z)})} \quad (6.16)$$

を使用することである。物理量 A の期待値は

$$\langle A \rangle_Z = \text{Tr}\{W(Z)A\} \quad (6.17)$$

で近似される。平均を取る場合 (6.14) の最後の項 $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_{ii}$ は (6.16) の右辺の分母と分子に共通に現れて打ち消し合って、結果に寄与しないので、以下特に断らない限り、この項を省略することにする。

HFB 近似では近似的自由エネルギー (HFB 自由エネルギーという) として (6.9) の F_0 の代わりに

$$F(Z) = \text{Tr}[W(Z)\mathcal{H}] + k_B T \text{Tr}[W(Z) \log W(Z)] \quad (6.18)$$

を用い、 Z は HFB 自由エネルギーが最小になるように定める。この表式では確率分布を定めるものとして、 $W(Z)$ を代用したもので、エネルギーの期待値は $\mathcal{H}$ の $W(Z)$ (確率分布を定める) による平均を取り、 $H(Z)$ の $W(Z)$ による平均ではないことに注意されたい。

$$Q(Z) = \text{Tr}(e^{-\beta H(Z)}) \quad (6.19)$$

とおくと

$$\begin{aligned} \text{Tr}[W(Z) \log W(Z)] &= \text{Tr}\left[\frac{e^{-\beta H(Z)}}{Q(Z)} \log \frac{e^{-\beta H(Z)}}{Q(Z)}\right] \\ &= \text{Tr}\left[\frac{e^{-\beta H(Z)}}{Q(Z)} \{-\beta H(Z) - \log Q(Z)\}\right] \\ &= -\beta \langle H(Z) \rangle_Z - \log Q(Z) \end{aligned} \quad (6.20)$$

を得て、HFB 自由エネルギー $F(Z)$ は

$$F(Z) = \langle \mathcal{H} \rangle_Z - \langle H(Z) \rangle_Z - k_B T \log Q(Z) \quad (6.21)$$

となる。

ここで以下よく使用する関係式 (6.22) を証明しておく。

命題 6.1. B を任意の演算子とすると、次の関係式が成り立つ。

$$\langle B^\dagger \rangle_Z = \langle B \rangle_Z^* \quad (6.22)$$

証明. $|f\rangle, |h\rangle$ を二つの状態としたとき、 $B^\dagger$ の定義から

$$\langle f | B | h \rangle = \langle B^\dagger f | h \rangle = \langle h | B^\dagger f \rangle^* = \langle f | B^\dagger | f \rangle^* \quad (6.23)$$

が得られ、 $|f\rangle = |h\rangle$ のとき

$$\langle f | B | f \rangle = \langle f | B^\dagger | f \rangle^* \quad (6.24)$$

となる. $H(Z)$ を対角的にする状態を $|r\rangle$ とし,

$$H(Z) |r\rangle = \varepsilon_r |r\rangle \quad (6.25)$$

とすれば,

$$\begin{aligned} \langle B^\dagger \rangle_Z &= \text{Tr} \left(\frac{e^{-\beta H(Z)}}{Q(Z)} B^\dagger \right) = \sum_r \frac{e^{-\beta \varepsilon_r}}{Q(Z)} \langle r | B^\dagger | r \rangle \\ &= \sum_r \frac{e^{-\beta \varepsilon_r}}{Q(Z)} \langle r | B | r \rangle^* = \langle B \rangle_Z^* \end{aligned} \quad (6.26)$$

を得る. ここで $\varepsilon_r, Q(Z) = \sum_r e^{-\beta \varepsilon_r}$ が実数であることを使った. ■

$H(Z)$ に対応する HFB 密度行列 $R(Z)$ を次式で定義する.

$$R(Z)_{ij} = \langle A_j^\dagger A_i \rangle_Z \quad 1 \leq i, j \leq 2N \quad (6.27)$$

ここで $A^\dagger$ は (6.15) で定義されているものである. また右辺の添え字の順序が ji と左辺の添え字順序 ij と逆になっていることに注意されたい. あらわに書くと $1 \leq i, j \leq N$ に対して

$$\begin{aligned} R(Z)_{i,j} &= \langle a_j^\dagger a_i \rangle_Z \equiv \rho(Z)_{ij} \\ R(Z)_{i,N+j} &= \langle a_j a_i \rangle_Z \equiv \lambda(Z)_{ij} \\ R(Z)_{N+i,j} &= \langle a_j^\dagger a_i^\dagger \rangle_Z = \langle (a_i a_j)^\dagger \rangle_Z = \langle a_i a_j \rangle^* = \lambda_{ji}^*(Z) = -\lambda^*(Z)_{ij} \\ R(Z)_{N+i,N+j} &= \langle a_j a_i^\dagger \rangle_Z = \langle \delta_{ij} - a_i^\dagger a_j \rangle_Z = \delta_{ij} - \rho(Z)_{ji} = \delta_{ij} - \rho^*(Z)_{ij} \end{aligned} \quad (6.28)$$

ここで $N \times N$ 行列 $\rho(Z)$ と $\lambda(Z)$ は

$$\begin{aligned} \rho(Z)_{ij} &= \langle a_j^\dagger a_i \rangle_Z = \langle (a_i^\dagger a_j)^\dagger \rangle_Z = \langle a_i^\dagger a_j \rangle_Z^* = \rho(Z)_{ji}^* \\ \lambda(Z)_{ij} &= \langle a_j a_i \rangle_Z = -\langle a_i a_j \rangle_Z = -\lambda_{ji} \end{aligned} \quad (6.29)$$

で, $\rho(Z)$ はエルミート行列, $\lambda(Z)$ は反対称行列であることが分かる. (6.28) はまとめて

$$R(Z) = \begin{pmatrix} \rho(Z) & \lambda(Z) \\ -\lambda(Z)^* & 1_N - \rho(Z)^* \end{pmatrix} \quad (6.30)$$

と書くことが出来る. ここで 1_N は $N \times N$ の単位行列である.

6.2 Bogoljubov 変換と HFB ハミルトニアン の対角化

HFB 自由エネルギー $F(Z)$ や HFB 密度行列 $R(Z)$ は HFB ハミルトニアン $H(Z)$ を対角化することによって求められる. (6.15) の Z はエルミート行列であるので, ユニタリー変換 U で対角化される.

$$U^\dagger Z U = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E' \end{pmatrix} = \tilde{E} \quad (6.31)$$

ここで E, E' はそれぞれ $N \times N$ の対角行列である. (6.31) より

$$ZU = U\tilde{E} \quad (6.32)$$

$2N \times 2N$ のユニタリ行列 U を

$$U = \begin{pmatrix} U_1 & U'_1 \\ U_2 & U'_2 \end{pmatrix} \quad (6.33)$$

と置き, (6.32) を (6.15) および, (6.33) を使って書き直せば,

$$\begin{pmatrix} x & y \\ -y^* & -x^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 & U'_1 \\ U_2 & U'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1 & U'_1 \\ U_2 & U'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E' \end{pmatrix} \quad (6.34)$$

を得る. 最初の N 個の列と第 $N+1$ 列から第 $2N$ までの N 個の列を分けて書くと

$$\begin{pmatrix} x & y \\ -y^* & -x^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} E \quad (6.35)$$

$$\begin{pmatrix} x & y \\ -y^* & -x^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U'_1 \\ U'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U'_1 \\ U'_2 \end{pmatrix} E' \quad (6.36)$$

を得る. (6.35) より

$$xU_1 + yU_2 = U_1 E \quad (6.37)$$

$$-y^*U_1 - x^*U_2 = U_2 E \quad (6.38)$$

を得る. (6.38) の複素共役を取って (-1) を掛け, (6.37) の複素共役を取って (-1) を掛けると

$$\begin{aligned} xU_2^* + yU_1^* &= U_2^*(-E) \\ -y^*U_2^* - x^*U_1^* &= U_1^*(-E) \end{aligned} \quad (6.39)$$

これは次のように書き換えられる.

$$\begin{pmatrix} x & y \\ -y^* & -x^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_2^* \\ U_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_2^* \\ U_1^* \end{pmatrix} (-E) \quad (6.40)$$

これは

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} \quad (6.41)$$

が E を固有値行列とする Z の N 個の固有ベクトルとすると

$$\begin{pmatrix} U_2^* \\ U_1^* \end{pmatrix} \quad (6.42)$$

が $(-E)$ を固有値行列とする Z の N 個の固有ベクトルとなることを示している。したがって $U, \tilde{E}$ は

$$U = \begin{pmatrix} U_1 & U_2^* \\ U_2 & U_1^* \end{pmatrix}$$

$$\tilde{E} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & & & & & \\ & E_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & E_N & & \\ & & & & -E_1 & \\ & & & & & -E_2 \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & -E_N \end{pmatrix} \quad (6.43)$$

と書ける。 U のユニタリー性

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} U_1^\dagger & U_2^\dagger \\ U_2^t & U_1^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 & U_2^* \\ U_2 & U_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1_N & 0 \\ 0 & 1_N \end{pmatrix} \quad (6.44)$$

より

$$\begin{aligned} U_1^\dagger U_1 + U_2^\dagger U_2 &= 1_N \\ U_2^t U_1 + U_1^t U_2 &= 0 \end{aligned} \quad (6.45)$$

を得る。この U を使うと $H(Z)$ は次のように対角化される。

$$\begin{aligned} H(Z) &= \frac{1}{2} A^\dagger Z A = \frac{1}{2} A^\dagger U U^\dagger Z U U^\dagger A \\ &= \frac{1}{2} A^\dagger U \tilde{E} U^\dagger A = \frac{1}{2} B^\dagger \tilde{E} B \end{aligned} \quad (6.46)$$

ここで

$$\begin{aligned} B^\dagger &= A^\dagger U, & A^\dagger &= B^\dagger U^\dagger \\ B &= U^\dagger A, & A &= U B \end{aligned} \quad (6.47)$$

$1 \leq i \leq N$ なる i に対して

$$\begin{aligned} (B^\dagger)_i &= \sum_{l=1}^{2N} A_l^\dagger U_{li} = \sum_{l=1}^N a_l^\dagger (U_1)_{li} + \sum_{l=1}^N a_l (U_2)_{li} \\ (B^\dagger)_{N+i} &= \sum_{l=1}^{2N} A_l^\dagger U_{lN+i} = \sum_{l=1}^N a_l^\dagger (U_2)_{li}^* + \sum_{l=1}^N a_l (U_1)_{li}^* \end{aligned} \quad (6.48)$$

となり

$$(B^\dagger)_i = \{(B^\dagger)_{N+i}\}^\dagger \quad (6.49)$$

が成り立つ. したがって $B^\dagger$ を

$$B^\dagger = (b_1^\dagger, b_2^\dagger, \dots, b_N^\dagger, b_1, b_2, \dots, b_N) \quad (6.50)$$

と書くことが出来る. ここで $1 \leq i \leq N$ に対して

$$\begin{aligned} b_i^\dagger &= \sum_{l=1}^N \{a_l^\dagger(U_1)_{li} + a_l(U_2)_{li}\} \\ b_i &= \sum_{l=1}^N \{a_l(U_1)_{li}^* + a_l^\dagger(U_2)_{li}^*\} \end{aligned} \quad (6.51)$$

である. $b_i^\dagger, b_i$ ($i = 1, \dots, N$) が Fermion の反交換関係を満たすことは次のようにして確かめられる.

$$\begin{aligned} b_i^\dagger b_j + b_j b_i^\dagger &= \sum_{l,m=1}^N \{ (a_l^\dagger(U_1)_{li} + a_l(U_2)_{li})(a_m(U_1)_{mj}^* + a_m^\dagger(U_2)_{mj}^*) \\ &\quad + (a_m(U_1)_{mj}^* + a_m^\dagger(U_2)_{mj}^*)(a_l^\dagger(U_1)_{li} + a_l(U_2)_{li}) \} \\ &= \sum_{l,m=1}^N \{ (a_l^\dagger a_m^\dagger + a_m^\dagger a_l^\dagger)(U_1)_{li}(U_2)_{mj}^* + (a_l a_m + a_m a_l)(U_2)_{li}(U_1)_{mj}^* \\ &\quad + (a_l^\dagger a_m + a_m a_l^\dagger)(U_1)_{li}(U_1)_{mj}^* + (a_l a_m^\dagger + a_m^\dagger a_l)(U_2)_{li}(U_2)_{mj}^* \} \\ &= \sum_{l,m=1}^N \{ (U_1)_{li}(U_1)_{lj}^* + (U_2)_{li}(U_2)_{lj}^* \} \\ &= (U_1^\dagger U_1)_{ji} + (U_2^\dagger U_2)_{ji} = (U_1^\dagger U_1 + U_2^\dagger U_2)_{ji} = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (6.52)$$

ここで最後の等式は (6.45) を使った. $b_i^\dagger b_j^\dagger + b_j^\dagger b_i^\dagger = 0$, $b_i b_j + b_j b_i = 0$ も同様に証明できる. このような Fermion $A^\dagger$ から Fermion $B^\dagger$ への変換

$$\begin{aligned} B^\dagger &= (b_1^\dagger, b_2^\dagger, \dots, b_N^\dagger, b_1, b_2, \dots, b_N) = A^\dagger U \\ &= (a_1^\dagger, a_2^\dagger, \dots, a_N^\dagger, a_1, a_2, \dots, a_N) \begin{pmatrix} U_1 & U_2^* \\ U_2 & U_1^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.53)$$

を **Bogoljubov 変換** (Bogoljubov transformation) という. $B^\dagger$ を使うと HFB ハミルトニアン $H(Z)$ は

$$H(Z) = \frac{1}{2} B^\dagger \tilde{E} B = \frac{1}{2} (b_1^\dagger, \dots, b_N^\dagger, b_1, \dots, b_N) \begin{pmatrix} E_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & E_N & & & \\ & & & -E_1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & -E_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \\ b_1^\dagger \\ \vdots \\ b_N^\dagger \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N (E_l b_l^\dagger b_l - E_l b_l b_l^\dagger) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \{E_l b_l^\dagger b_l - E_l (1 - b_l^\dagger b_l)\} \\
 &= \sum_{l=1}^N E_l b_l^\dagger b_l - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N E_l
 \end{aligned} \tag{6.54}$$

と表される。 $b_l^\dagger(b_l)$ は準粒子 (quasi particle) またはボゴロン (bogolon) の生成 (消滅) 演算子と呼ばれる。 $b_l |0\rangle_B = 0$ なる状態 $|0\rangle_B$ を **Bogoljubov 真空** と呼ぶことにする。 $b_l^\dagger |0\rangle_B$ が $H(Z)$ の固有関数であることはつぎのようにして分かる。

$$\begin{aligned}
 H(Z) b_l^\dagger |0\rangle_B &= \left\{ \sum_{j=1}^N E_j b_j^\dagger b_j - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N E_j \right\} b_l^\dagger |0\rangle_B \\
 &= \left\{ E_l b_l^\dagger b_l - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N E_j \right\} b_l^\dagger |0\rangle_B \\
 &= \left(E_l - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N E_j \right) b_l^\dagger |0\rangle_B
 \end{aligned} \tag{6.55}$$

従って $b_l^\dagger |0\rangle_B$ は $H(Z)$ の固有値 $(E_l - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N E_j)$ の固有関数である。 Bogoljubov 変換を使うと次の命題を証明できる。

命題 6.2. HFB 密度行列 $R(Z)$ は Z を使って次式で表される。

$$R(Z) = (1_{2N} + e^{\beta Z})^{-1} \tag{6.56}$$

証明. (6.54) を使うと

$$\begin{aligned}
 Q(Z) &= \text{Tr}(e^{-\beta H(Z)}) = \text{Tr}[\exp\{-\beta \sum_{l=1}^N (E_l b_l^\dagger b_l - \frac{1}{2} E_l)\}] \\
 &= \prod_{l=1}^N \text{Tr}[\exp\{-\beta E_l b_l^\dagger b_l\}] \exp\{\frac{1}{2} \beta \sum_{l=1}^N E_l\} \\
 &= \exp\{\frac{\beta}{2} \sum_{l=1}^N E_l\} \prod_{l=1}^N (1 + e^{-\beta E_l})
 \end{aligned} \tag{6.57}$$

これより物理量の平均をとる場合、 $\exp\{\frac{\beta}{2} \sum_{l=1}^N E_l\}$ が分母分子の両方に存在して打ち消しあう。したがって

$$\begin{aligned}
 \langle b_i^\dagger b_j \rangle_Z &= \frac{\text{Tr}(e^{-\beta \sum_l E_l b_l^\dagger b_l} b_i^\dagger b_j)}{\prod_{l=1}^N (1 + e^{-\beta E_l})} \\
 &= \delta_{ij} \frac{e^{-\beta E_i}}{1 + e^{-\beta E_i}} = \delta_{ij} \frac{1}{1 + e^{\beta E_i}} = \delta_{ij} f_i \\
 \langle b_i b_j^\dagger \rangle_Z &= \langle (\delta_{ij} - b_j^\dagger b_i) \rangle_Z = \delta_{ij} (1 - f_i) = \delta_{ij} \frac{1}{1 + e^{\beta(-E_i)}}
 \end{aligned} \tag{6.58}$$

を得る. ここで

$$f_i = \frac{1}{1 + e^{\beta E_i}} \quad (6.59)$$

である. これより

$$\begin{aligned} \langle B_i^\dagger B_j \rangle_Z &= \delta_{ij} \frac{1}{1 + e^{\beta(E_i)}} = \delta_{ij} f_i, & 1 \leq i \leq N \\ \langle B_i^\dagger B_j \rangle_Z &= \delta_{ij} \frac{1}{1 + e^{\beta(-E_i)}} = \delta_{ij} (1 - f_i), & N + 1 \leq i \leq 2N \end{aligned} \quad (6.60)$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} R(Z)_{ij} &= \langle A_j^\dagger A_i \rangle_Z = \langle (B^\dagger U^\dagger)_j (UB)_i \rangle_Z \\ &= \langle \left(\sum_l B_l^\dagger U_{lj}^\dagger \right) \left(\sum_k U_{ik} B_k \right) \rangle_Z \\ &= \sum_{lk} U_{lj}^\dagger U_{ik} \langle B_l^\dagger B_k \rangle_Z \\ &= \sum_{kl} U_{ik} \tilde{F}_{kl} U_{lj}^\dagger \\ &= (U \tilde{F} U^\dagger)_{ij} \end{aligned} \quad (6.61)$$

ここで $\tilde{F}_{kl} = \langle B_l^\dagger B_k \rangle_Z$ で,

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} f_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & f_N & & \\ & & & 1 - f_1 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 1 - f_N \end{pmatrix} = (1_{2N} + e^{\beta \tilde{E}})^{-1} \quad (6.62)$$

で定義される. したがって

$$\begin{aligned} R(Z) &= U \tilde{F} U^\dagger = U (1_{2N} + e^{\beta \tilde{E}})^{-1} U^\dagger \\ &= (1_{2N} + e^{\beta U \tilde{E} U^\dagger})^{-1} \\ &= (1_{2N} + e^{\beta Z})^{-1} \end{aligned} \quad (6.63)$$

ここで最後の等式は $U^\dagger Z U = \tilde{E}$ から導かれる $Z = U \tilde{E} U^\dagger$ を使った. ■

6.3 HFB 自由エネルギーの極値条件と HFB ハミルトニアン の 自己無撞 着場条件

HFB 自由エネルギー $F(Z)$ に関して次の命題が成り立つ.

命題 6.3. HFB 自由エネルギー $F(Z)$ は $R(Z)$ を使って

$$\begin{aligned}
 F(Z) = F(R) = & \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \rho(Z)_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijmn} [in | V | jm] \rho(Z)_{ji} \rho(Z)_{mn} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (\lambda(Z)^\dagger)_{ni} \lambda(Z)_{jm} \\
 & + \frac{1}{2\beta} \text{tr} [R(Z) \log R(Z) + (1_{2N} - R(Z)) \log (1_{2N} - R(Z))]
 \end{aligned} \tag{6.64}$$

で表される。ここで

$$[in | V | jm] = \langle in | V | jm \rangle - \langle in | V | mj \rangle \tag{6.65}$$

であり, $\text{tr}[A]$ は $2N \times 2N$ 行列 A のトレース $\sum_{i=1}^{2N} A_{ii}$ を意味する。

証明. (6.21) より $\langle \mathcal{H} \rangle_Z$ および $-\langle H(Z) \rangle_Z - k_B T \log Q(Z)$ を $R(Z) = \{\rho(Z), \lambda(Z)\}$ で表す必要がある。Bloch-De Dominicis の定理¹⁶⁾ を4個の演算子の場合に適用した

$$\langle a_i^\dagger a_n^\dagger a_m a_j \rangle_Z = \langle a_i^\dagger a_j \rangle_Z \langle a_n^\dagger a_m \rangle_Z - \langle a_i^\dagger a_m \rangle_Z \langle a_n^\dagger a_j \rangle_Z + \langle a_i^\dagger a_n^\dagger \rangle_Z \langle a_m a_j \rangle_Z \tag{6.66}$$

に注意すると,

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{H} \rangle_Z &= \sum_{i,j=1}^N (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle_Z + \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle \langle a_i^\dagger a_n^\dagger a_m a_j \rangle_Z \\
 &= \sum_{i,j=1}^N (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \langle a_i^\dagger a_j \rangle_Z \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle \{ \langle a_i^\dagger a_j \rangle_Z \langle a_n^\dagger a_m \rangle_Z - \langle a_i^\dagger a_m \rangle_Z \langle a_n^\dagger a_j \rangle_Z + \langle a_i^\dagger a_n^\dagger \rangle_Z \langle a_m a_j \rangle_Z \} \\
 &= \sum_{i,j=1}^N (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \rho(Z)_{ji} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle \{ \rho(Z)_{ji} \rho(Z)_{mn} - \rho(Z)_{mi} \rho(Z)_{jn} + \lambda(Z)_{ni}^\dagger \lambda(Z)_{jm} \}
 \end{aligned} \tag{6.67}$$

を得る。添え字の交換 $j \leftrightarrow m$ を行くと

$$\sum_{i,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle \rho_{mi} \rho_{jn} = \sum_{i,j,m,n=1}^N \langle in | V | mj \rangle \rho_{ji} \rho_{mn} \tag{6.68}$$

を得る。これより

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{H} \rangle_Z &= \sum_{i,j=1}^N (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \rho(Z)_{ji} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n=1}^N \{ [in | V | jm] \rho(Z)_{ji} \rho(Z)_{mn} + \langle in | V | jm \rangle \lambda(Z)_{ni}^\dagger \lambda(Z)_{jm} \}
 \end{aligned}$$

を得る.

$\langle H(Z) \rangle_Z$ は (6.54) より

$$\begin{aligned}\langle H(Z) \rangle_Z &= \left\langle \sum_{l=1}^N \left\{ E_l b_l^\dagger b_l - \frac{1}{2} E_l \right\} \right\rangle \\ &= \sum_{l=1}^N E_l f_l - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N E_l\end{aligned}\tag{6.69}$$

となる. また

$$\begin{aligned}kT \log Q(Z) &= \frac{1}{\beta} \log \text{Tr} [e^{-\beta H(Z)}] \\ &= \frac{1}{\beta} \log \text{Tr} [e^{-\beta \{ \sum_l E_l b_l^\dagger b_l - \frac{1}{2} \sum_l E_l \}}] \\ &= \frac{1}{2} \sum_l E_l + \frac{1}{\beta} \sum_l \log (1 + e^{-\beta E_l})\end{aligned}\tag{6.70}$$

したがって

$$\begin{aligned}-\langle H(Z) \rangle_Z - kT \log Q(Z) &= -\sum_l E_l f_l - \frac{1}{\beta} \sum_l \log (1 + e^{-\beta E_l}) \\ &= -\sum_l E_l f_l + \sum_l E_l + \frac{1}{\beta} \sum_l \log \frac{1}{1 + e^{\beta E_l}} \\ &= \sum_l (1 - f_l) E_l + \frac{1}{\beta} \sum_l \log \frac{1}{1 + e^{\beta E_l}} \\ &= \sum_l \frac{E_l e^{\beta E_l}}{1 + e^{\beta E_l}} + \frac{1}{\beta} \sum_l \log \frac{1}{1 + e^{\beta E_l}}\end{aligned}\tag{6.71}$$

一方 $R(Z) = U \tilde{F} U^\dagger$ より

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\beta} \text{tr} [R(Z) \log R(Z) + (1_{2N} - R(Z)) \log (1_{2N} - R(Z))] \\ &= \frac{1}{2\beta} \text{tr} [U \tilde{F} U^\dagger \log (U \tilde{F} U^\dagger) + (1_{2N} - U \tilde{F} U^\dagger) \log (1_{2N} - U \tilde{F} U^\dagger)] \\ &= \frac{1}{2\beta} \text{tr} [\tilde{F} \log \tilde{F} + (1_{2N} - \tilde{F}) \log (1_{2N} - \tilde{F})] \\ &= \frac{1}{2\beta} \sum_l [f_l \log f_l + (1 - f_l) \log (1 - f_l) + (1 - f_l) \log (1 - f_l) + f_l \log f_l] \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_l [f_l \log f_l + (1 - f_l) \log (1 - f_l)] \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_l \left[\frac{1}{1 + e^{\beta E_l}} \log \frac{1}{1 + e^{\beta E_l}} + \frac{e^{\beta E_l}}{1 + e^{\beta E_l}} \log \frac{e^{\beta E_l}}{1 + e^{\beta E_l}} \right] \\ &= \sum_l \left[\frac{E_l e^{\beta E_l}}{1 + e^{\beta E_l}} + \frac{1}{\beta} \log \frac{1}{1 + e^{\beta E_l}} \right] \\ &= -\langle H(Z) \rangle_Z - kT \log Q(Z)\end{aligned}\tag{6.72}$$

こうして HFB 自由エネルギー $F(Z)$ は次式で与えられる.

$$F(Z) = F(R) = \langle \mathcal{H} \rangle_Z + \frac{1}{2\beta} \text{tr} [R(Z) \log R(Z) + (1_{2N} - R(Z)) \log (1_{2N} - R(Z))] \quad (6.73a)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \rho(Z)_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijmn} [in | V | jm] \rho(Z)_{ji} \rho(Z)_{mn} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (\lambda(Z)^\dagger)_{ni} \lambda(Z)_{jm} \\ &\quad + \frac{1}{2\beta} \text{tr} [R(Z) \log R(Z) + (1_{2N} - R(Z)) \log (1_{2N} - R(Z))] \end{aligned} \quad (6.73b)$$

■

ここで (6.64) の $F(R) = F(Z)$ の極値を求める為に, $F(R)$ の R に関する 1 次変分を求めよう.

命題 6.4. $F(R)$ の R に関する 1 次変分 δF は次式で与えられる.

$$\begin{aligned} \delta F &= \frac{1}{2} \text{tr} \left[\delta R \left\{ \tilde{\epsilon} + \frac{1}{\beta} \log [R(1 - R)^{-1}] \right\} \right] \\ \tilde{\epsilon} &= \begin{pmatrix} \epsilon & \Delta \\ -\Delta^* & -\epsilon^* \end{pmatrix} \\ \epsilon_{ij} &= T_{ij} - \mu \delta_{ij} + \sum_{mn} [in | V | jm] \rho_{mn} \\ \Delta_{in} &= \sum_{jm} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{jm} \end{aligned} \quad (6.74)$$

証明. (6.64) を R の 1 次変分を取ると

$$\delta F = \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \delta \rho_{ji} \quad (6.75a)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ijmn} [in | V | jm] \delta \rho_{ji} \rho_{mn} \quad (6.75b)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ijmn} [in | V | jm] \rho_{ji} \delta \rho_{mn} \quad (6.75c)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \delta \lambda_{ni}^\dagger \lambda_{jm} \quad (6.75d)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{ni}^\dagger \delta \lambda_{jm} \quad (6.75e)$$

$$+ \frac{1}{2\beta} \text{tr} \left[\delta R \log R + R \frac{1}{R} \delta R - \delta R \log (1_{2N} - R) + (1_{2N} - R) \frac{1}{1_{2N} - R} (-\delta R) \right] \quad (6.75f)$$

ここで (6.75c) は添え字の交換 $i \leftrightarrow n, j \leftrightarrow m$ および (6.6) を使うと

$$\frac{1}{2} \sum_{ijmn} [in | V | jm] \rho_{ji} \delta \rho_{mn} = \frac{1}{2} \sum_{ijmn} [in | V | jm] \delta \rho_{ji} \rho_{mn} \quad (6.76)$$

を得る. したがって

$$(6.75a) + (6.75b) + (6.75c) = \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \delta \rho_{ji} + \sum_{ijmn} [in | V | jm] \delta \rho_{ji} \rho_{mn} \quad (6.77)$$

を得る. 一方

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\text{tr}(\delta R\tilde{\epsilon}) &= \frac{1}{2}\text{tr}\left\{\begin{pmatrix} \delta\rho & \delta\lambda \\ -\delta\lambda^* & -\delta\rho^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \epsilon & \Delta \\ -\Delta^* & -\epsilon^* \end{pmatrix}\right\} \\ &= \frac{1}{2}\text{tr}(\delta\rho\epsilon + \delta\rho^*\epsilon^* - \delta\lambda\Delta^* - \delta\lambda^*\Delta)\end{aligned}\quad (6.78)$$

(6.74) より

$$\begin{aligned}\text{tr}(\delta\rho\epsilon) &= \sum_{ij} \delta\rho_{ji}\epsilon_{ij} \\ &= \sum_{ij} \delta\rho_{ji}\{(T_{ij} - \mu\delta_{ij}) + \sum_{mn} [in | V | jm]\rho_{mn}\} \\ \text{tr}(\delta\rho^*\epsilon^*) &= \sum_{ij} \delta\rho_{ji}^*\epsilon_{ij}^* \\ &= \sum_{ij} \delta\rho_{ji}^*\{(T_{ij}^* - \mu\delta_{ij}) + \sum_{mn} [in | V | jm]^*\rho_{mn}^*\} \\ &= \sum_{ij} \delta\rho_{ij}\{(T_{ji} - \mu\delta_{ji}) + \sum_{mn} [jm | V | in]\rho_{nm}\} \\ &= \sum_{ij} \delta\rho_{ji}\{(T_{ij} - \mu\delta_{ij}) + \sum_{mn} [in | V | jm]\rho_{mn}\}\end{aligned}\quad (6.79)$$

$$\quad (6.80)$$

ここで式 (6.80) 3 番目の等号は (6.6) を使い, 4 番目の等号は添え字の交換 $i \leftrightarrow j, m \leftrightarrow n$ により得られた. これより

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\text{tr}(\delta\rho\epsilon + \delta\rho^*\epsilon^*) &= \sum_{ij} \delta\rho_{ji}\{(T_{ij} - \mu\delta_{ij}) + \sum_{mn} [in | V | jm]\rho_{mn}\} \\ &= (6.75a) + (6.75b) + (6.75c)\end{aligned}\quad (6.81)$$

が得られる. また

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\text{tr}(-\delta\lambda\Delta^*) &= -\frac{1}{2}\sum_{jm} \delta\lambda_{mj}\Delta_{jm}^* = -\frac{1}{2}\sum_{jm} \delta\lambda_{mj}\sum_{in} \langle jm | V | in \rangle^* \lambda_{in}^* \\ &= \frac{1}{2}\sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{ni}^\dagger \delta\lambda_{jm} = (6.75e)\end{aligned}\quad (6.82)$$

を得る. 同様に

$$\frac{1}{2}\text{tr}(-\delta\lambda^*\Delta) = (6.75d)\quad (6.83)$$

を得る. (6.75f) は

$$\frac{1}{2}\text{tr}\left\{\frac{1}{\beta}\delta R \log [R(1_{2N} - R)^{-1}]\right\}\quad (6.84)$$

となる. (6.81), (6.82), (6.83), (6.84) より F の 1 次変分が (6.74) になることが証明された. ■

1 次変分が分かると HFB 自由エネルギー $F(Z) = F(R)$ の極値条件は次の様になる.

定理 6.1. 自由エネルギー $F(Z) = F(R)$ が極値を取るときは

$$\begin{aligned} x_{ij} &= T_{ij} - \mu \delta_{ij} + \sum_{mn} [in | V | jm] \rho_{mn} \\ y_{in} &= \sum_{mj} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{jm} \end{aligned} \quad (6.85)$$

が成り立つ.

証明. (6.74) より

$$\delta F = 0 \quad (6.86)$$

を用いると

$$\tilde{\epsilon} + \frac{1}{\beta} \log R(1_{2N} - R)^{-1} = 0 \quad (6.87)$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} \log R(1_{2N} - R)^{-1} &= -\beta \tilde{\epsilon} \\ R(1_{2N} - R)^{-1} &= e^{-\beta \tilde{\epsilon}} \\ R &= e^{-\beta \tilde{\epsilon}} (1_{2N} - R) \\ (1_{2N} + e^{-\beta \tilde{\epsilon}}) R &= e^{-\beta \tilde{\epsilon}} \\ R &= (1_{2N} + e^{\beta \tilde{\epsilon}})^{-1} \end{aligned} \quad (6.88)$$

を得る. これと (6.63) とを考慮すると, F の極値では $Z = \tilde{\epsilon}$ が成り立つ. したがって (6.85) が成り立つ. ■

F の極値条件で成り立つ関係式 (6.85) を自己無撞着場 (self-consistent field) の条件, 略して SCF 条件という. (6.85) を満たす $Z = (x, y)$ を HFB 方程式の解という. 特に $y = 0, \lambda = 0$ のとき (6.85) を満たす x を Hartree-Fock (HF) 方程式の解という.

一方 SCF 条件 (6.85) はもっと直接的な方法でも導かれる. (6.4) のハミルトニアン第二項の4個のフェルミオン演算子の積のうち, あらゆる可能な2個のフェルミオン演算子の積を平均で置き換え, 残りの2個のフェルミオン演算子をそのままにして近似すると

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{1,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle a_i^\dagger a_n^\dagger a_m a_j \Rightarrow \\ &\frac{1}{2} \sum_{1,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle \{ a_i^\dagger \langle a_n^\dagger a_m \rangle a_j - a_i^\dagger \langle a_n^\dagger a_j \rangle a_m - a_n^\dagger \langle a_i^\dagger a_m \rangle a_j + a_n^\dagger \langle a_i^\dagger a_j \rangle a_m \\ &\quad + \langle a_i^\dagger a_n^\dagger \rangle a_m a_j + a_i^\dagger a_n^\dagger \langle a_m a_j \rangle \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{1,j,m,n=1}^N \langle in | V | jm \rangle \{ \langle a_n^\dagger a_m \rangle a_i^\dagger a_j + \langle a_i^\dagger a_j \rangle a_n^\dagger a_m - \langle a_n^\dagger a_j \rangle a_i^\dagger a_m - \langle a_i^\dagger a_m \rangle a_n^\dagger a_j \\ &\quad + \langle a_i^\dagger a_n^\dagger \rangle a_m a_j + \langle a_m a_j \rangle a_i^\dagger a_n^\dagger \} \end{aligned} \quad (6.89)$$

を得る. 第2項で添え字の入れ替え $n \leftrightarrow i, m \leftrightarrow j$, 第3項で $m \leftrightarrow j$, 第4項で $i \leftrightarrow n$, 第5項で $m \leftrightarrow i, j \leftrightarrow$ を行い, (6.6) を考慮すると (6.89) は

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \left\{ \sum_{mn} [in | V | jm] \rho_{mn} \right\} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{in} \left\{ \sum_{mj} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{jm} \right\} a_i^\dagger a_n^\dagger \\ + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{jm} \langle ni | V | jm \rangle^* \lambda_{mj}^* \right\} a_i a_n \end{aligned} \quad (6.90)$$

となり (6.89) の置き換えで

$$\mathcal{H} \Rightarrow \sum_{ij} \left\{ x_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} y_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2} (y^\dagger)_{ij} a_i a_j \right\} \quad (6.91)$$

となる. ここで x, y は SCF 条件 (6.85) で与えられる. このように4個のフェルミオン演算子の積の内, 交換関係を考慮しながらあらゆる可能な二個の積を平均値で置き換えることによっても HFB 理論と同一の式を得る. 変分法による定式化を行ったのは第4章の群論的分岐理論が直接適用出来るからである.

SCF 条件は $Z = (x, y)$ を数値的に求める場合に使われる. 通常は $R(Z)$ の初期値 R_0 を FM, SDW 状態等に合致するように仮定して (6.85) より $Z_0 = (x_0, y_0)$ を求め, これを Bogoljubov 変換で対角化して次の R_1 を求める. 以下逐次的にこれを繰り返して, R_i が一定の値に収束すれば極値を与える R したがって Z が得られたと考える.

簡単な FM, SDW 状態では初期値の R の形を書き下すことが出来るが, より複雑な状態ではその方法は不可能になる. 以下の章で可能な初期値 $R_0 = (\rho_0, \lambda_0)$ の形を対称性により群論的に定める方法を解説する.

6.4 系のハミルトニアンの対称性

ある演算子 g がフェルミオンの空間 $V_1 = \{a_i^\dagger, a_i\}_C$ ($i = 1, \dots, N$) に作用するとする. すなわち g がユニタリー演算子の場合は

$$\begin{aligned} g \cdot (ca_i^\dagger) &= c \sum_j a_j^\dagger g_{ji} \\ g \cdot (ca_i) &= c \sum_j a_j g_{ji}^* \end{aligned} \quad (6.92)$$

g が時間反転操作を含む反ユニタリー演算子 (anti-unitary operator) の場合は,

$$\begin{aligned} g \cdot (ca_i^\dagger) &= c^* \sum_j a_j^\dagger g_{ji} \\ g \cdot (ca_i) &= c^* \sum_j a_j g_{ji}^* \end{aligned} \quad (6.93)$$

で与えられるものとする. ここで c は複素数, g_{ij} は g に対応する $N \times N$ の行列の ij 成分である².

$$\tilde{g} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & g^* \end{pmatrix} \quad (6.94)$$

²演算子 g と ij 成分 g_{ij} を持つ行列を同じ記号 g で表す.

と定義すると

$$g \cdot A^\dagger = A^\dagger \tilde{g} \quad (6.95)$$

と書ける.

ハミルトニアン $\mathcal{H}$ への g の作用は次式で定義される.

$$\begin{aligned} g \cdot \mathcal{H} &= \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij})^{(*)} \left(\sum_{i'} a_{i'}^\dagger g_{i'i} \right) \left(\sum_{j'} a_{j'} g_{j'j}^* \right) \\ &\quad + \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle^{(*)} \left(\sum_{i'} a_{i'}^\dagger g_{i'i} \right) \left(\sum_{n'} a_{n'}^\dagger g_{n'n} \right) \left(\sum_{m'} a_{m'} g_{m'm}^* \right) \left(\sum_{j'} a_{j'} g_{j'j}^* \right) \\ &= \sum_{i'j'} \left\{ \sum_{ij} g_{i'i} (T_{ij} - \mu \delta_{ij})^{(*)} g_{jj'}^\dagger \right\} a_{i'}^\dagger a_j \\ &\quad + \sum_{i'j'm'n'} \left\{ \sum_{ijmn} g_{i'i} g_{n'n} \langle in | V | jm \rangle^{(*)} g_{jj'}^\dagger g_{mm'}^\dagger \right\} a_{i'}^\dagger a_n^\dagger a_{m'} a_{j'} \end{aligned} \quad (6.96)$$

ここで $(*)$ は g が反ユニタリー演算子の場合に複素共役を取ることを意味する. 以後の表式で $(*)$ はこの意味を持つものとする. 系の対称性の群 (group of symmetry of the system) G_0 はハミルトニアン $\mathcal{H}$ を不変にする g の集まり, すなわち

$$G_0 = \{g \mid g \cdot \mathcal{H} = \mathcal{H}\} \quad (6.97)$$

で定義される. (6.96) より $g \in G_0$ は

$$\begin{aligned} \sum_{i'j'} g_{i'i'} (T_{i'j'} - \mu \delta_{i'j'})^{(*)} g_{j'j}^\dagger &= (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \\ \sum_{i'j'm'n'} g_{i'i'} g_{n'n'} \langle i'n' | V | j'm' \rangle^{(*)} g_{jj'}^\dagger g_{m'm}^\dagger &= \langle in | V | jm \rangle \end{aligned} \quad (6.98)$$

を意味する. G_0 の具体的イメージを把握するために 1 次元格子上的拡張 Hubbard 模型の例を示す.

例 6.1. 1 次元格子上的拡張 Hubbard 模型の対称性

1 次元格子 (格子定数 = 1) 上の拡張 Hubbard 模型のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -t \sum_{ms} \{ a_{ms}^\dagger a_{m+1s} + a_{m+1s}^\dagger a_{ms} \} - \mu \sum_{ms} a_{ms}^\dagger a_{ms} \\ &\quad + \frac{1}{2} U \sum_{mss'} a_{ms}^\dagger a_{ms'}^\dagger a_{ms'} a_{ms} + V \sum_{mss'} a_{ms}^\dagger a_{ms} a_{m+1s'}^\dagger a_{m+1s'} \end{aligned} \quad (6.99)$$

で与えられる. ここで $a_{ms}^\dagger (a_{ms})$ はスピン $s = \uparrow, \downarrow$ を持つ電子を 1 次元の格子点 m ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) に生成 (消滅) するフェルミオン演算子である. t は隣の格子への飛び移り積分 (transfer integral) である. U は 2 個の電子が同一格子点に来たときに働く相互作用である. V は 2 個の電子が最隣接格子点に来たときに働く相互作用である.

このハミルトニアンは次の対称性の群

$$G_0 = P \times S \times R \quad (6.100)$$

を持つ. ここで P は 1 次元格子の空間群で

$$P = L(e_1)C_I \quad (6.101)$$

で与えられる. $L(e_1)$ は $e_1 = e_x$ を基本周期ベクトルとする 1 次元格子の並進群である. $\{a_{ms}^\dagger, a_{ms}\}$ への ne_1 の並進 $T(n) \in T(e_1)$ の作用は次式で与えられる.

$$\begin{aligned} T(n) \cdot a_{ms}^\dagger &= a_{(m+n)s}^\dagger \\ T(n) \cdot a_{ms} &= a_{(m+n)s} \end{aligned} \quad (6.102)$$

$C_I = (E, I)$ で I は空間反転である. I の $\{a_{ms}^\dagger, a_{ms}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} I \cdot a_{ms}^\dagger &= a_{(-m)s}^\dagger \\ I \cdot a_{ms} &= a_{(-m)s} \end{aligned} \quad (6.103)$$

S はスピン回転の群³で, 単位ベクトル $\mathbf{n}$ の方向の回転軸の周りの角 θ ($\mathbf{n}$ の方向に右ねじが進むような回転を正の向きに取る) のスピン回転を $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ とすると

$$u(\mathbf{n}, \theta) = 1_2 \cos(\theta/2) - i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sin(\theta/2) \quad (6.104)$$

の 2×2 のユニタリ行列で与えられる.¹⁰⁾ ここで 1_2 は 2×2 の単位行列であり, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ はパウリ行列である. $u(\mathbf{n}, \theta)$ の $\{a_{ms}^\dagger, a_{ms}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{ms}^\dagger &= \sum_{s'} \{u(\mathbf{n}, \theta)\}_{s's} a_{ms'}^\dagger \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{ms} &= \sum_{s'} \{u(\mathbf{n}, \theta)\}_{s's}^* a_{ms'} \end{aligned} \quad (6.105)$$

で与えられる.

$\mathbf{R}$ は

$$\mathbf{R} = \Phi + t\Phi \quad (6.106)$$

で定義される. ここで Φ はグローバルゲージ変換 (global gauge transformation) で, $\tilde{\phi} \in \Phi$ の $\{a_{ms}^\dagger, a_{ms}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot a_{ms}^\dagger &= e^{i\frac{\tilde{\phi}}{2}} a_{ms}^\dagger \\ \tilde{\phi} \cdot a_{ms} &= e^{-i\frac{\tilde{\phi}}{2}} a_{ms} \end{aligned} \quad (6.107)$$

で定義される.⁴

t は時間反転で $\{a_{ms}^\dagger, a_{ms}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} t \cdot (ca_{m\uparrow}^\dagger) &= -c^* a_{m\downarrow}^\dagger \\ t \cdot (ca_{m\downarrow}^\dagger) &= c^* a_{m\uparrow}^\dagger \\ t \cdot (ca_{m\uparrow}) &= -c^* a_{m\downarrow} \\ t \cdot (ca_{m\downarrow}) &= c^* a_{m\uparrow} \end{aligned} \quad (6.108)$$

³ S の詳しい議論は第 7 章で行うので, ここでは読み飛ばしてもよい

⁴ $\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\}$ への作用が $e^{i\phi}$ になるように $\frac{1}{2}$ を導入した.

で与えられる. ここで c は複素数である. (6.99) のハミルトニアン $\mathcal{H}$ が G_0 のこれらの元の作用に対して不変であることは容易に確かめられる.

6.5 HFB ハミルトニアンと HFB 密度行列への群 G_0 の作用

HFB ハミルトニアン $H(Z)$ への群 G_0 の作用は $g \in G_0$ に対して

$$g \cdot H(Z) = \sum_{ij} \{ x_{ij}^{(*)} (g \cdot a_i^\dagger) (g \cdot a_j) + \frac{1}{2} y_{ij}^{(*)} (g \cdot a_i^\dagger) (g \cdot a_j^\dagger) + \frac{1}{2} (y^\dagger)_{ij}^{(*)} (g \cdot a_i) (g \cdot a_j) \} \quad (6.109)$$

で定義される. $g \cdot H(Z)$ は次のように表される.

命題 6.5.

$$g \cdot H(Z) \equiv H(Z_g) \quad (6.110)$$

とすれば, Z_g は

$$\begin{aligned} Z_g &= \begin{pmatrix} x_g & y_g \\ -y_g^* & -x_g^* \end{pmatrix} = \tilde{g} Z^{(*)} \tilde{g}^\dagger \\ \tilde{g} &= \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & g^* \end{pmatrix} \\ x_g &= g x^{(*)} g^\dagger \\ y_g &= g y^{(*)} g^t \end{aligned} \quad (6.111)$$

で与えられる.

証明. (6.92) または (6.93) を使って

$$\begin{aligned} g \cdot H(Z) &= \sum_{ij} \{ x_{ij}^{(*)} (\sum_{i'} a_{i'}^\dagger g_{i'i}) (\sum_{j'} a_{j'} g_{j'j}^*) \\ &\quad + \frac{1}{2} y_{ij}^{(*)} (\sum_{i'} a_{i'}^\dagger g_{i'i}) (\sum_{j'} a_{j'}^\dagger g_{j'j}^*) + \frac{1}{2} (y^\dagger)_{ij}^{(*)} (\sum_{i'} a_{i'} g_{i'i}^*) (\sum_{j'} a_{j'} g_{j'j}^*) \} \\ &= \sum_{i'j'} \{ (\sum_{ij} g_{i'i} x_{ij}^{(*)} g_{j'j}^\dagger) a_{i'}^\dagger a_{j'} \\ &\quad + \frac{1}{2} (\sum_{ij} g_{i'i} y_{ij}^{(*)} g_{j'j}^t) a_{i'}^\dagger a_{j'}^\dagger + \frac{1}{2} (\sum_{ij} g_{i'i}^* (y^{(*)})_{ij}^\dagger (g^*)_{j'j}^t) a_{i'} a_{j'} \} \\ &= \sum_{ij} \{ (g x^{(*)} g^\dagger)_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} (g y^{(*)} g^t)_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2} (g y^{(*)} g^t)_{ij}^\dagger a_i a_j \} \\ &= \sum_{ij} \{ (x_g)_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} (y_g)_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \frac{1}{2} (y_g^\dagger)_{ij} a_i a_j \} \\ &= H(Z_g) \end{aligned} \quad (6.112)$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned} x_g &= g x^{(*)} g^\dagger \\ y_g &= g y^{(*)} g^t \end{aligned} \quad (6.113)$$

が成り立つ. 故に

$$Z_g = \begin{pmatrix} x_g & y_g \\ -y_g^* & -x_g^* \end{pmatrix} = \tilde{g} Z^{(*)} \tilde{g}^\dagger \quad (6.114)$$

■

HFB 1 粒子密度 $R(Z)$ への群 G_0 の作用を

$$g \cdot R(Z) \equiv R(Z_g) = R_g = \begin{pmatrix} \rho_g & \lambda_g \\ -\lambda_g^* & 1_N - \rho_g^* \end{pmatrix} \quad (6.115)$$

で定義する. すなわち,

$$\begin{aligned} (g \cdot \rho)_{ij} &\equiv (\rho_g)_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle_{Z_g} \\ (g \cdot \lambda)_{ij} &\equiv (\lambda_g)_{ij} = \langle a_j a_i \rangle_{Z_g} \end{aligned} \quad (6.116)$$

で定義する. そのとき次の命題が成立する.

命題 6.6. $R(Z_g)$ は $R(Z)$ と $\tilde{g}$ を使って

$$R(Z_g) = \tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger \quad (6.117)$$

と表される. すなわち (ρ_g, λ_g) は

$$\begin{aligned} \rho_g &= g \rho^{(*)} g^\dagger \\ \lambda_g &= g \lambda^{(*)} g^t \end{aligned} \quad (6.118)$$

で与えられる.

証明. Z を対角的にするユニタリー変換を U とする. (6.63) より

$$\begin{aligned} R(Z) &= U \tilde{F} U^\dagger \\ R(Z)^* &= U^* \tilde{F} (U^\dagger)^* \\ U^\dagger Z U &= \tilde{E} \\ (U^*)^\dagger Z^* U^* &= \tilde{E} \\ Z_g &= \tilde{g} Z^{(*)} \tilde{g}^\dagger \end{aligned} \quad (6.119)$$

が成り立つ. これを使うと

$$\begin{aligned} A^\dagger Z_g A &= A^\dagger \tilde{g} Z^{(*)} \tilde{g}^\dagger A \\ &= A^\dagger \tilde{g} U^{(*)} (U^{(*)})^\dagger Z^{(*)} U^{(*)} (U^{(*)})^\dagger \tilde{g}^\dagger A \\ &= C^\dagger \tilde{E} C \end{aligned} \quad (6.120)$$

を得る. ここで

$$\begin{aligned} C^\dagger &= A^\dagger \tilde{g} U^{(*)} \\ C &= (U^{(*)})^\dagger \tilde{g}^\dagger A \end{aligned} \quad (6.121)$$

である。したがって

$$\langle C_l^\dagger C_l \rangle_{Z_g} = \tilde{F}_{ll} \quad (6.122)$$

を得る。(6.121) より

$$\begin{aligned} A^\dagger &= C^\dagger (U^{(*)})^\dagger \tilde{g}^\dagger \\ A &= \tilde{g} U^{(*)} C \end{aligned} \quad (6.123)$$

を得る。これより

$$\begin{aligned} R(Z_g)_{ij} &= \langle A_j^\dagger A_i \rangle_{Z_g} = \langle (C^\dagger (U^{(*)})^\dagger \tilde{g}^\dagger)_j (\tilde{g} U^{(*)} C)_i \rangle_{Z_g} \\ &= \langle \sum_{lk} C_l^\dagger (U^{(*)})_{lk}^\dagger \tilde{g}_{kj}^\dagger \sum_{l'k'} \tilde{g}_{il'} (U^{(*)})_{l'k'} C_{k'} \rangle_{Z_g} \\ &= \sum_{l'lkj} \tilde{g}_{il'} (U^{(*)})_{l'l} \tilde{F}_{ll} (U^{(*)})_{lk}^\dagger \tilde{g}_{kj}^\dagger \\ &= \sum_{l'kj} \tilde{g}_{il'} R(Z)^{(*)}_{l'k} \tilde{g}_{kj}^\dagger \\ &= (\tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger)_{ij} \end{aligned} \quad (6.124)$$

を得る。ここで4番目の等号は(6.119)を使った。したがって

$$R(Z_g) = \tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger \quad (6.125)$$

を得る。(6.125) を書きなをして

$$\begin{pmatrix} \rho_g & \lambda_g \\ -\lambda^* & 1_N - \rho_g^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & g^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho^{(*)} & \lambda^{(*)} \\ -(\lambda^{(*)})^* & 1_N - (\rho^{(*)})^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g^\dagger & 0 \\ 0 & g^t \end{pmatrix} \quad (6.126)$$

これより

$$\begin{aligned} \rho_g &= g \rho^{(*)} g^\dagger \\ \lambda_g &= g \lambda^{(*)} g^t \end{aligned} \quad (6.127)$$

を得る。 ■

次の定理が成り立つ。

定理 6.2. $F(Z)$ は G_0 不変な関数である。すなわち $g \in G_0$ に対して

$$F(Z_g) = F(Z) \quad (6.128)$$

が成り立つ。

証明. 証明は長くなるので、付録Aに記した。 ■

以上より HFB 近似は G_0 不変な関数 $F(Z)$ の極値問題であることが分かった。したがって第4章の群論的分岐理論を使うことが出来る。

定義 6.1. HFB ハミルトニアン $H(Z)$ の固定部分群 $G(H(Z))$ を

$$G(H(Z)) \equiv \{g \in G_0 \mid g \cdot H(Z) = H(Z)\} \quad (6.129)$$

で定義する. これは

$$G(H(Z)) \equiv \{g \in G_0 \mid Z_g = Z\} \quad (6.130)$$

と書くことが出来る.

HFB ハミルトニアン $H(Z)$ の固定部分群の構造を使って, 密度行列の対称性を決定するうえで有用な, 次の定理が成り立つ.

定理 6.3. $g \in G(H(Z))$ のとき, すなわち

$$Z_g = Z \quad (6.131)$$

のとき, 任意の i, j に対して

$$\begin{aligned} \langle (g \cdot a_j^\dagger)(g \cdot a_i) \rangle_Z^{(*)} &= \langle a_j^\dagger a_i \rangle_Z \\ \langle (g \cdot a_j)(g \cdot a_i) \rangle_Z^{(*)} &= \langle a_j a_i \rangle_Z \end{aligned} \quad (6.132)$$

が成り立つ.

証明. (6.127) と $Z_g = Z$ より

$$\begin{aligned} \rho_g &= g \rho^{(*)} g^\dagger = \rho \\ \lambda_g &= g \lambda^{(*)} g^t = \lambda \end{aligned} \quad (6.133)$$

これより

$$\begin{aligned} g^\dagger \rho g &= \rho^{(*)} \\ g^\dagger \lambda (g^t)^\dagger &= \lambda^{(*)} \end{aligned} \quad (6.134)$$

を得る. これを使うと

$$\begin{aligned} \langle (g \cdot a_j^\dagger)(g \cdot a_i) \rangle_Z^{(*)} &= \langle \left(\sum_{j'} g_{j'j} a_{j'}^\dagger \right) \left(\sum_{i'} g_{i'i}^* a_{i'} \right) \rangle_Z^{(*)} \\ &= \left\{ \sum_{i'j'} g_{ii'}^\dagger \langle a_{j'}^\dagger a_{i'} \rangle_Z g_{j'j} \right\}^{(*)} \\ &= \left\{ \sum_{i'j'} g_{ii'}^\dagger \rho_{i'j'} g_{j'j} \right\}^{(*)} \\ &= (g^\dagger \rho g)_{ij}^{(*)} = (\rho^{(*)})_{ij}^{(*)} = \rho_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle \end{aligned} \quad (6.135)$$

$$\begin{aligned} \langle (g \cdot a_j)(g \cdot a_i) \rangle_Z^{(*)} &= \langle \left(\sum_{j'} g_{j'j}^* a_{j'} \right) \left(\sum_{i'} g_{i'i}^* a_{i'} \right) \rangle_Z^{(*)} \\ &= \left\{ \sum_{i'j'} g_{ii'}^\dagger \langle a_{j'} a_{i'} \rangle_Z (g^t)_{j'j}^\dagger \right\}^{(*)} \\ &= \left\{ \sum_{i'j'} g_{ii'}^\dagger \lambda_{i'j'} (g^t)_{j'j}^\dagger \right\}^{(*)} = \left\{ (g^\dagger \lambda (g^t)^\dagger)_{ij} \right\}^{(*)} \\ &= \left\{ \lambda_{ij}^{(*)} \right\}^{(*)} = \lambda_{ij} = \langle a_j a_i \rangle \end{aligned} \quad (6.136)$$

を得る. ■

定理 6.3 は $G(H(Z))$ から ρ, λ の対称性を定める上で非常に重要な役割を果たす. 簡単な例を挙げておく.

例 6.2. HFB ハミルトニアン $H(Z)$ が時間反転 t を含む場合.

例 6.1 (p.223) の場合を考える. $H(Z)$ の固定部分群が (7.17) で定義される時間反転 t を含む場合を考える. 定理 6.3 より

$$\begin{aligned}\langle a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\uparrow} \rangle &= \langle (t \cdot a_{m\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{m\uparrow}) \rangle^* = \langle (-a_{m\downarrow}^\dagger)(-a_{m\downarrow}) \rangle^* = \langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle^* \\ &= \langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle\end{aligned}\quad (6.137)$$

を得る. ここで $\langle *** \rangle_Z$ の下付の Z は省略した. 最後の等号で

$$\begin{aligned}\langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle &= \langle (a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\downarrow})^\dagger \rangle \\ &= \langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle^*\end{aligned}\quad (6.138)$$

を使った. 同様に

$$\begin{aligned}\langle a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle &= \langle (t \cdot a_{m\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{m\downarrow}) \rangle^* \\ &= \langle (-a_{m\downarrow}^\dagger)(a_{m\uparrow}) \rangle^* \\ &= -\langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\uparrow} \rangle^* \\ &= -\langle (a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\downarrow})^\dagger \rangle^* \\ &= -\langle a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle\end{aligned}\quad (6.139)$$

が成り立ち $\langle a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle = 0$ となる. 同様に $\langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\uparrow} \rangle = 0$ を得る. 以上をまとめると $t \in G(H(Z))$ のとき

$$\begin{aligned}\langle a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\uparrow} \rangle &= \langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle \\ \langle a_{m\uparrow}^\dagger a_{m\downarrow} \rangle &= \langle a_{m\downarrow}^\dagger a_{m\uparrow} \rangle = 0\end{aligned}\quad (6.140)$$

を得る. 計算することなく, $H(Z)$ の固定部分群が t を含むという情報だけで, (6.140) が導かれることに注意されたい.

この例の様に $H(Z)$ の固定部分群の構造だけから, $H(Z)$ を対角化することなく, 電荷密度, スピン密度等の対称性を決定することが出来る. 定理 6.3 は第 8 章のなかでたびたび使われる.

SCF 条件 (6.85) は (ρ, λ) より (x, y) が定まる構造になっている. この事をあらわに書いて

$$\begin{aligned}\{x[\rho]\}_{ij} &= T_{ij} - \mu\delta_{ij} + \sum_{mn} [in | V | jm] \rho_{mn} \\ \{y[\lambda]\}_{in} &= \sum_{mj} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{jm}\end{aligned}\quad (6.141)$$

で行列 $x[\rho], y[\lambda]$ を定義する. そのとき次の命題が成り立つ.

命題 6.7. 任意に $g \in G_0$ に対して

$$\begin{aligned} x[g\rho^{(*)}g^\dagger] &= g(x[\rho])^{(*)}g^\dagger \\ y[g\lambda^{(*)}g^t] &= g(y[\lambda])^{(*)}g^t \end{aligned} \quad (6.142)$$

が成り立つ.

証明. まず (6.98) の第 2 式は $\langle in | V | jm \rangle$ を $[in | V | jm]$ に置き換えても成立することに注意する. すなわち

$$\sum_{i'j'm'n'} g_{ii'} g_{nn'} [i'n' | V | j'm']^{(*)} g_{j'j}^\dagger g_{m'm}^\dagger = [in | V | jm] \quad (6.143)$$

が成り立つ. (6.143) の両辺に $g_{n''n}^\dagger g_{mm''}$ を掛けて m, n で和を取ると

$$\sum_{i'j'} g_{ii'} [i'n'' | V | j'm'']^* g_{j'j}^\dagger = \sum_{mn} g_{n''n}^\dagger [in | V | jm] g_{mm''} \quad (6.144)$$

を得る.

$$\begin{aligned} \{x[g\rho^{(*)}g^\dagger]\}_{ij} &= T_{ij} - \mu\delta_{ij} + \sum_{mn} [in | V | jm] (g\rho^{(*)}g^\dagger)_{mn} \\ &= T_{ij} - \mu\delta_{ij} + \sum_{mn} \sum_{m''n''} [in | V | jm] g_{mm''} \rho_{m''n''}^{(*)} g_{n''n}^\dagger \\ &= T_{ij} - \mu\delta_{ij} + \sum_{mn} \sum_{m''n''} g_{n''n}^\dagger [in | V | jm] g_{mm''} \rho_{m''n''}^{(*)} \\ &= T_{ij} - \mu\delta_{ij} + \sum_{m''n''} \sum_{i'j'} g_{ii'} [i'n'' | V | j'm'']^{(*)} g_{j'j}^\dagger \rho_{m''n''}^{(*)} \\ &= \sum_{i'j'} \{g_{ii'} \{ (T_{i'j'} - \mu\delta_{i'j'}) + \sum_{m''n''} [i'n'' | V | j'm''] \rho_{m''n''}^{(*)} \}^{(*)}\} g_{j'j}^\dagger \\ &= \{g(x[\rho])^{(*)}g^\dagger\}_{ij} \end{aligned} \quad (6.145)$$

を得る. ここで 4 番目の等号は (6.144) を, 5 番目の等号は (6.98) の第 1 式を使った. (6.142) の第 2 式も同様の手法で証明できる. ■

命題 6.7 を使うと次の定理が容易に証明できる.

定理 6.4. (SCF 条件における対称性の伝播)⁵

(ρ, λ) がある $g \in G_0$ に対して不変, すなわち

$$\begin{aligned} g \cdot \rho &= g\rho^{(*)}g^\dagger = \rho \\ g \cdot \lambda &= g\lambda^{(*)}g^t = \lambda \end{aligned} \quad (6.146)$$

のとき, この (ρ, λ) で定まる $x[\rho], y[\lambda]$ はその g に対して不変である. すなわち

$$\begin{aligned} g \cdot x[\rho] &= g(x[\rho])^{(*)}g^\dagger = x[\rho] \\ g \cdot y[\lambda] &= g(y[\lambda])^{(*)}g^t = y[\lambda] \end{aligned} \quad (6.147)$$

が成り立つ.

⁵Hartree-Fock 近似 ($y_{ij} = 0$ のとき) の場合の証明は Ring and Schuck¹⁷⁾ の p201 にある.

証明. 命題 6.7 より

$$\begin{aligned} g \cdot x[\rho] &= g(x[\rho])^{(*)} g^\dagger = x[g\rho^{(*)} g^\dagger] = x[\rho] \\ g \cdot y[\lambda] &= g(y[\lambda])^{(*)} g^t = y[g\lambda^{(*)} g^t] = y[\lambda] \end{aligned} \tag{6.148}$$

が成り立つ. ■

この定理より SCF 条件を利用して, 逐次的手法で極値を与える Z および R を求めるとき, 得られる解 Z の固定部分群は初期値の (ρ, λ) の固定部分群で定まってしまう. したがって対称性の破れ方の異なる解を求めるためには, 対称性の異なる破れ方をした (ρ, λ) の初期値から出発しなければならない. 様々な対称性の異なる破れ方をした (ρ, λ) を系統的に見つけていくことが必要になる. 以下の章でその方法を具体的に解説していく.

第7章 2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型の対称性の群 G_0 とその既約表現

第7章以下では第6章で述べた HFB 方程式の群論的解析の方法を, 群論的にも理解しやすい2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型を例にとり説明する. この模型より, 電荷密度波, ボンドオーダー波, 電流密度波, スピン密度波, スピン流密度波, シングレット d-波超伝導, 種々のトリプレット p-波超伝導状態等多様な状態を, HFB 方程式の解の群論的分岐理論に基づいて導き出すことが出来る.

第7章では拡張 Hubbard 模型の HFB 方程式の解の群論的分類のための準備として, 2次元正方格子上的拡張 Hubbard 模型のハミルトニアンとその対称性の群 $G_0 = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times \mathbf{R}$ およびその既約表現を考察する. ここで $\mathbf{P}$ は2次元正方格子が持つ空間群, $\mathbf{S}$ はスピン回転の群, $\mathbf{R}$ はゲージ変換と時間反転からなる群である.

第7.2節で群 H と K の直積群 $H \times K$ の既約表現を, H の既約表現と K の既約表現とで表わす. その結果を使うと $G_0 = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times \mathbf{R}$ の既約表現は $\mathbf{P}, \mathbf{S}, \mathbf{R}$ それぞれの既約表現から構成される. 第7.3節では $\mathbf{P}$ の, 第7.4節では $\mathbf{S}$ の, 第7.5節では $\mathbf{R}$ の既約表現について述べる. 第7.6節では対称性の破れた状態を導くのに必要な $G_0 = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times \mathbf{R}$ の既約表現と, その平均場ハミルトニアン空間における基底を求める.

7.1 ハミルトニアンとその対称性の群 G_0

x 方向, y 方向それぞれ L 個のサイトからなる全格子点数 $N = L^2$ (格子定数 = 1) なる2次元正方格子を考える. 正方格子上的拡張 Hubbard 模型のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle_s} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{m}s} + a_{\mathbf{m}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s}) - \mu \sum_{\mathbf{n}s} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s} \\ & + U \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{n}\uparrow} a_{\mathbf{n}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{n}\downarrow} \\ & + V \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} \sum_{ss'} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s} a_{\mathbf{m}s'}^\dagger a_{\mathbf{m}s'} + J \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} \sum_{ss'} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{m}s'}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} a_{\mathbf{m}s} \end{aligned} \quad (7.1)$$

で与えられる. ここで $a_{\mathbf{n}s}^\dagger (a_{\mathbf{n}s})$ は格子点

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2) = n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2 \quad (7.2)$$

にスピン $s = (\uparrow, \downarrow)$ を持つ電子を生成(消滅)するフェルミオン演算子である. ここで $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ は x, y 方向の単位ベクトルである. $\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle$ は正方格子の最近接の格子点の対を表す. U は同一格子点に

電子が2個来たときに働く相互作用, V は隣接格子点に電子が2個来たときに働く相互作用, J は隣接格子点に電子が2個来たときに働く交換相互作用である. 波数表示にするために次の Fourier 変換を行う.

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{n}s}^\dagger \\ a_{\mathbf{k}s} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{n}s} \end{aligned} \quad (7.3)$$

ここで $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$ は電子の波数を表す. また $\mathbf{k} \cdot \mathbf{n} = (n_1 k_1 + n_2 k_2)$ は $\mathbf{k}$ と $\mathbf{n}$ の内積を表す. (7.3) の逆変換は

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{n}s}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \\ a_{\mathbf{n}s} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (7.4)$$

となる. ここで $\mathbf{k}$ についての和は

$$\text{第1ブリュアン域 (The first Brillouin zone)} = \{ -\pi \leq k_1, k_2 \leq \pi \} \quad (7.5)$$

についての和である. (7.4) を (7.1) に代入すると波数表示によるハミルトニアンを得る.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}s} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{ss'} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}s, \mathbf{k}'s' | V | \mathbf{k}s, \mathbf{k}' + \mathbf{q}s' \rangle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}s'} a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (7.6)$$

ここで

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}s, \mathbf{k}'s' | V | \mathbf{k}s, \mathbf{k}' + \mathbf{q}s' \rangle &= \frac{1}{N} \{ U + 2V\gamma(\mathbf{q}) + 2J\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \} \\ \gamma(\mathbf{k}) &= \cos k_1 + \cos k_2 \end{aligned} \quad (7.7)$$

である. (7.1) のハミルトニアン $\mathcal{H}$ は群

$$G_0 = P \times S \times R \quad (7.8)$$

に対して不変である. ここで P は2次元正方格子の空間群で

$$P = L(e_1, e_2) D_{4h} = L_0 D_{4h} \quad (7.9)$$

で与えられる.¹ $L_0 = L(e_1, e_2)$ は (e_1, e_2) を基本周期ベクトルとする格子 (格子定数=1) の並進群である.

¹ 2次元系では D_4 を考えておけば十分であるが, 正方対称性を持つ3次元系への適用も考え $D_{4h} = D_4 \times C_I$ を取り扱う.

ベクトル $\mathbf{n} = n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2$ の並進 $T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ の $\{a_{\mathbf{m}s}^\dagger, a_{\mathbf{m}s}\}$ への作用は次式で与えられる.

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n})s}^\dagger \\ T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{m}s} &= a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n})s} \end{aligned} \quad (7.10)$$

$D_{4h} = D_4 \times C_I$ で D_4 は第2章の例2.2 (その1の p.520) で定義した点群であり, その生成元は $C_{4z}^\dagger, C_{2x}$ である. D_{4h} の生成元は $C_{4z}^\dagger, C_{2x}, I$ で, これらの $\{a_{\mathbf{m}s}^\dagger, a_{\mathbf{m}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} C_{4z}^\dagger \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= a_{(C_{4z}^\dagger \cdot \mathbf{m})s}^\dagger \\ C_{4z}^\dagger \cdot a_{\mathbf{m}s} &= a_{(C_{4z}^\dagger \cdot \mathbf{m})s} \\ C_{2x} \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= a_{(C_{2x} \cdot \mathbf{m})s}^\dagger \\ C_{2x} \cdot a_{\mathbf{m}s} &= a_{(C_{2x} \cdot \mathbf{m})s} \\ I \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= a_{(-\mathbf{m})s}^\dagger \\ I \cdot a_{\mathbf{m}s} &= a_{(-\mathbf{m})s} \end{aligned} \quad (7.11)$$

で与えられる.² $\mathbf{m} = (m_1, m_2)$ の成分をあらわに書くと

$$\begin{aligned} C_{4z}^\dagger \cdot a_{(m_1, m_2)s}^\dagger &= a_{(-m_2, m_1)s}^\dagger \\ C_{4z}^\dagger \cdot a_{(m_1, m_2)s} &= a_{(-m_2, m_1)s} \\ C_{2x} \cdot a_{(m_1, m_2)s}^\dagger &= a_{(m_1, -m_2)s}^\dagger \\ C_{2x} \cdot a_{(m_1, m_2)s} &= a_{(m_1, -m_2)s} \\ I \cdot a_{(m_1, m_2)s}^\dagger &= a_{(-m_1, -m_2)s}^\dagger \\ I \cdot a_{(m_1, m_2)s} &= a_{(-m_1, -m_2)s} \end{aligned} \quad (7.12)$$

となる.

$\mathbf{S}$ と $\mathbf{R}$ は第6章の例6.1 (p.223) で定義したものであるが, この例に即して定義しておく. $\mathbf{S}$ はスピン回転の群で, 単位ベクトル $\mathbf{n}$ 軸周りの角 θ のスピン回転を $u(\mathbf{n}, \theta) \in \mathbf{S}$ とすると, $u(\mathbf{n}, \theta)$ は

$$u(\mathbf{n}, \theta) = \cos(\theta/2) 1_2 - i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \sin(\theta/2) \quad (7.13)$$

で与えられ, $\det(u(\mathbf{n}, \theta)) = 1$ を満たす 2×2 のユニタリ行列である.³ ここで 1_2 は 2×2 の単位行列であり, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$ はパウリ行列である. $u(\mathbf{n}, \theta)$ の $\{a_{\mathbf{m}s}^\dagger, a_{\mathbf{m}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= \sum_{s'} \{u(\mathbf{n}, \theta)\}_{s's} a_{\mathbf{m}s'}^\dagger \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{m}s} &= \sum_{s'} \{u(\mathbf{n}, \theta)\}_{s's}^* a_{\mathbf{m}s'} \end{aligned} \quad (7.14)$$

で与えられる.

² 2次元系では C_{2z} と C_I の $\{a_{\mathbf{m}s}^\dagger, a_{\mathbf{m}s}\}$ への作用は同じになる.

³ このような行列の集合からなる群を $SU(2)$ 呼ぶ

$\mathbf{R}$ は

$$\mathbf{R} = \Phi + t\Phi \quad (7.15)$$

で定義される. ここで Φ はグローバルゲージ変換 (global gauge transformation) で, $\tilde{\phi} \in \Phi$ の $\{a_{\mathbf{m}s}^\dagger, a_{\mathbf{m}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= e^{i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{m}s}^\dagger \\ \tilde{\phi} \cdot a_{\mathbf{m}s} &= e^{-i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{m}s} \end{aligned} \quad (7.16)$$

であり, t は時間反転で $\{a_{\mathbf{m}s}^\dagger, a_{\mathbf{m}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} t \cdot (ca_{\mathbf{m}\uparrow}^\dagger) &= -c^* a_{\mathbf{m}\downarrow}^\dagger \\ t \cdot (ca_{\mathbf{m}\downarrow}^\dagger) &= c^* a_{\mathbf{m}\uparrow}^\dagger \\ t \cdot (ca_{\mathbf{m}\uparrow}) &= -c^* a_{\mathbf{m}\downarrow} \\ t \cdot (ca_{\mathbf{m}\downarrow}) &= c^* a_{\mathbf{m}\uparrow} \end{aligned} \quad (7.17)$$

で与えられる. ここで c は複素数である. ハミルトニアン (7.1) が G_0 のこれらの元の作用に対して不変であることは容易に確かめられる.

$\{a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}\}$ に対する $\mathbf{n}$ の並進 $T(\mathbf{n}) \in L(e_1, e_2)$ の作用は (7.10) より次のようになる.

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{m}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) (T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger) \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n})s}^\dagger \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{m}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{m} + \mathbf{n})) a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n})s}^\dagger \\ &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \end{aligned} \quad (7.18)$$

同様に

$$T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}s} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s} \quad (7.19)$$

を得る. (7.18), (7.19) はブロッホ (Bloch) の定理である.

D_{4h} の生成元 C_{4z}^+ の $\{a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) (C_{4z}^+ \cdot a_{\mathbf{n}s}^\dagger) \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{n})s}^\dagger \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \{(C_{4z}^- C_{4z}^+) \cdot \mathbf{n}\}) a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{n})s}^\dagger \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot (C_{4z}^- \cdot (C_{4z}^+ \cdot \mathbf{n}))) a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{n})s}^\dagger \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(i(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) \cdot (C_{4z}^+ \cdot \mathbf{n})) a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{n})s}^\dagger \\ &= a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})s}^\dagger \end{aligned} \quad (7.20)$$

で与えられる. 5 番目の等号は内積の D_4 の作用の不変性

$$\mathbf{k} \cdot \{(C_{4z}^- \cdot \mathbf{n})\} = \{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\} \cdot \{(C_{4z}^+ C_{4z}^- \cdot \mathbf{n})\} = \{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\} \cdot \mathbf{n} \quad (7.21)$$

を使った.

同様にして D_{4h} の他の生成元の作用は

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ \cdot a_{\mathbf{k}s} &= a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})s} \\ C_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= a_{(C_{2x} \cdot \mathbf{k})s}^\dagger \\ C_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}s} &= a_{(C_{2x} \cdot \mathbf{k})s} \\ I \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger \\ I \cdot a_{\mathbf{k}s} &= a_{(-\mathbf{k})s} \end{aligned} \quad (7.22)$$

で与えられる.

スピン回転 $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ の $\{a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \sum_{s'} u(\mathbf{n}, \theta)_{s's} a_{\mathbf{k}s'}^\dagger \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{k}s} &= \sum_{s'} u(\mathbf{n}, \theta)_{s's}^* a_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \quad (7.23)$$

で与えられる.

グローバルゲージ変換 $\tilde{\phi} \in \Phi$ の $\{a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}\}$ への作用は

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= e^{i\frac{1}{2}\phi} a_{\mathbf{k}s}^\dagger \\ \tilde{\phi} \cdot a_{\mathbf{k}s} &= e^{-i\frac{1}{2}\phi} a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (7.24)$$

で与えられる.

時間反転 t の $\{a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\}$ への作用は

$$\begin{aligned} t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}))^* (t \cdot a_{\mathbf{n}\uparrow}^\dagger) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) (-a_{\mathbf{n}\downarrow}^\dagger) \\ &= -a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \end{aligned} \quad (7.25)$$

$$\begin{aligned} t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} (\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}))^* (t \cdot a_{\mathbf{n}\downarrow}^\dagger) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{n}\uparrow}^\dagger \\ &= a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger \end{aligned} \quad (7.26)$$

を得る. 同様に

$$\begin{aligned} t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow} &= -a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \\ t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow} &= a_{(-\mathbf{k})\uparrow} \end{aligned} \quad (7.27)$$

これらの作用をまとめると以下のようになる.

$$\left. \begin{aligned}
 T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger & T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}s} &= \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s} \\
 C_{4z}^+ \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})s}^\dagger & C_{4z}^+ \cdot a_{\mathbf{k}s} &= a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})s} \\
 C_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= a_{(C_{2x} \cdot \mathbf{k})s}^\dagger & C_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}s} &= a_{(C_{2x} \cdot \mathbf{k})s} \\
 I \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= a_{(-\mathbf{k})s}^\dagger & I \cdot a_{\mathbf{k}s} &= a_{(-\mathbf{k})s} \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \sum_{s'} u(\mathbf{n}, \theta)_{s's} a_{\mathbf{k}s'}^\dagger & u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{k}s} &= \sum_{s'} u(\mathbf{n}, \theta)_{s's}^* a_{\mathbf{k}s'} \\
 \tilde{\phi} \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger &= e^{i\frac{1}{2}\phi} a_{\mathbf{k}s}^\dagger & \tilde{\phi} \cdot a_{\mathbf{k}s} &= e^{-i\frac{1}{2}\phi} a_{\mathbf{k}s} \\
 t \cdot (ca_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) &= -c^* a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger & t \cdot (ca_{\mathbf{k}\uparrow}) &= -c^* a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \\
 t \cdot (ca_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) &= c^* a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger & t \cdot (ca_{\mathbf{k}\downarrow}) &= c^* a_{(-\mathbf{k})\uparrow}
 \end{aligned} \right\} \quad (7.28)$$

ここで c は複素数, $T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$, $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$, $\tilde{\phi} \in \Phi$ である. (7.28) の作用に対して (7.6) のハミルトニアン $\mathcal{H}$ が不変であることは容易に確かめられる. 例えば (7.6) のハミルトニアンの第1項は $u(\mathbf{n}, \theta)$ の作用に対して,

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot (\mathcal{H} \text{ の第1項}) &= u(\mathbf{n}, \theta) \cdot \left(\sum_{\mathbf{k}s} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}s} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) (u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger) (u(\mathbf{n}, \theta) \cdot a_{\mathbf{k}s}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}s} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \left(\sum_{s_1} u(\mathbf{n}, \theta)_{s_1 s} a_{\mathbf{k}s_1}^\dagger \right) \left(\sum_{s_2} u(\mathbf{n}, \theta)_{s_2 s}^* a_{\mathbf{k}s_2} \right) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \sum_{s_1 s_2} \left(\sum_s u(\mathbf{n}, \theta)_{s_1 s} u(\mathbf{n}, \theta)_{s s_2}^\dagger \right) a_{\mathbf{k}s_1}^\dagger a_{\mathbf{k}s_2} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}s_1} (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) a_{\mathbf{k}s_1}^\dagger a_{\mathbf{k}s_1} \quad (7.29)
 \end{aligned}$$

となり, $u(\mathbf{e}, \theta)$ に対して不変であることが分かる. ここで $u(\mathbf{n}, \theta)$ のユニタリー性 $u(\mathbf{n}, \theta)u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger = 1_2$ を使った. (7.6) のハミルトニアンの第2項についても同様に, $u(\mathbf{e}, \theta)$ 不変性を示すことが出来る.

7.2 直積群 $H \times K$ の既約表現

第7章では対称性の破れた状態を導くのに必要な $G_0 = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times \mathbf{R}$ の既約表現を求める. 群と既約表現に関連して若干の記号を導入しておく. 群 G の位数を $|G|$, 群 G の既約表現および表現行列を $\check{G}^{(j)}$ で表す. j は既約表現の種類を表す. 既約表現 $\check{G}^{(j)}$ の表現次元を $|\check{G}^{(j)}|$ または d_j で表す. $\check{G}^{(j)}$ の基底 $(l_1, \dots, l_{d_j})$ を $|\check{G}^{(j)}\rangle = |l_1, \dots, l_{d_j}\rangle$ で表す. したがって基底への $g \in G$ 作用を

$$g \cdot l_m = \sum_{n=1}^{d_j} l_n \check{G}_{nm}^{(j)}(g) \quad (7.30)$$

または

$$g \cdot |\check{G}^{(j)}\rangle = |\check{G}^{(j)}\rangle \check{G}^{(j)}(g) \quad (7.31)$$

と記すことにする. 群 H と群 K の直積群 $G = H \times K$ を考える. $\check{H}^{(i)}$ ($i = 1, \dots, r$) を群 H の d_i 次元の既約表現, $\check{K}^{(j)}$ ($j = 1, \dots, s$) を群 K の d_j 次元の既約表現とする. ここで r, s は H, K の異なる既約表現の数である. 既約表現 $\check{H}^{(i)}, \check{K}^{(j)}$ の基底を

$$\begin{aligned} |\check{H}^{(i)}\rangle &= |\phi_1^{(i)}, \dots, \phi_{d_i}^{(i)}\rangle \\ |\check{K}^{(j)}\rangle &= |\psi_1^{(j)}, \dots, \psi_{d_j}^{(j)}\rangle \end{aligned} \quad (7.32)$$

とする. すなわち $h \in H, k \in K$ に対して

$$\begin{aligned} h \cdot \phi_m^{(i)} &= \sum_{m'} \phi_{m'}^{(i)} \check{H}_{m'm}^{(i)}(h) \\ k \cdot \psi_n^{(j)} &= \sum_{n'} \psi_{n'}^{(j)} \check{K}_{n'n}^{(j)}(k) \end{aligned} \quad (7.33)$$

とする. そのとき $d_i d_j$ 個の基底ベクトル $\rho_{mn}^{(i \times j)} = \phi_m^{(i)} \psi_n^{(j)}$ ($m = 1, \dots, d_i, n = 1, \dots, d_j$) は直積群 $G = H \times K$ のある表現の基底になる. すなわち $hk \in G$ に対して

$$\begin{aligned} (hk) \cdot \rho_{mn}^{(i \times j)} &= (h \cdot \phi_m^{(i)}) (k \cdot \psi_n^{(j)}) \\ &= \left(\sum_{m'} \phi_{m'}^{(i)} \check{H}_{m'm}^{(i)}(h) \right) \left(\sum_{n'} \psi_{n'}^{(j)} \check{K}_{n'n}^{(j)}(k) \right) \\ &= \sum_{m'n'} \phi_{m'}^{(i)} \psi_{n'}^{(j)} \check{H}_{m'm}^{(i)}(h) \check{K}_{n'n}^{(j)}(k) \\ &= \sum_{m'n'} \rho_{m'n'}^{(i \times j)} \check{H}_{m'm}^{(i)}(h) \check{K}_{n'n}^{(j)}(k) \\ &= \sum_{m'n'} \rho_{m'n'}^{(i \times j)} \check{G}_{m'n';mn}^{(i \times j)}(hk) \end{aligned} \quad (7.34)$$

ここで

$$\check{G}_{m'n';mn}^{(i \times j)}(hk) = \check{H}_{m'm}^{(i)}(h) \check{K}_{n'n}^{(j)}(k) \quad (7.35)$$

である. この表現を $\check{H}^{(i)}$ と $\check{K}^{(j)}$ のクロネッカー積 (Kronecker-product) と呼び,

$$\check{G}^{(i \times j)} = \check{H}^{(i)} \otimes \check{K}^{(j)} \quad (7.36)$$

と記す. 直積群 $G = H \times K$ の既約表現に対して次の定理が成り立つ.

定理 7.1. 群 G を二つの群 H と K の直積であるとする:

$$G = H \times K \quad (7.37)$$

そのとき G の全ての同値でない既約表現は, H と K の既約表現 $\check{H}^{(i)}$ と $\check{K}^{(j)}$ のクロネッカー積:

$$\check{G}^{(i \times j)} = \check{H}^{(i)} \otimes \check{K}^{(j)} \quad (7.38)$$

として与えられる.

証明. まず $\check{H}^{(i)} \otimes \check{K}^{(j)}$ が既約であることを示す. $\check{H}^{(i)}(h)$ と $\check{K}^{(j)}(k)$ の指標を $\chi^{(i)}(h)$, $\chi^{(j)}(k)$ とする:

$$\begin{aligned}\chi^{(i)}(h) &= \sum_m \check{H}_{mm}^{(i)}(h) \\ \chi^{(j)}(k) &= \sum_n \check{K}_{nn}^{(j)}(k)\end{aligned}\tag{7.39}$$

これらの指標は既約表現の条件: 定理 3.4 の (3.29) (その1 p.540) を満たす. すなわち

$$\begin{aligned}\frac{1}{|H|} \sum_{h \in H} |\chi^{(i)}(h)|^2 &= 1 \\ \frac{1}{|K|} \sum_{k \in K} |\chi^{(j)}(k)|^2 &= 1\end{aligned}\tag{7.40}$$

G の表現 $\check{H}^{(i)} \otimes \check{K}^{(j)}$ の指標 $\chi^{(i \times j)}(hk)$ は

$$\chi^{(i \times j)}(hk) = \sum_{mn} \check{G}_{mn;mn}^{(i \times j)}(hk) = \sum_{mn} \check{H}_{mm}^{(i)}(h) \check{K}_{nn}^{(j)}(k) = \chi^{(i)}(h) \chi^{(j)}(k)\tag{7.41}$$

で与えられる. したがって

$$\begin{aligned}\frac{1}{|G|} \sum_{hk \in G} |\chi^{(i \times j)}(hk)|^2 &= \frac{1}{|H| |K|} \sum_{hk \in G} |\chi^{(i)}(h) \chi^{(j)}(k)|^2 \\ &= \left\{ \frac{1}{|H|} \sum_{h \in H} |\chi^{(i)}(h)|^2 \right\} \left\{ \frac{1}{|K|} \sum_{k \in K} |\chi^{(j)}(k)|^2 \right\} = 1\end{aligned}\tag{7.42}$$

を得る. ここで最後の等号は (7.40) を使った. したがって定理 3.4 より $\check{G}^{(i \times j)}$ は既約表現であることが示された. 定理 3.6 (その1 p.540) より

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^r (d_i)^2 &= |H| \\ \sum_{j=1}^s (d_j)^2 &= |K|\end{aligned}\tag{7.43}$$

が成り立つ. 一方 $\check{H}^{(i)} \otimes \check{K}^{(j)}$ の表現次元は $d_i d_j$ であるので, 表現 $\check{G}^{(i \times j)}$ の次元数の2乗の和は

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s (d_i d_j)^2 &= \sum_{i=1}^r (d_i)^2 \sum_{j=1}^s (d_j)^2 \\ &= |H| |K| \\ &= |G|\end{aligned}\tag{7.44}$$

したがって定理 3.6 より, rs 個の既約表現 $\check{H}^{(i)} \otimes \check{K}^{(j)} (i=1, \dots, r, j=1, \dots, s)$ が G の全ての異なる既約表現を尽していることを示す. ■

定理 7.1 より $G_0 = P \times S \times R$ の既約表現は P, S, R それぞれの既約表現から構成されることが分かる. すなわち $G_0 = P \times S \times R$ の既約表現は

$$\hat{G}_0^{(i, \mu, \nu)} = \hat{P}^{(i)} \otimes \hat{S}^{(\mu)} \otimes \hat{R}^{(\nu)}\tag{7.45}$$

で表される. ここで (i, μ, ν) は P, S, R の既約表現のラベルである. 以下 P, S, R の既約表現について述べる.

7.3 $P = L(e_1, e_2)D_{4h}$ の既約表現

最初に並進群 $L(e_1, e_2)$ の既約表現を考察する. 任意の二つの元 $T(\mathbf{n}), T(\mathbf{n}') \in L(e_1, e_2)$ に対して

$$\begin{aligned}
 (T(\mathbf{n})T(\mathbf{n}')) \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= T(\mathbf{n}) \cdot (T(\mathbf{n}') \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger) \\
 &= T(\mathbf{n}) \cdot a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n}')s}^\dagger \\
 &= a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n}'+\mathbf{n})s}^\dagger \\
 &= a_{(\mathbf{m}+\mathbf{n}+\mathbf{n}')s}^\dagger \\
 &= (T(\mathbf{n}')T(\mathbf{n})) \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger
 \end{aligned} \tag{7.46}$$

が成り立ち, $T(\mathbf{n}), T(\mathbf{n}')$ は可換であり, $L(e_1, e_2)$ は可換群であることが分かる.

$L(e_1, e_2)$ に x, y 方向に L 回の単位並進を行うと元に戻るという周期境界条件 (periodic boundary condition) を課すことにすると, $L(e_1, e_2)$ の生成元 $T(e_1), T(e_2)$ の定義関係は

$$\begin{aligned}
 T(e_1)^L &= T(Le_1) = E \\
 T(e_2)^L &= T(Le_2) = E \\
 T(e_1)T(e_2) &= T(e_2)T(e_1)
 \end{aligned} \tag{7.47}$$

となる. 第3.3節の脚注6 (その1 p.543) で述べたように可換群の既約表現は全て1次元である. したがってその表現行列は指標と同じになる. $T(e_1), T(e_2)$ の指標を $\chi(T(e_1)), \chi(T(e_2))$ とすると

$$\begin{aligned}
 \chi(T(e_1)^L) &= (\chi(T(e_1)))^L = \chi(E) = 1 \\
 \chi(T(e_2)^L) &= (\chi(T(e_2)))^L = \chi(E) = 1
 \end{aligned} \tag{7.48}$$

を得る. これより可能な指標は

$$\begin{aligned}
 \chi_{m_1 m_2}(T(e_1)) &= \exp\left(-i\frac{2\pi m_1}{L}\right) \\
 \chi_{m_1 m_2}(T(e_2)) &= \exp\left(-i\frac{2\pi m_2}{L}\right)
 \end{aligned} \tag{7.49}$$

で与えられる. ここで m_1, m_2 は整数である. l_1, l_2 を整数として m_1, m_2 の代わりに $m_1 + l_1 L, m_2 + l_2 L$ としても (7.49) の右辺は同じ値を与えることに注意すると, 相異なる表現を与える m_1, m_2 の範囲として

$$0 \leq m_1, m_2 \leq L - 1 \tag{7.50}$$

とすることが出来る. この範囲の (m_1, m_2) が $L(e_1, e_2)$ の既約表現のラベルなる. $L(e_1, e_2)$ の任意の元 $T(\mathbf{n}) = T(n_1 e_1 + n_2 e_2)$ に対する指標は

$$\chi_{m_1, m_2}(T(\mathbf{n})) = \exp\left(-i\frac{2\pi m_1 n_1}{L}\right) \exp\left(-i\frac{2\pi m_2 n_2}{L}\right) \tag{7.51}$$

となる. m_1, m_2 に対応して $\mathbf{k}$ を

$$\mathbf{k} = (k_1, k_2) = \left(\frac{2\pi m_1}{L}, \frac{2\pi m_2}{L}\right) \tag{7.52}$$

で定義すると,

$$\chi_{\mathbf{k}}(T(\mathbf{n})) \equiv \chi_{(m_1, m_2)}(T(\mathbf{n})) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \quad (7.53)$$

となり, $\mathbf{k}$ が $L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ の既約表現のラベルとなる. また (7.50) より

$$0 \leq k_1, k_2 \leq \frac{2\pi(L-1)}{L} \quad (7.54)$$

で, 巨視的な大きさの L を取ると

$$0 \leq k_1, k_2 \leq 2\pi \quad (7.55)$$

と考えてよい. (7.53) より l_1, l_2 を整数として $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$ の代わりに $k_1 + 2\pi l_1, k_2 + 2\pi l_2$ を代入しても同じ指標を与える. したがって既約表現のラベルとしては $\mathbf{k}$ と $\mathbf{k} + \mathbf{K}_l$ ($l = (l_1, l_2)$) は等価である. ここで

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_1 &= (2\pi, 0) \\ \mathbf{K}_2 &= (0, 2\pi) \\ l &= (l_1, l_2) \\ \mathbf{K}_l &= l_1 \mathbf{K}_1 + l_2 \mathbf{K}_2 \end{aligned} \quad (7.56)$$

である. この既約表現のラベルとしての等価性を

$$\mathbf{k} \doteq \mathbf{k} + \mathbf{K}_l \quad (7.57)$$

と記す. これは

$$\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) = \exp(-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_l) \cdot \mathbf{n}) \quad (7.58)$$

を意味する. $\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2$ は逆格子の基本並進ベクトル, $\mathbf{K}_l$ は逆格子ベクトルと呼ばれる. $L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ の既約表現をラベルする $\mathbf{k}$ の領域を (7.55) の領域から $(-\pi, -\pi)$ だけ平行移動した

$$-\pi \leq k_1, k_2 \leq \pi \quad (7.59)$$

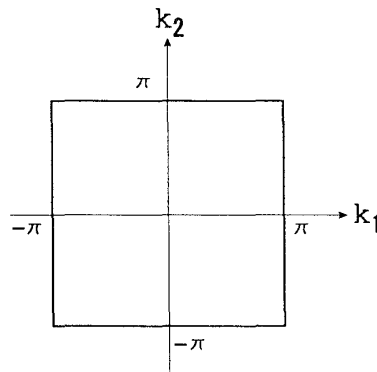


図 7.1: 2次元正方格子の第1ブリルアン・ゾーン

を考える. (7.59) の領域を第1ブリュアン域 (the first Brillouin zone) と呼ぶ. 図 7.1 にその領域を示す. 以上をまとめて次の定理を得る.

定理 7.2. $L(e_1, e_2)$ の既約表現は全て 1 次元表現で, 第1ブリュアン域内の $\mathbf{k}$ でラベルされる. その表現行列 (=指標) は $T(\mathbf{n}) \in L(e_1, e_2)$ に対して

$$\chi_{\mathbf{k}}(T(\mathbf{n})) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \quad (7.60)$$

で与えられる.

並進群 $L(e_1, e_2)$ の既約表現が分かったので $P = L(e_1, e_2)D_{4h}$ の既約表現を考えよう. その構成に必要な定義を与えておく.

定義 7.1 ($\mathbf{k}$ の群). 群 $P(\mathbf{k})$ を次式で定義する.

$$P(\mathbf{k}) = \{p \in D_{4h} \mid p \cdot \mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\} \quad (7.61)$$

この $P(\mathbf{k})$ を $\mathbf{k}$ の群という.

例 7.1 ($\mathbf{k}$ の群の例²⁰⁾).

ブリルアン・ゾーン内で図 7.2 の点 $\Gamma, \Sigma, \Delta, M, X, Y$ における $\mathbf{k}$ の群を求める.

Γ . $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\Gamma} \equiv (0, 0)$ の場合 全ての $p \in D_{4h}$ に対して

$$p \cdot \mathbf{k}_{\Gamma} = \mathbf{k}_{\Gamma} \quad (7.62)$$

であるので

$$P(\mathbf{k}_{\Gamma}) = D_{4h} \quad (7.63)$$

となる.

M. $\mathbf{k} = \mathbf{k}_M \equiv (\pi, \pi)$ の場合

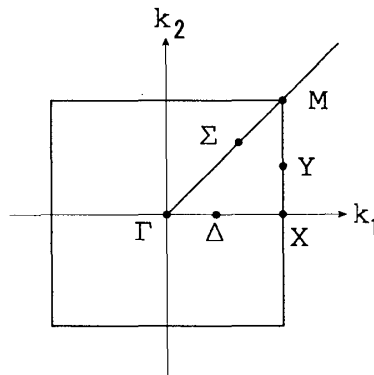


図 7.2: 2次元正方格子の第1ブリルアン・ゾーンの特異点と特殊線

D_{4h} の生成元 C_{4z}^+, C_{2x}, I に対して

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}_M &= (-\pi, \pi) \doteq (-\pi, \pi) + \mathbf{K}_1 = (\pi, \pi) = \mathbf{k}_M \\ C_{2x} \cdot \mathbf{k}_M &= (\pi, -\pi) \doteq (\pi, -\pi) + \mathbf{K}_2 = (\pi, \pi) = \mathbf{k}_M \\ C_I \cdot \mathbf{k}_M &= (-\pi, -\pi) \doteq (-\pi, -\pi) + \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2 = (\pi, \pi) = \mathbf{k}_M \end{aligned} \quad (7.64)$$

となり

$$P(\mathbf{k}_M) = D_{4h} \quad (7.65)$$

を得る.

X. $\mathbf{k} = \mathbf{k}_X \equiv (\pi, 0)$ の場合

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}_X &= (0, \pi) \neq \mathbf{k}_X \\ C_{2z} \cdot \mathbf{k}_X &= (-\pi, 0) \doteq (-\pi, 0) + \mathbf{K}_1 = \mathbf{k}_X \\ C_{4z}^- \cdot \mathbf{k}_X &= (0, -\pi) \neq \mathbf{k}_X \\ C_{2x} \cdot \mathbf{k}_X &= (\pi, 0) \doteq \mathbf{k}_X \\ C_{2y} \cdot \mathbf{k}_X &= (-\pi, 0) \doteq (-\pi, 0) + \mathbf{K}_1 = (\pi, 0) = \mathbf{k}_X \\ C_{2a} \cdot \mathbf{k}_X &= (0, \pi) \neq \mathbf{k}_X \\ C_{2b} \cdot \mathbf{k}_X &= (0, -\pi) \neq \mathbf{k}_X \\ I \cdot \mathbf{k}_X &= (-\pi, 0) \doteq (-\pi, 0) + \mathbf{K}_1 = (\pi, 0) = \mathbf{k}_X \end{aligned} \quad (7.66)$$

となる. したがって

$$P(\mathbf{k}_X) = \{(E, C_{2z}, C_{2x}, C_{2y}) \times C_I\} = D_{2h} \quad (7.67)$$

となる.

Δ . $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\Delta = (x, 0)$ ($0 < x < \pi$) ((1, 0) 軸上の一般の点) の場合

E, C_{2x} 以外の $p \in D_{4h}$ に対して

$$p \cdot \mathbf{k}_\Delta \neq \mathbf{k}_\Delta \quad (7.68)$$

であるので

$$P(\mathbf{k}_\Delta) = \{E, C_{2x}\} = C_{2x} \quad (7.69)$$

となる.

Σ . $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\Sigma = (x, x)$ ($0 < x < \pi$) ((1, 1) 軸上の一般の点) の場合

E, C_{2a} 以外の $p \in D_{4h}$ に対して

$$p \cdot \mathbf{k}_\Sigma \neq \mathbf{k}_\Sigma \quad (7.70)$$

k	k の群: $P(k)$	コメント
$k_\Gamma = (0, 0)$	D_{4h}	
$k_M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$	D_{4h}	
$k_X = (\frac{\pi}{a}, 0)$	D_{2h}	
$k_\Delta = (x, 0)$	$C_{2x} = \{E, C_{2x}\}$	$0 < x < \pi$
$k_\Sigma = (x, x)$	$C_{2a} = \{E, C_{2a}\}$	$0 < x < \pi$
$k_Y = (\pi, y)$	$C_{2y} = \{E, C_{2y}\}$	$0 < y < \pi$
k	$C_1 = \{E\}$	一般の点

表 7.1: k の群

であるので

$$P(k_\Sigma) = \{E, C_{2a}\} = C_{2a} \quad (7.71)$$

となる.

Y. $k = k_Y = (\pi, y)$ ($0 < y < \pi$) の場合

$$C_{2y} \cdot k_Y = (-\pi, y) \doteq (-\pi, y) + K_1 = (\pi, y) = k_Y \quad (7.72)$$

E, C_{2y} 以外の $p \in D_{4h}$ に対して

$$p \cdot k_Y \neq k_Y \quad (7.73)$$

であるので

$$P(k_Y) = \{E, C_{2y}\} = C_{2y} \quad (7.74)$$

となる.

Δ, Σ, Y のような点は対称線 (line of symmetry) にあるといわれる. Γ, M, X のような点是对称点 (point of symmetry) といわれる. 対称点, 対称線以外の点を一般点 (general point) という. k を一般点とすると

$$P(k) = \{E\} \equiv C_1 \quad (7.75)$$

となる. これらを表 7.1 に記した.

k の群と並進群 $L(e_1, e_2)$ を掛けた群を定義する.

定義 7.2.

k の群を $P(k)$ とするとき

$$P_1(k) = L(e_1, e_2)P(k) \in P \quad (7.76)$$

を k の小群 (little group of k)⁴ という.

⁴著書によって異なる名前が付けられている. Bradley 等²¹⁾ の教科書の "little group" を訳したものを採用した. 犬井等¹⁰⁾ の教科書では " k 群" と呼ばれている.

$P(\mathbf{k}) = D_{4h}$ の場合は $P_1(\mathbf{k}) = L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)D_{4h}$ となり, $P_1(\mathbf{k})$ は空間群そのものになる. $\mathbf{k}$ の小群 $P_1(\mathbf{k})$ の既約表現は, $\mathbf{k}$ の群 $P(\mathbf{k})$ の既約表現 $d^{(j)}$ と $L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ の既約表現とで, 次の定理により求められる.

定理 7.3. $\mathbf{k}$ の群 $P(\mathbf{k})$ の既約表現行列を $d^{(j)}$ とすると, $\mathbf{k}$ の小群 $P_1(\mathbf{k})$ の既約表現 $D^{(\mathbf{k}, j)}$ は

$$D^{(\mathbf{k}, j)}(pT(\mathbf{n})) = d^{(j)}(p) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \quad (7.77)$$

で与えられる. ここで $p \in P(\mathbf{k})$, $T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ である.

証明. まず (7.77) が表現になっていることを示す. $r \in D_{4h}, T(\mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ にたいして

$$\begin{aligned} rT(\mathbf{n})r^{-1} \cdot a_{\mathbf{m}s}^\dagger &= rT(\mathbf{n})a_{(r^{-1}\mathbf{m})s}^\dagger \\ &= r \cdot a_{(r^{-1}\mathbf{m}+\mathbf{n})s}^\dagger \\ &= a_{(\mathbf{m}+r\cdot\mathbf{n})s}^\dagger \end{aligned} \quad (7.78)$$

が成り立つ. したがって

$$rT(\mathbf{n})r^{-1} = T(r \cdot \mathbf{n}) \in L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) \quad (7.79)$$

となる.

$p_1T(\mathbf{n}_1), p_2T(\mathbf{n}_2) \in P_1(\mathbf{k})$ としたとき

$$\begin{aligned} p_1T(\mathbf{n}_1)p_2T(\mathbf{n}_2) &= p_1p_2p_2^{-1}T(\mathbf{n}_1)p_2T(\mathbf{n}_2) \\ &= p_1p_2T(p_2^{-1} \cdot \mathbf{n}_1)T(\mathbf{n}_2) \end{aligned} \quad (7.80)$$

が成り立つ. ここで (7.79) を使った. したがって

$$\begin{aligned} D^{(\mathbf{k}, j)}(p_1T(\mathbf{n}_1)p_2T(\mathbf{n}_2)) &= D^{(\mathbf{k}, j)}(p_1p_2T(p_2^{-1} \cdot \mathbf{n}_1)T(\mathbf{n}_2)) \\ &= d^{(j)}(p_1p_2) \exp(-i\mathbf{k} \cdot (p_2^{-1} \cdot \mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2)) \\ &= d^{(j)}(p_1)d^{(j)}(p_2) \exp(-i\mathbf{k} \cdot (p_2^{-1} \cdot \mathbf{n}_1)) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_2) \\ &= d^{(j)}(p_1)d^{(j)}(p_2) \exp(-i(p_2 \cdot \mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}_1) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_2) \\ &= d^{(j)}(p_1) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_1) d^{(j)}(p_2) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_2) \\ &= D^{(j, \mathbf{k})}(p_1T(\mathbf{n}_1)) D^{(j, \mathbf{k})}(p_2T(\mathbf{n}_2)) \end{aligned} \quad (7.81)$$

を得る. ここで変換 p_2 の直交性

$$\mathbf{k} \cdot (p_2^{-1} \cdot \mathbf{n}_1) = (p_2 \cdot \mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}_1 \quad (7.82)$$

と $p_2 \in P(\mathbf{k})$ の条件

$$p_2 \cdot \mathbf{k} \doteq \mathbf{k} \quad (7.83)$$

すなわち

$$\exp(-i(p_2 \cdot \mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}_1) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_1) \quad (7.84)$$

を使った。したがって $D^{(\mathbf{k},j)}$ が表現になっていることが示された。

$D^{(\mathbf{k},j)}$ が既約表現であることを示す。 $d^{(j)}(p)$ の指標を $\chi^{(j)}(p)$ とすれば $D^{(\mathbf{k},j)}$ の指標 $\chi^{(\mathbf{k},j)}(pT(\mathbf{n}))$ は

$$\chi^{(\mathbf{k},j)}(pT(\mathbf{n})) = \chi^{(j)}(p) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \quad (7.85)$$

となる。したがって

$$\frac{1}{|P_1(\mathbf{k})|} \sum_{pT(\mathbf{n})} |\chi^{(\mathbf{k},j)}(pT(\mathbf{n}))|^2 = \frac{1}{|P(\mathbf{k})|} \sum_p |\chi^{(j)}(p)|^2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} 1 = 1 \quad (7.86)$$

を得る。ここで $d^{(j)}$ の既約表現の条件

$$\frac{1}{|P(\mathbf{k})|} \sum_p |\chi^{(j)}(p)|^2 = 1 \quad (7.87)$$

を使った。定理 3.4 (その 1 p.540) と (7.86) より $D^{(\mathbf{k},j)}$ が既約表現であることが分かる。 ■

対称性の破れを議論するとき、並進群 $L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ の既約表現をラベルする第 1 ブリュアン域に属するベクトル $\mathbf{k}$ を **オーダリングベクトル** (ordering vector) という。以下の議論では、群論的分岐理論の有効性が最も理解しやすいオーダリングベクトルが $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\Gamma = (0, 0)$ および $\mathbf{k} = \mathbf{k}_M = (\pi, \pi) = \mathbf{Q}$ の場合に限ることにする。⁵ これらの場合表 7.1 より $P(\mathbf{k}_\Gamma) = P(\mathbf{k}_M) = D_{4h}$ になるので対応する小群は

$$\begin{aligned} P_1(\mathbf{k}_\Gamma) &= L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) D_{4h} \\ P_1(\mathbf{k}_M) &= L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) D_{4h} \end{aligned} \quad (7.88)$$

となって、元の空間群 $P = L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) D_{4h}$ に等しくなる。したがって小群の既約表現が元の空間群の既約表現になる。それに必要な D_{4h} の既約表現は

$$D_{4h} = D_4 \times C_I \quad (7.89)$$

を考慮すると、 D_4 の既約表現に、 $I \in C_I$ に対する対称性が偶 (even=g) か奇 (odd=u) による類別が加味されたものになる。それは表 3.2(その 1 p.545) の D_4 の既約表現と I による偶奇の区別 (g,u) を組み合わせて構成できる。 D_{4h} の既約表現行列を付録 B(p.340) の表 B.1, B.2 に記す。

定理 7.3 より $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\Gamma$ および $\mathbf{k} = \mathbf{k}_M = \mathbf{Q}$ に対応する P の既約表現は

$$\begin{aligned} \check{P}^{(\Gamma j)}(pT(\mathbf{n})) &\equiv D^{(\Gamma j)}(pT(\mathbf{n})) = d^{(j)}(p) \\ \check{P}^{(M j)}(pT(\mathbf{n})) &\equiv D^{(M j)}(pT(\mathbf{n})) = d^{(j)}(p) \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \end{aligned} \quad (7.90)$$

⁵ オーダリングベクトルが $\mathbf{k}_\Gamma, \mathbf{k}_M$ 以外の場合は P の既約表現がもっと複雑で、誘導表現の議論を必要とする。それらの場合の既約表現については文献¹⁰⁾ の p274 を参照。

となる. ここで $Q = (\pi, \pi) = \mathbf{k}_M$ で, $d^{(j)}$ は表 B.1(p.340), B.2(p.341) にある D_{4h} の既約表現行列である.

以上の既約表現が HFB 理論の舞台でどのように現れるかを見てみよう. 第6章で示したように平均場ハミルトニアンの一般的な表式は波数表示では

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s'} \left\{ x(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} + \frac{1}{2} y(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger + \frac{1}{2} y(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s')^* a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s} \right\} \quad (7.91)$$

で与えられる. ただし $x(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s'), y(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s')$ はエルミートおよび反対称条件

$$\begin{aligned} x(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') &= x(\mathbf{k}'s', \mathbf{k}s)^* \\ y(\mathbf{k}s, \mathbf{k}'s') &= -y(\mathbf{k}'s', \mathbf{k}s) \end{aligned} \quad (7.92)$$

を満たす. H_m は全体としてエルミートでなければならない. したがって H_m は次式で定義される実数を係数とする HFB ハミルトニアン空間 W_{HFB} のベクトルとみなすことが出来る.

$$\begin{aligned} W_{\text{HFB}} = \{ & a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}, (a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} + a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s}), i(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} - a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s}), \\ & (a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger + a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s}), i(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger - a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s}) \}_R \end{aligned} \quad (7.93)$$

ここで上の基底で第1番目のもの以外では $(\mathbf{k}s) \neq (\mathbf{k}'s')$ なるものとする.

ここで (7.91) の型の W_{HFB} のベクトルで (7.90) の表現の基底の例を挙げておく.

命題 7.1. P の表現 $\check{P}^{(\Gamma_j)}$ の基底.

$x_n^{(j)}(\mathbf{k})$ ($n = 1, \dots, |j|$) を D_{4h} の既約表現 $d^{(j)}$ の基底となる $\mathbf{k}$ の関数とする. ここで $|j|$ は既約表現 $d^{(j)}$ の表現次元を表す. すなわち $p \in D_{4h}$ に対して

$$p \cdot x_n^{(j)}(\mathbf{k}) \equiv x_n^{(j)}(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \sum_{n'=1}^{|j|} x_{n'}^{(j)}(\mathbf{k}) d_{n'n}^{(j)}(p) \quad (7.94)$$

とする. そのとき

$$\begin{aligned} h_n^{(0,j)} &= \sum_{\mathbf{k}} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} + H.C., \quad n = 1, \dots, |j| \\ h_n^{(0,j,2)} &= \sum_{\mathbf{k}} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger + H.C., \quad n = 1, \dots, |j| \end{aligned} \quad (7.95)$$

で定義される $h_n^{(0,j)}, h_n^{(0,j,2)}$ ($n = 1, \dots, d_j$) は $P = L(e_1, e_2) D_{4h}$ の (7.90) で定義される既約表現 $\check{P}^{(\Gamma_j)}$ の基底になっている.

証明. 任意の $p \in D_{4h}, T(n) \in L(e_1, e_2)$ に対して

$$\begin{aligned} (pT(n)) \cdot h_n^{(0,j)} &= \sum_{\mathbf{k}s} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) \{ (pT(n)) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger \} \{ (pT(n)) \cdot a_{\mathbf{k}s'} \} + H.C. \\ &= \sum_{\mathbf{k}s} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) \{ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{(p \cdot \mathbf{k})s}^\dagger \} \{ e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{(p \cdot \mathbf{k})s'} \} + H.C. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\mathbf{k}_s} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(p \cdot \mathbf{k})_s}^\dagger a_{(p \cdot \mathbf{k})_{s'}} + H.C \\
&= \sum_{\mathbf{k}'_s} x_n^{(j)}(p^{-1} \cdot \mathbf{k}') a_{\mathbf{k}'_s}^\dagger a_{\mathbf{k}'_{s'}} + H.C \\
&= \sum_{\mathbf{k}'_s} \sum_{n'=1}^{|j|} x_{n'}^{(j)}(\mathbf{k}') d_{n'n}^{(j)}(p) a_{\mathbf{k}'_s}^\dagger a_{\mathbf{k}'_{s'}} + H.C \\
&= \sum_{n'=1}^{|j|} h_{n'}^{(0,j)} d_{n'n}^{(j)}(p) \tag{7.96}
\end{aligned}$$

となる. ここで4番目の等号で $\mathbf{k}' = p \cdot \mathbf{k}$ と置いた. したがって $h_n^{(0,j)}$ ($n = 1, \dots, d_j$) は (7.90) の $\check{P}^{(\Gamma j)}$ の基底になっている. $h_n^{(0,j,2)}$ ($n = 1, \dots, d_j$) についても同様にして証明できる. ■

D_{4h} の既約表現の基底関数 $x_n^{(j)}(\mathbf{k})$ の例は付録 B の表に記している.

命題 7.2. P の既約表現 $\check{P}^{(Mj)}$ の基底.

次式で定義される

$$h_n^{(M,j)} = \sum_{\mathbf{k}} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_{s'}} + H.C, \quad n = 1, \dots, |j| \tag{7.97}$$

は (7.90) で定義される P の既約表現 $\check{P}^{(Mj)}$ の基底になっている.

証明. 任意の $p \in D_{4h}$, $T(\mathbf{n}) \in L(e_1, e_2)$ に対して

$$\begin{aligned}
(pT(\mathbf{n})) \cdot h_n^{(M,j)} &= \sum_{\mathbf{k}_s} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) \{ (pT(\mathbf{n})) \cdot a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_s}^\dagger \} \{ (pT(\mathbf{n})) \cdot a_{\mathbf{k}_s} \} + H.C \\
&= \sum_{\mathbf{k}_s} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) \{ e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{n}} a_{p \cdot (\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \} \{ e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} a_{(p \cdot \mathbf{k})_s} \} + H.C \\
&= \sum_{\mathbf{k}_s} x_n^{(j)}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}} a_{(p \cdot \mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{(p \cdot \mathbf{k})_s} + H.C \\
&= \sum_{\mathbf{k}'_s} x_n^{(j)}(p^{-1} \cdot \mathbf{k}') e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}} a_{(\mathbf{k}'+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}'_s} + H.C \\
&= \sum_{\mathbf{k}'_s} \sum_{n'=1}^{|j|} x_{n'}^{(j)}(\mathbf{k}') d_{n'n}^{(j)}(p) e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}} a_{(\mathbf{k}'+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}'_s} + H.C \\
&= \sum_{n'=1}^{|j|} h_{n'}^{(M,j)} d_{n'n}^{(j)}(p) e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}} \\
&= \sum_{n'=1}^{|j|} h_{n'}^{(M,j)} \check{P}_{n'n}^{(Mj)}(pT(\mathbf{n})) \tag{7.98}
\end{aligned}$$

を得る. ここで第3番目の等号は $p \cdot \mathbf{Q} \doteq \mathbf{Q}$ を使った. ■

7.4 スピン回転群 S の既約表現

スピン回転群を含む3次元回転群の表現論は込み入った議論が必要となるので、詳しいことは文献¹⁰⁾を参照されたい。ここでは以下の対称性の破れの議論に必要な最小限の範囲に限って説明する。⁶ スピン回転群の $\{a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{\mathbf{k}s}\}$ への作用は (7.23)(p.236) で与えられる。そこで $u(\mathbf{e}, \theta)$ は (7.13) で与えられる。⁷ 3次元回転群の既約表現は j によってラベルされ、その表現次元は $2j+1$ である。ただし $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ である。

$j=0$ は恒等表現に対応する。この表現行列を $\check{S}^{(0)}$ とすれば

$$\check{S}^{(0)}(u(\mathbf{n}, \theta)) = 1 \quad (7.99)$$

となる。

$j = \frac{1}{2}$ は $u(\mathbf{e}, \theta)$ そのものが表現行列である。

$j=1$ に対応する表現は $2j+1 = 2 \times 1 + 1 = 3$ 次元表現であり、3次元実空間の回転行列 $R(\mathbf{n}, \theta)$ が表現行列になる。ここで $R(\mathbf{n}, \theta)$ は単位ベクトル $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ の方向の回転軸の周りの角 θ の回転 ($\mathbf{n}$ の方向に右ねじが進む回転を正の方向とする) に対応する3次元回転行列で

$$R_{ij}(\mathbf{n}, \theta) = (1 - \cos \theta) n_i n_j + \delta_{ij} \cos \theta - \sin \theta \sum_k \epsilon_{ijk} n_k \quad (7.100)$$

で与えられる。⁸ ここで ϵ_{ijk} は置換の符号を表し、次式で定義される。

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & (i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 2, 1) \text{ の場合} \\ -1, & (i, j, k) = (2, 1, 3), (1, 3, 2), (3, 1, 2) \text{ の場合} \\ 0, & (i, j, k) \text{ がその他の場合} \end{cases} \quad (7.101)$$

$R(\mathbf{n}, \theta)$ の成分を書くと

$$R(\mathbf{n}, \theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta) n_1^2 & (1 - \cos \theta) n_1 n_2 - n_3 \sin \theta & (1 - \cos \theta) n_1 n_3 + n_2 \sin \theta \\ (1 - \cos \theta) n_1 n_2 + n_3 \sin \theta & \cos \theta + (1 - \cos \theta) n_2^2 & (1 - \cos \theta) n_2 n_3 - n_1 \sin \theta \\ (1 - \cos \theta) n_1 n_3 - n_2 \sin \theta & (1 - \cos \theta) n_2 n_3 + n_1 \sin \theta & \cos \theta + (1 - \cos \theta) n_3^2 \end{pmatrix} \quad (7.102)$$

となる。この既約表現を $\check{S}^{(1)}$ と記す。表現空間を W_{HFB} に限れば関係する既約表現は $\check{S}^{(0)}$ と $\check{S}^{(1)}$ に限られる。

ここで W_{HFB} を表現空間とする $\check{S}^{(0)}$ と $\check{S}^{(1)}$ の基底を求めておこう。その準備として次の命題を証明しておく。

命題 7.3. 任意の $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ に対して次の等式が成り立つ。

(1)

$$u(\mathbf{n}, \theta)(i\sigma^2)u(\mathbf{n}, \theta)^t = (i\sigma^2) \quad (7.103)$$

⁶群論を勉強しようとする多くの読者が回転群のところで挫折するようである。筆者自身も数回ここで挫折している。この解説の範囲に限れば比較的理解しやすいと考える。

⁷犬井¹⁰⁾p 131 (6.53) 式参照

⁸証明は付録Cで行う

(2) $\lambda = 1, 2, 3$ に対して

$$u(\mathbf{n}, \theta) \sigma^\lambda u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger = \sum_\mu R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) \sigma^\mu \quad (7.104)$$

(3) $\lambda = 1, 2, 3$ に対して

$$u(\mathbf{n}, \theta) (i\sigma^\lambda \sigma^2) u(\mathbf{n}, \theta)^t = \sum_\mu R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) (i\sigma^\mu \sigma^2) \quad (7.105)$$

証明.

(1) $u(\mathbf{n}, \theta)$ を u と略記して

$$A \equiv u(i\sigma^2)u^t \quad (7.106)$$

と置く.

$$(i\sigma^2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.107)$$

を考慮すると

$$\begin{aligned} A_{11} &= u_{11}u_{12} - u_{12}u_{11} = 0 \\ A_{12} &= u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21} = \det u = 1 \\ A_{21} &= u_{21}u_{12} - u_{22}u_{11} = -\det u = -1 \\ A_{22} &= u_{21}u_{22} - u_{22}u_{21} = 0 \end{aligned} \quad (7.108)$$

となり,

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma^2 \quad (7.109)$$

となる. ここで $u \in SU(2)$ ⁹ すなわち $\det(u) = 1$ を使った.

(2)

$$\sigma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.110)$$

として $u(\mathbf{n}, \theta), u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger$ を

$$\begin{aligned} u(\mathbf{n}, \theta) &= \cos \frac{\theta}{2} \sigma^0 - i \sin \frac{\theta}{2} (n_1 \sigma^1 + n_2 \sigma^2 + n_3 \sigma^3) \\ u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger &= \cos \frac{\theta}{2} \sigma^0 + i \sin \frac{\theta}{2} (n_1 \sigma^1 + n_2 \sigma^2 + n_3 \sigma^3) \end{aligned} \quad (7.111)$$

と書いて,

$$\begin{aligned} \sigma^i \sigma^i &= \sigma^0 = 1_2 \\ \sigma^1 \sigma^2 &= -\sigma^2 \sigma^1 = i\sigma^3 \\ \sigma^2 \sigma^3 &= -\sigma^3 \sigma^2 = i\sigma^1 \\ \sigma^3 \sigma^1 &= -\sigma^1 \sigma^3 = i\sigma^2 \end{aligned} \quad (7.112)$$

⁹ $\det(u) = 1$ は (7.13) の形より直接示すことが出来る.

に注意すると

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) \sigma^1 u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger &= \sigma^1 \{ \cos \theta + (1 - \cos \theta) n_1^2 \} \\
 &\quad + \sigma^2 \{ (1 - \cos \theta) n_1 n_2 + n_3 \sin \theta \} \\
 &\quad + \sigma^3 \{ (1 - \cos \theta) n_1 n_3 - n_2 \sin \theta \} \\
 &= \sum_{\mu} R_{\mu 1}(\mathbf{n}, \theta) \sigma^{\mu}
 \end{aligned} \tag{7.113}$$

を得る. 同様にして

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) \sigma^2 u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger &= \sum_{\mu} R_{\mu 2}(\mathbf{n}, \theta) \sigma^{\mu} \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \sigma^3 u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger &= \sum_{\mu} R_{\mu 3}(\mathbf{n}, \theta) \sigma^{\mu}
 \end{aligned} \tag{7.114}$$

を得る. (7.113) および (7.114) より (7.104) を得る.

(3)

(7.103) に左から $u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger$ を掛けて

$$(i\sigma^2) u(\mathbf{n}, \theta)^t = u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger (i\sigma^2) \tag{7.115}$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) (i\sigma^\lambda \sigma^2) u(\mathbf{n}, \theta)^t &= u(\mathbf{n}, \theta) \sigma^\lambda (i\sigma^2) u(\mathbf{n}, \theta)^t \\
 &= u(\mathbf{n}, \theta) \sigma^\lambda u(\mathbf{n}, \theta)^\dagger (i\sigma^2) \\
 &= \sum_{\mu} R_{\mu \lambda}(\mathbf{n}, \theta) \sigma^{\mu} (i\sigma^2) \\
 &= \sum_{\mu} R_{\mu \lambda}(\mathbf{n}, \theta) (i\sigma^{\mu} \sigma^2)
 \end{aligned} \tag{7.116}$$

を得る. ■

命題 7.3 を使うと次の命題を証明できる.

命題 7.4. W_{HFB} を表現空間とする $\check{S}^{(0)}$ の基底は

$$\begin{aligned}
 S^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}'_{s'}} + H.C \\
 T^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^2)_{ss'} a_{\mathbf{k}'_{s'}}^\dagger + H.C
 \end{aligned} \tag{7.117}$$

で与えられる.

証明. 任意の $u \in S$ を $S^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ に作用させると,

$$\begin{aligned}
 u \cdot S^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} (u \cdot a_{\mathbf{k}_s}^\dagger) \sigma_{ss'}^0 (u \cdot a_{\mathbf{k}'_{s'}}) + H.C \\
 &= \sum_{ss'} \left(\sum_{s_1} u_{s_1 s} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \right) \delta_{ss'} \left(\sum_{s'_1} u_{s'_1 s'}^* a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} \right) + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} \sum_s u_{s_1 s} u_{ss'_1}^\dagger + H.C \\
 &= \sum_{s_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger a_{\mathbf{k}'_{s_1}} + H.C = S^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{7.118}$$

ここで u のエルミート性 $uu^\dagger = 1_2$ を使った.

同様に

$$\begin{aligned}
 u \cdot T^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} (u \cdot a_{\mathbf{k}_s}^\dagger) (i\sigma^2)_{ss'} (u \cdot a_{\mathbf{k}'_{s'}}^\dagger) + H.C \\
 &= \sum_{ss'} \left(\sum_{s_1} u_{s_1 s} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \right) (i\sigma^2)_{ss'} \left(\sum_{s'_1} u_{s'_1 s'} a_{\mathbf{k}'_{s'_1}}^\dagger \right) + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \left(\sum_{ss'} u_{s_1 s} (i\sigma^2)_{ss'} u_{s'_1 s'} \right) a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger (u(i\sigma^2)u^t)_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger (i\sigma^2)_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= T^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{7.119}$$

ここで5番目の等号で (7.103) を使った. ■

既約表現	基底
$\check{S}^{(0)}$	$S^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}'_{s'}} + H.C$ $T^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^2)_{ss'} a_{\mathbf{k}'_{s'}}^\dagger + H.C$
$\check{S}^{(1)}$	$S^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}'_{s'}} + H.C$ $T^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{\mathbf{k}'_{s'}}^\dagger + H.C$
$\lambda = 1, 2, 3$	

表 7.2: W_{HFB} における S の既約表現とその基底

命題 7.5. W_{HFB} を表現空間とする $\check{S}^1$ の基底は

$$\begin{aligned}
 S^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}'_{s'}} + H.C \\
 T^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{\mathbf{k}'_{s'}}^\dagger + H.C
 \end{aligned} \tag{7.120}$$

で与えられる。ここで $\lambda = 1, 2, 3$ である。

証明. $u = u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ に対して

$$\begin{aligned}
 u \cdot S^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{ss'} (u \cdot a_{\mathbf{k}_s}^\dagger) \sigma_{ss'}^\lambda (u \cdot a_{\mathbf{k}'_{s'}}) + H.C \\
 &= \sum_{ss'} \left(\sum_{s_1} u_{s_1 s} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \right) \sigma_{ss'}^\lambda \left(\sum_{s'_1} u_{s'_1 s'}^* a_{\mathbf{k}_{s'_1}} \right) + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \left(\sum_{ss'} u_{s_1 s} \sigma_{ss'}^\lambda u_{s'_1 s'}^\dagger \right) a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger (u \sigma^\lambda u^\dagger)_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \left(\sum_{\mu} R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) \sigma^\mu \right)_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{\mu} R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) S^\mu(\mathbf{k}, \mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{7.121}$$

ここで5番目の等号は(7.104)を使った。したがって $S^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ($\lambda = 1, 2, 3$) は既約表現 $\check{S}^{(1)} = R(\mathbf{n}, \theta)$ の基底になっている。同様に

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot T^\lambda &= \sum_{ss'} (u \cdot a_{\mathbf{k}_s}^\dagger) (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} (u \cdot a_{\mathbf{k}'_{s'}}^\dagger) + H.C \\
 &= \sum_{ss'} \left(\sum_{s_1} u_{s_1 s} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \right) (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} \left(\sum_{s'_1} u_{s'_1 s'}^\dagger a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} \right) + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \left(\sum_{ss'} u_{s_1 s} (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} u_{s'_1 s'}^\dagger \right) a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger (u (i\sigma^\lambda \sigma^2) u^\dagger)_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{s_1 s'_1} a_{\mathbf{k}_{s_1}}^\dagger \left(\sum_{\mu} R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) (i\sigma^\mu \sigma^2)_{s_1 s'_1} \right) a_{\mathbf{k}'_{s'_1}} + H.C \\
 &= \sum_{\mu} R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) T^\mu(\mathbf{k}, \mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{7.122}$$

ここで5番目の等号は(7.105)を使用した。したがって $T^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ($\lambda = 1, 2, 3$) が $\check{S}^{(1)} = R(\mathbf{n}, \theta)$ の基底になっている。 ■

これらを表7.2にまとめた。

7.5 Rの既約表現

W_{HFB} を表現空間とする Φ の既約表現は $\check{\Phi}^{(0)}$ と $\check{\Phi}^{(2)}$ である。 $\check{\Phi}^{(0)}$ は恒等表現であり、 $\tilde{\phi} \in \Phi$ にたいして

$$\check{\Phi}^{(0)}(\tilde{\phi}) = 1 \tag{7.123}$$

である. $\check{\Phi}^{(0)}$ の W_{HFB} における基底は

$$\begin{aligned} (ks) \neq (k's) \text{ の場合} & \quad a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} + a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s}, \quad i(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} - a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger a_{\mathbf{k}s}) \\ (ks) = (k's) \text{ の場合} & \quad a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (7.124)$$

である.

$\check{\Phi}^{(2)}$ は 2 次元表現でありその基底として $(ks) \neq (k's')$ のとき

$$\begin{aligned} l_1 &= (a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger + a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s}) \\ l_2 &= i(a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger - a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s}) \end{aligned} \quad (7.125)$$

が考えられる. (l_1, l_2) に対する $\tilde{\phi} \in \Phi$ の作用は

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot l_1 &= ((e^{i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}s}^\dagger)(e^{i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger) + (e^{-i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}'s'}) (e^{-i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}s})) \\ &= e^{i\phi} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger + e^{-i\phi} a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s} \\ &= l_1 \cos \phi + l_2 \sin \phi \end{aligned} \quad (7.126)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot l_2 &= i(e^{i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}s}^\dagger)(e^{i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger) - i(e^{-i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}'s'}) (e^{-i\frac{\phi}{2}} a_{\mathbf{k}s}) \\ &= ie^{i\phi} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'}^\dagger - ie^{-i\phi} a_{\mathbf{k}'s'} a_{\mathbf{k}s} \\ &= -l_1 \sin \phi + l_2 \cos \phi \end{aligned} \quad (7.127)$$

となる. したがって l_1, l_2 を基底とする表現行列 $\check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})$ は

$$\check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (7.128)$$

で与えられる.

$\mathbf{R} = \Phi + t\Phi$ の既約表現は Φ の既約表現より導かれる. その為の準備として次の命題を証明しておく.

命題 7.6. W_{HFB} の任意のベクトル l に対して

$$\begin{aligned} (tt) \cdot l &= l \\ (t\tilde{\phi}t) \cdot l &= \widetilde{(-\phi)} \cdot l \end{aligned} \quad (7.129)$$

が成り立つ. 従って W_{HFB} 上で考察するとき

$$\begin{aligned} tt &= E \\ t\tilde{\phi}t &= \widetilde{(-\phi)} \end{aligned} \quad (7.130)$$

が成り立つ.

証明. $l = (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow})$ の場合を考える.

$$\begin{aligned}
 (tt) \cdot l &= t \cdot (t \cdot l) \\
 &= t \cdot \{(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger) + (t \cdot a_{\mathbf{k}'\downarrow})(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow})\} \\
 &= t \cdot \{(-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger)(a_{(-\mathbf{k}')\uparrow}^\dagger) + (a_{(-\mathbf{k}')\uparrow})(-a_{-\mathbf{k}\downarrow})\} \\
 &= \{(-a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(-a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger) + (-a_{\mathbf{k}'\downarrow})(-a_{\mathbf{k}\uparrow})\} \\
 &= \{a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}\} = l
 \end{aligned} \tag{7.131}$$

$$\begin{aligned}
 (t\tilde{\phi}t) \cdot l &= (t\tilde{\phi}) \cdot (t \cdot l) \\
 &= (t\tilde{\phi}) \{-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k}')\uparrow}^\dagger - a_{(-\mathbf{k}')\uparrow} a_{(-\mathbf{k}\downarrow)}\} \\
 &= t \cdot \{-e^{i\phi} a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k}')\uparrow}^\dagger - e^{-i\phi} a_{(-\mathbf{k}')\uparrow} a_{(-\mathbf{k}\downarrow)}\} \\
 &= \{e^{-i\phi} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + e^{i\phi} a_{\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}\} \\
 &= \widetilde{(-\phi)} \cdot l
 \end{aligned} \tag{7.132}$$

W_{HFB} の他の基底についても同様に証明できる. ■

命題 7.7. $\mathbf{R}$ の W_{HFB} 上の既約表現は次式で定義される $\check{\mathbf{R}}^{(0)}$, $\check{\mathbf{R}}^{(1)}$, $\check{\mathbf{R}}^{(2)}$ である.

$$\begin{aligned}
 &\begin{pmatrix} \check{\mathbf{R}}^{(0)}(\tilde{\phi}) &= 1 \\ \check{\mathbf{R}}^{(0)}(t\tilde{\phi}) &= 1 \end{pmatrix} \\
 &\begin{pmatrix} \check{\mathbf{R}}^{(1)}(\tilde{\phi}) &= 1 \\ \check{\mathbf{R}}^{(1)}(t\tilde{\phi}) &= -1 \end{pmatrix} \\
 &\begin{pmatrix} \check{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\phi}) &= \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \\ \check{\mathbf{R}}^{(2)}(t\tilde{\phi}) &= \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{7.133}$$

証明. $\check{\Phi}^{(0)}$ では t の変換性だけが問題になる. W_{HFB} 上では $t^2 = E$ であり, t に対する異なる変換性は ± 1 となる. したがって対応する $\mathbf{R} = \Phi + t\Phi$ の既約表現は次式で定義される $\check{\mathbf{R}}^{(0)}$ と $\check{\mathbf{R}}^{(1)}$ である.

$$\begin{aligned}
 &\begin{pmatrix} \check{\mathbf{R}}^{(0)}(\tilde{\phi}) &= 1 \\ \check{\mathbf{R}}^{(0)}(t\tilde{\phi}) &= 1 \end{pmatrix} \\
 &\begin{pmatrix} \check{\mathbf{R}}^{(1)}(\tilde{\phi}) &= 1 \\ \check{\mathbf{R}}^{(1)}(t\tilde{\phi}) &= -1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{7.134}$$

$\check{\Phi}^{(2)}$ の基底を $|l\rangle = |l_1, l_2\rangle$ とする. すなわち

$$\tilde{\phi} \cdot |l\rangle = |l\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) \tag{7.135}$$

$|l'\rangle$ を

$$|l'\rangle \equiv t \cdot |l\rangle = |t \cdot l_1, t \cdot l_2\rangle \quad (7.136)$$

で定義する. そのとき W_{HFB} 上では $t^2 = E, t\tilde{\phi}t = \widetilde{(-\phi)}$ であるので

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot |l'\rangle &= \tilde{\phi}t \cdot |l\rangle = t\tilde{\phi}t \cdot |l\rangle \\ &= t(t\tilde{\phi}t) \cdot |l\rangle \\ &= t\widetilde{(-\phi)} \cdot |l\rangle \\ &= t \cdot |l\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\widetilde{(-\phi)}) \\ &= |l'\rangle \check{\Phi}^{(2')}(\tilde{\phi}) \end{aligned} \quad (7.137)$$

ここで

$$\check{\Phi}^{(2')}(\tilde{\phi}) = \check{\Phi}^{(2)}(\widetilde{(-\phi)}) \quad (7.138)$$

である.

したがって $|l'\rangle$ は $\check{\Phi}$ の既約表現 $\check{\Phi}^{(2')}(\tilde{\phi})$ の基底になっている.

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.139)$$

とすると

$$\check{\Phi}^{(2')}(\tilde{\phi}) = U \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) U^{-1} \quad (7.140)$$

であるので $\check{\Phi}^{(2')}(\tilde{\phi})$ と $\check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})$ は同値である. したがって

$$\tilde{\phi} \cdot |l'\rangle = |l'\rangle U \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) U^{-1} \quad (7.141)$$

となり, 右から U を掛けて

$$\tilde{\phi} \cdot |l'\rangle U = |l'\rangle U \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) \quad (7.142)$$

を得る. したがって

$$|l''\rangle \equiv |l'\rangle U \quad (7.143)$$

と置くと

$$\tilde{\phi} \cdot |l''\rangle = |l''\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) \quad (7.144)$$

となり, $|l''\rangle$ は $\check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})$ の基底になっている. $|l'\rangle = |l''\rangle U^{-1} = |l''\rangle U$ を考慮し

$$|\lambda\rangle = (\lambda_1, \lambda_2) = |l\rangle + |l''\rangle = (l_1 + t \cdot l_2, l_2 + t \cdot l_1) \quad (7.145)$$

とすると

$$\begin{aligned}
 \tilde{\phi} \cdot |\lambda\rangle &= \tilde{\phi} \cdot |l\rangle + \tilde{\phi} \cdot |l''\rangle \\
 &= |l\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) + |l''\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) \\
 &= |\lambda\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})
 \end{aligned} \tag{7.146}$$

$$\begin{aligned}
 t \cdot |\lambda\rangle &= t \cdot |l\rangle + t \cdot |l''\rangle \\
 &= |l'\rangle + t \cdot |l'\rangle U \\
 &= |l''\rangle U + tt \cdot |l\rangle U \\
 &= (|l\rangle + |l''\rangle) U \\
 &= |\lambda\rangle U
 \end{aligned} \tag{7.147}$$

を得る. ここで $|\lambda\rangle$ よりもっと扱いやすい基底に変換しておく.

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \\
 |\Lambda\rangle &= (\Lambda_1, \Lambda_2) = |\lambda\rangle V
 \end{aligned} \tag{7.148}$$

と置いて

$$\begin{aligned}
 V^{-1}UV &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma^3 \\
 V^{-1}\check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})V &= \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})
 \end{aligned} \tag{7.149}$$

を考慮すると

$$\begin{aligned}
 \tilde{\phi} \cdot |\Lambda\rangle &= \tilde{\phi} \cdot |\lambda\rangle V \\
 &= |\lambda\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) V \\
 &= |\lambda\rangle V V^{-1} \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) V \\
 &= |\Lambda\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi})
 \end{aligned} \tag{7.150}$$

$$\begin{aligned}
 t \cdot |\Lambda\rangle &= t \cdot |\lambda\rangle V \\
 &= |\lambda\rangle UV \\
 &= |\lambda\rangle V V^{-1} UV \\
 &= |\Lambda\rangle \sigma^3
 \end{aligned} \tag{7.151}$$

を得る. これより

$$\begin{aligned}
 (t\tilde{\phi}) \cdot |\Lambda\rangle &= t \cdot |\Lambda\rangle \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) \\
 &= |\Lambda\rangle \sigma^3 \check{\Phi}^{(2)}(\tilde{\phi}) \\
 &= |\Lambda\rangle \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{7.152}$$

この式と (7.150) より命題 7.7 の最後の 2 式が示された. ■

群	既約表現	備考
P	$\check{P}^{(\Gamma,j)}(pT(\mathbf{n})) = d^j(p)$	$T(\mathbf{n}) \in L(t_1, t_2), p \in D_4$
	$\check{P}^{(M,j)}(pT(\mathbf{n})) = d^{(j)}(p) \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n})$	
S	$\check{S}^{(0)}(u(\mathbf{n}, \theta)) = 1$	$u(\mathbf{n}, \theta) \in S$
	$\check{S}^{(1)}(u(\mathbf{n}, \theta)) = R(\mathbf{n}, \theta)$	
R	$\check{R}^{(0)}(\tilde{\phi}) = 1$	$\tilde{\phi} \in \Phi$
	$\check{R}^{(0)}(t\tilde{\phi}) = 1$	
	$\check{R}^{(1)}(\tilde{\phi}) = 1$	
	$\check{R}^{(1)}(t\tilde{\phi}) = -1$	
	$\check{R}^{(2)}(\tilde{\phi}) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$	
	$\check{R}^{(2)}(t\tilde{\phi}) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ -\sin \phi & -\cos \phi \end{pmatrix}$	

(1) $d^{(j)}$ は D_{4h} の既約表現行列.

$$(2) R(\mathbf{n}, \theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta)n_1^2 & (1 - \cos \theta)n_1n_2 - n_3 \sin \theta & (1 - \cos \theta)n_1n_3 + n_2 \sin \theta \\ (1 - \cos \theta)n_1n_2 + n_3 \sin \theta & \cos \theta + (1 - \cos \theta)n_2^2 & (1 - \cos \theta)n_2n_3 - n_1 \sin \theta \\ (1 - \cos \theta)n_1n_3 - n_2 \sin \theta & (1 - \cos \theta)n_2n_3 + n_1 \sin \theta & \cos \theta + (1 - \cos \theta)n_3^2 \end{pmatrix}$$

(3) P については $\mathbf{k}$ ベクトルが Γ 点: $\mathbf{k} = (0, 0)$, M 点: $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ の既約表現だけを記載した.

表 7.3: P, S, R の W_{HFB} における既約表現行列

ここで $|\Lambda\rangle = (\Lambda_1, \Lambda_2)$ を $|\mathbf{l}\rangle = (l_1, l_2)$ で表しておく. (7.145), (7.148) を使うと

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{l_1 + l_2 + t \cdot (l_1 + l_2)\} \\ \Lambda_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{-l_1 + l_2 + t \cdot (l_1 - l_2)\} \end{aligned} \quad (7.153)$$

を得る. これより

$$\begin{aligned} t \cdot \Lambda_1 &= \Lambda_1 \\ t \cdot \Lambda_2 &= -\Lambda_2 \end{aligned} \quad (7.154)$$

が成り立つことは容易に分かる. 以上をまとめて表 7.3 に記す.

超伝導を記述するために必要な既約表現 $\check{R}^{(2)}$ の基底の具体例を挙げておく.

命題 7.8. 任意の $\lambda \in (0, 1, 2, 3)$ に対して

$$\begin{aligned} h_1^\lambda &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y(\mathbf{k}) \{a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger\} + H.C \\ h_2^\lambda &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} iy(\mathbf{k}) \{a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger\} + H.C \end{aligned} \quad (7.155)$$

で定義される $(h_1^\lambda, h_2^\lambda)$ は既約表現 $\check{\mathbf{R}}^{(2)}$ の基底になっている。ここで $y(\mathbf{k})$ は $\lambda = 0$ のときは $\mathbf{k}$ の実数値偶関数, $\lambda \neq 0$ のときは $\mathbf{k}$ の実数値奇関数である。

証明. $\lambda = 1$ の場合を考える。まず $y(\mathbf{k})$ が奇関数であることを示す。

$$(i\sigma^1\sigma^2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.156)$$

を考慮すると

$$\begin{aligned} h_1^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} y(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^1\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} y(\mathbf{k}) \{ -a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \} + H.C \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} y(-\mathbf{k}') \{ -a_{(-\mathbf{k}')\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger + a_{(-\mathbf{k}')\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \} + H.C \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} (-y(-\mathbf{k}')) \{ -a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k}')\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k}')\downarrow}^\dagger \} + H.C \end{aligned}$$

ここで第2番目の等号で $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ と記した。従って $y(-\mathbf{k}) = -y(\mathbf{k})$ を得る。同様な手法で $\lambda = 0$ の場合, $y(\mathbf{k})$ 偶関数, $\lambda = 2, 3$ の場合は $y(\mathbf{k})$ は奇関数であることが示される。

t に対する変換性は

$$\begin{aligned} t \cdot h_1^1 &= \sum_{\mathbf{k}} y(\mathbf{k}) \{ -(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) + (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)(t \cdot a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \} + H.C \\ &= \sum_{\mathbf{k}} y(\mathbf{k}) \{ -(-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger)(-a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) + (a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger)(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) \} + H.C \\ &= \sum_{\mathbf{k}} y(\mathbf{k}) \{ -a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \} + H.C \\ &= h_1^1 \end{aligned} \quad (7.157)$$

を得る。同様の方法で $t \cdot h_2^1 = -h_2^1$ を得る。

$\tilde{\phi}$ に対する変換性は

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \cdot h_1^1 &= \sum_{\mathbf{k}} y(\mathbf{k}) e^{i\phi} \{ -a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger \} + H.C \\ &= \cos \phi h_1^1 + \sin \phi h_2^2 \end{aligned} \quad (7.158)$$

が成り立つ。同様にして

$$\tilde{\phi} \cdot h_2^1 = -\sin \phi h_1^1 + \cos \phi h_2^1 \quad (7.159)$$

が成り立つ。これより (h_1^1, h_2^1) が既約表現 $\check{\mathbf{R}}^{(2)}$ の基底であることが分かる。同様にして $\lambda = 0, 2, 3$ の場合も $(h_1^\lambda, h_2^\lambda)$ が既約表現 $\check{\mathbf{R}}^{(2)}$ の基底であることが分かる。 ■

7.6 G_0 の既約表現とその基底

以上の P の既約表現 $\check{P}^{(\Gamma j)}$, $\check{P}^{(Mj)}$, S の既約表現 $\check{S}^{(\mu)}$, R の既約表現 $\check{R}^{(\nu)}$ より $G_0 = P \times S \times R$ の既約表現は

$$\begin{aligned}\check{G}_0^{(\Gamma j, \mu, \nu)} &= \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)} \\ \check{G}_0^{(Mj, \mu, \nu)} &= \check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)}\end{aligned}\quad (7.160)$$

で与えられる。ここで

$$\begin{aligned}j &= A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}, E_g, A_{1u}, A_{2u}, B_{1u}, B_{2u}, E_u, \\ \mu &= 0, 1 \\ \nu &= 0, 1, 2\end{aligned}\quad (7.161)$$

である。第 7.6 節では既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma j, \mu, \nu)}$, $\check{G}_0^{(Mj, \mu, \nu)}$ の W_{HFB} における基底を求めよう。それらに対応する基底を

$$\begin{aligned}h(\Gamma j, \mu, \nu)_{m, \lambda, l} \\ h(Mj, \mu, \nu)_{m, \lambda, l}\end{aligned}\quad (7.162)$$

とする。ここで

$$\begin{aligned}m &= 1, \dots, |\check{P}^{(\Gamma j)}| \text{ or } |\check{P}^{(Mj)}| \\ \lambda &= 1, \dots, |\check{S}^{(\mu)}| \\ l &= 1, \dots, |\check{R}^{(\nu)}|\end{aligned}$$

以後 $\mu = 0, 1, \nu = 0, 1, 2$ の各場合について既約表現の W_{HFB} における基底を求める。

$$(1) \check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 0)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(0)}$$

(7.95), (7.117), (7.124) より基底は

$$h(\Gamma j, 0, 0)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} = \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad (7.163)$$

の型で書ける。 $h(\Gamma j, 0, 0)_{m, 1, 1}$ はエルミートであるので

$$x^{(j)}(\mathbf{k})^* = x^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.164)$$

を得る。また

$$\begin{aligned}t \cdot h(\Gamma j, 0, 0)_{m, 1, 1} &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) + (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (-a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (-a_{-\mathbf{k}\downarrow}) + (a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) (a_{-\mathbf{k}\uparrow}) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow})\end{aligned}\quad (7.165)$$

となり $t \cdot h(\Gamma j, 0, 0)_{m,1,1} = h(\Gamma j, 0, 0)_{m,1,1}$ であるので

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* = x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.166)$$

(7.164) および (7.166) より

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.167)$$

を得る. すなわち $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の実数値偶関数である.

$$(2) \check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 1)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(1)}$$

$\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 0)}$ の場合と同様に基底は実数値関数 $x^{(j)}(\mathbf{k})$ を使って

$$h(\Gamma j, 0, 1)_{m,1,1} = \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad (7.168)$$

の型で書ける. この場合は 時間反転で符号を変える, すなわち $t \cdot h(\Gamma j, 0, 1)_{m,1,1} = -h(\Gamma j, 0, 1)_{m,1,1}$ であるので $x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* = -x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ となり

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k}) = -x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.169)$$

が得られる. すなわち $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の実数値奇関数である.

$$(3) \check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 0)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(0)}$$

(7.95), (7.120), (7.124) より基底は

$$h(\Gamma j, 1, 0)_{m,\lambda,1} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}s'} \quad (7.170)$$

の型に書ける. $(\sigma_{ss'}^\lambda)^* = \sigma_{s's}^\lambda$ が成り立つので $h(\Gamma j, 1, 0)_{m,\lambda,1}$ のエルミート条件より $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の実関数になる. $\lambda = 1$ の場合

$$\begin{aligned} t \cdot h(\Gamma j, 1, 0)_{m,1,1} &= t \cdot \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^1 a_{\mathbf{k}s'} \right\} \\ &= t \cdot \left\{ \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) \right\} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) + (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger) (a_{(-\mathbf{k})\uparrow}) + (a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger) (-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}) \\ &= - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^1 a_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \quad (7.171)$$

を得る. 同様に $\lambda = 2, 3$ に対して

$$t \cdot h(\Gamma j, 1, 0)_{m, \lambda, 1} = - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}s'} \quad (7.172)$$

を得る. $t \cdot h(\Gamma j, 1, 0)_{m, \lambda, 1} = h(\Gamma j, 1, 0)_{m, \lambda, 1}$ および $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が実関数あることを考慮すると

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k}) = -x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.173)$$

を得る. したがって $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は実数値奇関数である.

$$(4) \check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 1)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(1)}$$

$\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 0)}$ の場合と同様に基底は実数値関数 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を使って

$$h(\Gamma j, 0, 1)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}s'} \quad (7.174)$$

の型で書ける. この場合は $t \cdot h(\Gamma j, 1, 1)_{m, \lambda, 1} = -h(\Gamma j, 1, 1)_{m, \lambda, 1}$ であるで

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.175)$$

が得られる. すなわち $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は $\mathbf{k}$ の実数値偶関数である.

$$(5) \check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 2)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(2)}$$

(7.95), (7.117), 命題 7.8 より基底は実数値偶関数 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を使って

$$\begin{aligned} h(\Gamma j, 0, 2)_{m, 1, 1} &= \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger \} + H.C \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \} + H.C \end{aligned} \quad (7.176)$$

$$\begin{aligned} h(\Gamma j, 0, 2)_{m, 1, 2} &= \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} i x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger \} + H.C \\ &= \sum_{\mathbf{k}} i x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \{ a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \} + H.C \end{aligned} \quad (7.177)$$

で表される.

$$(6) \check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 2)} = \check{P}^{(\Gamma j)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(2)}$$

(7.95), (7.120), 命題 7.8 より基底は実数値奇関数 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を使って

$$h(\Gamma j, 1, 2)_{m, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{-\mathbf{k}s'}^\dagger + H.C \quad (7.178)$$

$$h(\Gamma j, 1, 2)_{m, \lambda, 2} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} i x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{-\mathbf{k}s'}^\dagger + H.C \quad (7.179)$$

で表される.

$$(7) \check{G}_0^{(Mj,0,0)} = \check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(0)}$$

(7.97), (7.117), (7.124) より基底は

$$h(Mj, 0, 0)_m = \sum_{\mathbf{k}s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} = \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \{ a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \quad (7.180)$$

の型に書ける. ここで $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ であり, $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は $h(Mj, 0, 0)_m$ のエルミート性より

$$x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \quad (7.181)$$

が成り立つ. また $h(Mj, 0, 0)_m$ に t を作用させると

$$\begin{aligned} t \cdot h(Mj, 0, 0)_m &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (t \cdot a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) + (t \cdot a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (-a_{(-\mathbf{k}-\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger)(-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) + (a_{(-\mathbf{k}-\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger)(a_{(-\mathbf{k})\uparrow}) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ a_{(-\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow} + a_{(-\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* \{ a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \end{aligned} \quad (7.182)$$

を得る. ここで第3の等号は $-\mathbf{k} - \mathbf{Q} \doteq -\mathbf{k} - \mathbf{Q} + 2\mathbf{Q} = -\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ を, 第4の等号は $\mathbf{k}$ を $-\mathbf{k}$ に置き換えて和を取ったものである. $t \cdot h(Mj, 0, 0)_m = h(Mj, 0, 0)_m$ より

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* = x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.183)$$

を得る. (7.181) と (7.183) より $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数の場合は $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は実数値関数で $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ となる. $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の奇関数の場合は $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は純虚数値関数で $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ となる.

$$(8) \check{G}_0^{(Mj,0,1)} = \check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(1)}$$

この場合も基底は (7.180) の表式で表され, $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は (7.181) を満たす.

この場合 $t \cdot h(Mj, 0, 1)_m = -h(Mj, 0, 1)_m$ より

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* = -x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.184)$$

を得る. したがって $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が偶関数の場合は純虚数関数で

$$x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.185)$$

を満たす. $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が奇関数の場合は実数値関数で

$$x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.186)$$

を満たす.

$$(9) \check{G}_0^{(Mj,1,0)} = \check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(0)}$$

(7.97), (7.120), (7.124) より基底は

$$h(Mj, 1, 0)_{m,\lambda} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_{s'}} \quad (7.187)$$

の型に書ける. $(\sigma^\lambda)_{ss'}^* = \sigma_{s's}^\lambda$ より $h(Mj, 1, 0)_{m,\lambda}$ のエルミート性から

$$x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* = x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \quad (7.188)$$

を得る. $\lambda = 3$ の場合 $h(Mj, 1, 0)_{m,3}$ を具体的に書くと

$$h(Mj, 1, 0)_{m,3} = \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \{ a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \quad (7.189)$$

を得る. そのとき

$$\begin{aligned} t \cdot h(Mj, 1, 0)_{m,3} &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (t \cdot a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger) (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) - (t \cdot a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger) (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(\mathbf{k})^* \{ (-a_{(-\mathbf{k}-\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger) (-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) - (a_{(-\mathbf{k}-\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger) (a_{(-\mathbf{k})\uparrow}) \} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}} x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* \{ a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} - a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \end{aligned} \quad (7.190)$$

を得る. $t \cdot h(Mj, 1, 0)_{m,3} = h(Mj, 1, 0)_{m,3}$ より

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* = -x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.191)$$

を得る. したがって $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数の場合 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は純虚数値関数で $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を満たす. $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の奇関数の場合 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は実数値関数で $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を満たす.

$$(10) \check{G}_0^{(Mj,1,1)} = \check{P}^{(Mj)} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(1)}$$

この場合も基底は (7.187) で表される. $t \cdot h(Mj, 1, 1)_{m,3} = -h(Mj, 1, 1)_{m,3}$ より

$$x_m^{(j)}(-\mathbf{k})^* = x_m^{(j)}(\mathbf{k}) \quad (7.192)$$

を得る. したがって $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数の場合 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は実数数値関数で $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を満たす. $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の奇関数の場合 $x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ は純虚数値関数で $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を満たす.

$\check{G}_0^{(Mj,0,2)}, \check{G}_0^{(Mj,1,2)}$ の基底は通常の超伝導状態では現れないので省略する. 以上をまとめて表 7.4 に示した.

既約表現	W_{HFB} における基底	$x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ の性質
(1) $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 0)}$	$h(\Gamma j, 0, 0)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s}$	(R, e)
(2) $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 1)}$	$h(\Gamma j, 0, 1)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s}$	(R, o)
(3) $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 0)}$	$h(\Gamma j, 1, 0)_{m, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_{s'}}$	(R, o)
(4) $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 1)}$	$h(\Gamma j, 1, 1)_{m, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_{s'}}$	(R, e)
(5) $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, 2)}$	$h(\Gamma j, 0, 2)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})_{s'}}^\dagger + H.C$ $h(\Gamma j, 0, 2)_{m, 1, 2} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} i x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})_{s'}}^\dagger + H.C$	(R, e)
(6) $\check{G}_0^{(\Gamma j, 1, 2)}$	$h(\Gamma j, 1, 2)_{m, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})_{s'}}^\dagger + H.C$ $h(\Gamma j, 1, 2)_{m, \lambda, 2} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} i x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger (i\sigma^\lambda \sigma^2)_{ss'} a_{(-\mathbf{k})_{s'}}^\dagger + H.C$	(R, o)
(7) $\check{G}_0^{(Mj, 0, 0)}$	$h(Mj, 0, 0)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s}$	(R, e, e) (I, o, o)
(8) $\check{G}_0^{(Mj, 0, 1)}$	$h(Mj, 0, 1)_{m, 1, 1} = \sum_{\mathbf{k}_s} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s}$	(I, e, o) (R, o, e)
(9) $\check{G}_0^{(Mj, 1, 0)}$	$h(Mj, 1, 0)_{m, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_s}$	(I, e, o) (R, o, e)
(10) $\check{G}_0^{(Mj, 1, 1)}$	$h(Mj, 1, 1)_{m, \lambda, 1} = \sum_{\mathbf{k}_{ss'}} x_m^{(j)}(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_{s'}}$	(R, e, e) (I, o, o)

1) $m = 1, \dots, d_j$ 2) $\lambda = 1, 2, 3$

3) (R, e) は実数値偶関数を示す.

4) (R, o) は実数値奇関数を示す.

5) (R, e, e) は実数値偶関数で $\mathbf{Q}$ 偶を示す. (R, o, e) は実数値奇関数で $\mathbf{Q}$ 偶を示す.6) (I, e, o) は純虚数値偶関数で $\mathbf{Q}$ 奇を示す. (I, o, o) は純虚数値奇関数で $\mathbf{Q}$ 奇を示す.7) $\mathbf{Q}$ 偶 (奇) は $x_m^{(j)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = +(-)x_m^{(j)}(\mathbf{k})$ を示す.8) $\check{G}_0^{(Mj, 0, 2)}, \check{G}_0^{(Mj, 1, 2)}$ は通常の超伝導では現れないので省略した.表 7.4: W_{HFB} における G_0 の既約表現の基底

第8章 正方格子上的2次元拡張 Hubbard 模型の 非超伝導状態

第8章では超伝導状態以外の状態を取り扱う。\$\mathbf{\check{P}}\$としてはオーダーリングベクトルが\$\Gamma\$点 (\$\mathbf{k} = (0, 0)\$) と M 点 (\$\mathbf{k} = (\pi, \pi) = \mathbf{Q}\$) の場合だけを取り扱う。この場合の最も一般的な平均場ハミルトニアンは

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left(z^0(\mathbf{k})_{ss'} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} + z^1(\mathbf{k})_{ss'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \right) \quad (8.1)$$

の形をしている。\$a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(-\mathbf{k})s'}^\dagger\$等の項がない平均場ハミルトニアンを **Hartree-Fock(HF)** ハミルトニアンといい、それによる近似を **HF 近似**という。\$z^0(\mathbf{k})_{ss'}, z^1(\mathbf{k})_{ss'}\$の選び方によって正常状態、電荷密度波、スピン密度波、ボンドオーダー波、電流密度波¹、スピン流密度波²等を記述することが出来る。いろいろなタイプの \$z^0(\mathbf{k})_{ss'}, z^1(\mathbf{k})_{ss'}\$の形を系統的に決定することがこの章の主要な課題である。第8章では \$G_0 = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times \mathbf{R}\$の既約表現

$$\begin{aligned} \check{G}_0^{(\Gamma j, \mu, \nu)} &= \check{\mathbf{P}}^{(\Gamma j)} \otimes \check{\mathbf{S}}^{(\mu)} \otimes \check{\mathbf{R}}^\nu, \quad \mu, \nu = 0, 1 \\ \check{G}_0^{(M j, \mu, \nu)} &= \check{\mathbf{P}}^{(M j)} \otimes \check{\mathbf{S}}^{(\mu)} \otimes \check{\mathbf{R}}^\nu, \quad \mu, \nu = 0, 1 \end{aligned} \quad (8.2)$$

より導かれる状態を考察する。各既約表現の固定部分群 (その固定点部分空間が1次元空間のもの)³を求める。それより HFB 密度行列の対称性が定まる。その固定部分群に対応する平均場ハミルトニアン \$H_m\$の標準形と状態を特徴付ける秩序変数 (order parameter) が定まる。

第8.1節ではこの章全体にわたって使われる一般的な公式を求める。第8.2節では\$\Gamma\$点での非磁性状態、第8.3節ではM点での非磁性状態、第8.4節では\$\Gamma\$点での磁性状態、第8.5節ではM点での磁性状態を考察する。それぞれの状態について平均場ハミルトニアン \$H_m\$, 自由エネルギー \$F_{\text{HF}}\$, 秩序変数の表式を求める。

8.1 一般的諸公式

(8.1)の平均場ハミルトニアンは次のように書き直すことが出来る。

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\lambda=0}^3 \{ x_0^\lambda(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}s'} + x_1^\lambda(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}s'} \} \quad (8.3)$$

ここで \$x_0^\lambda(\mathbf{k}), x_1^\lambda(\mathbf{k})\$は(8.1)の \$z^0(\mathbf{k}), z^1(\mathbf{k})\$とつぎの関係がある。

¹d-density wave と呼ばれている。

²d-wave spin density と呼ばれている。

³以後「固定部分群」をこのような意味で用いる。

$$\sum_{\lambda=0}^3 x_0^\lambda(\mathbf{k}) \sigma_{ss'}^\lambda = z^0(\mathbf{k}) \quad (8.4)$$

$$\sum_{\lambda=0}^3 x_1^\lambda(\mathbf{k}) \sigma_{ss'}^\lambda = z^1(\mathbf{k}) \quad (8.5)$$

(8.4), (8.5) の両辺に $\sigma_{s's}^\mu$ を掛けて s, s' につき和を取ると,

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=0}^3 x_0^\lambda(\mathbf{k}) \sigma_{ss'}^\lambda \sigma_{s's}^\mu &= z^0(\mathbf{k})_{ss'} \sigma_{s's}^\mu \\ \sum_{\lambda=0}^3 x_1^\lambda(\mathbf{k}) \sigma_{ss'}^\lambda \sigma_{s's}^\mu &= z^1(\mathbf{k})_{ss'} \sigma_{s's}^\mu \end{aligned} \quad (8.6)$$

を得る. ここで

$$\sum_s (\sigma^\lambda \sigma^\mu)_{ss} = \begin{cases} 2 & \lambda = \mu \quad \text{のとき,} \\ 0 & \lambda \neq \mu \quad \text{のとき} \end{cases} \quad (8.7)$$

の関係を使うと

$$\begin{aligned} x_0^\lambda(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} z^0(\mathbf{k})_{ss'} \sigma_{s's}^\lambda \\ x_1^\lambda(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} z^1(\mathbf{k})_{ss'} \sigma_{s's}^\lambda \end{aligned} \quad (8.8)$$

が得られる.

H_m のエルミート共役をとると

$$\begin{aligned} (H_m)^\dagger &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\lambda=0}^3 \{ (x_0^\lambda(\mathbf{k}))^* a_{\mathbf{k}s'}^\dagger (\sigma_{ss'}^\lambda)^* a_{\mathbf{k}s} + (x_1^\lambda(\mathbf{k}))^* a_{\mathbf{k}s'}^\dagger (\sigma_{ss'}^\lambda)^* a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s} \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\lambda=0}^3 \{ (x_0^\lambda(\mathbf{k}))^* a_{\mathbf{k}s'}^\dagger (\sigma_{s's}^\lambda) a_{\mathbf{k}s} + (x_1^\lambda(\mathbf{k}+\mathbf{Q}))^* a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s'}^\dagger \sigma_{s's}^\lambda a_{\mathbf{k}s} \} \end{aligned} \quad (8.9)$$

を得る. ここで σ^λ のエルミート性 $(\sigma_{ss'}^\lambda)^* = \sigma_{s's}^\lambda$ を使い, 第二番目の和 $\sum_{\mathbf{k}}$ の $\mathbf{k}$ を $\mathbf{k}+\mathbf{Q}$ に置き換えた. H_m のエルミート性より

$$\begin{aligned} (x_0^\lambda(\mathbf{k}))^* &= x_0^\lambda(\mathbf{k}) \\ (x_1^\lambda(\mathbf{k}+\mathbf{Q}))^* &= x_1^\lambda(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.10)$$

を得る. 次のように $\rho_i^\lambda(\mathbf{k})$, $i = 0, 1$, $\lambda = 0, 1, 2, 3$ を定義する.

$$\begin{aligned} \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle \sigma_{ss'}^\lambda \\ \rho_1^\lambda(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle \sigma_{ss'}^\lambda \end{aligned} \quad (8.11)$$

命題 8.1. 次の等式が成り立つ.

$$\rho_0^\lambda(\mathbf{k})^* = \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) \quad (8.12)$$

$$\rho_1^\lambda(\mathbf{k})^* = \rho_1^\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \quad (8.13)$$

証明. (8.13) を証明する.

$$\begin{aligned} \rho_1^\lambda(\mathbf{k})^* &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle^* (\sigma_{ss'}^\lambda)^* \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle (a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'})^\dagger \rangle (\sigma_{s's}^\lambda) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{\mathbf{k}s'}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s} \rangle (\sigma_{s's}^\lambda) \\ &= \rho_1^\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{aligned} \quad (8.14)$$

ここで命題 6.1 と $(\sigma_{ss'}^\lambda)^* = \sigma_{s's}^\lambda$ を使った ■

命題 8.2. 次の等式が成り立つ.

$$\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle = \sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^\lambda \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) \quad (8.15)$$

$$\langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle = \sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^\lambda \rho_1^\lambda(\mathbf{k}) \quad (8.16)$$

証明. (8.15) を証明する. $(s, s') = (1, 1) = (\uparrow, \uparrow)$ のとき

$$\begin{aligned} (8.15) \text{ の左辺} &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ (8.15) \text{ の右辺} &= \sigma_{11}^0 \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sigma_{11}^3 \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right) + \frac{1}{2} \left(\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right) \\ &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = (8.15) \text{ の左辺} \end{aligned} \quad (8.17)$$

同様に $(s, s') = (1, 2) = (\uparrow, \downarrow)$ のとき

$$\begin{aligned} (8.15) \text{ の左辺} &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\ (8.15) \text{ の右辺} &= \sigma_{21}^1 \rho_0^1(\mathbf{k}) + \sigma_{21}^2 \rho_0^2(\mathbf{k}) \\ &= 1 \times \frac{1}{2} \left(\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \right) + i \times \frac{1}{2} \left(-i \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle + i \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \right) \\ &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = (8.15) \text{ の左辺} \end{aligned}$$

$(s, s') = (2, 2), (2, 1)$ の場合も同様に証明できる. また (8.16) も同様に証明できる. ■

H_m は $L_0 = L(e_1, e_2)$ の部分群 $L_1 = L(e_1 + e_2, e_1 - e_2)$ に対して不変である. そのとき次の命題が成り立つ.

命題 8.3. H_m が L_1 に対して不変であれば, 任意の s, s' に対して

$$\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle \neq 0 \quad (8.18)$$

が成り立つのは

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{k}' && \text{または} \\ \mathbf{k} &= \mathbf{k}' \pm \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (8.19)$$

の場合だけである. すなわち $\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle$, $\langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle$, $\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s'} \rangle$ の型以外の密度行列成分はゼロである.

証明.

H_m は L_1 に対して不変である. したがって定理 6.3 より $T(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2), T(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) \in L_1$ に対して

$$\begin{aligned} \langle (T(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger)(T(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) \cdot a_{\mathbf{k}'s'}) \rangle &= \langle (e^{-i(k_1+k_2)} a_{\mathbf{k}s}^\dagger)(e^{i(k'_1+k'_2)} a_{\mathbf{k}'s'}) \rangle \\ &= e^{i(k'_1-k_1+k'_2-k_2)} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle \end{aligned} \quad (8.20)$$

$$\begin{aligned} \langle (T(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger)(T(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2) \cdot a_{\mathbf{k}'s'}) \rangle &= \langle (e^{-i(k_1-k_2)} a_{\mathbf{k}s}^\dagger)(e^{i(k'_1-k'_2)} a_{\mathbf{k}'s'}) \rangle \\ &= e^{i(k'_1-k_1-k'_2+k_2)} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle \end{aligned} \quad (8.21)$$

が成り立つ. これより

$$\begin{aligned} k'_1 - k_1 + k'_2 - k_2 &= 2\pi n_1 \\ k'_1 - k_1 - k'_2 + k_2 &= 2\pi n_1 \end{aligned} \quad (8.22)$$

を得る. ここで n_1, n_2 は整数である. したがって

$$\begin{aligned} k'_1 - k_1 &= \pi(n_1 + n_2) \\ k'_2 - k_2 &= \pi(n_1 - n_2) \end{aligned} \quad (8.23)$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{k}' \text{ または} \\ \mathbf{k} &= \mathbf{k}' \pm \mathbf{Q} \end{aligned}$$

となる. ここで $\mathbf{k}$ と $\mathbf{k} + (2\pi m_1, 2\pi m_2)$ (m_1, m_2 は整数) との同値性を使った. ■

以下の便宜のため若干の記号を導入しておく.

$$\begin{aligned} W^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 2\langle \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s \mid V \mid \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s \rangle - \langle \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s \mid V \mid \mathbf{k}'s, \mathbf{k}s \rangle \\ W^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 2\langle \mathbf{k} + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}'s \mid V \mid \mathbf{k}s, \mathbf{k}' + \mathbf{Q}s \rangle - \langle \mathbf{k} + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}'s \mid V \mid \mathbf{k}' + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}s \rangle \\ Y^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\langle \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s \mid V \mid \mathbf{k}'s, \mathbf{k}s \rangle \\ Y^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\langle \mathbf{k} + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}'s \mid V \mid \mathbf{k}' + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}s \rangle \end{aligned} \quad (8.24)$$

$W^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ を (7.7) を使って書き直すと

$$\begin{aligned}
 W^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 2\langle \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s | V | \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s \rangle - \langle \mathbf{k}s, \mathbf{k}'s | V | \mathbf{k}'s, \mathbf{k}s \rangle \\
 &= \frac{2}{N} \{U + 4V + 2J\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\} - \frac{1}{N} \{U + 2V\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 4J\} \\
 &= \frac{1}{N} \{U + 8V - 4J + 2(2J - V)\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\}
 \end{aligned} \tag{8.25}$$

を得る. ここで $\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ を次の様に変形する.

$$\begin{aligned}
 \gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \cos(k_1 - k'_1) + \cos(k_2 - k'_2) \\
 &= \cos k_1 \cos k'_1 + \sin k_1 \sin k'_1 + \cos k_2 \cos k'_2 + \sin k_2 \sin k'_2 \\
 &= \frac{1}{2}(\cos k_1 + \cos k_2)(\cos k'_1 + \cos k'_2) \\
 &\quad + \frac{1}{2}(\cos k_1 - \cos k_2)(\cos k'_1 - \cos k'_2) \\
 &\quad + \sin k_1 \sin k'_1 + \sin k_2 \sin k'_2 \\
 &= \frac{1}{2}\gamma(\mathbf{k})\gamma(\mathbf{k}') + \frac{1}{2}\eta(\mathbf{k})\eta(\mathbf{k}') + \sin k_1 \sin k'_1 + \sin k_2 \sin k'_2
 \end{aligned} \tag{8.26}$$

ここで

$$\eta(\mathbf{k}) = \cos k_1 - \cos k_2 \tag{8.27}$$

である. (8.25) と (8.26) を使うと

$$W^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tag{8.28}$$

と表される. ここで

$$\begin{aligned}
 W_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= (1/N)(U + 8V - 4J) & \cdots A_{1g} \\
 W_2^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)(V - 2J)\gamma(\mathbf{k})\gamma(\mathbf{k}') & \cdots A_{1g} \\
 W_3^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)(V - 2J)\eta(\mathbf{k})\eta(\mathbf{k}') & \cdots B_{1g}
 \end{aligned} \tag{8.29}$$

$$\begin{aligned}
 W_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= (2/N)(V - 2J) \sin k_1 \sin k'_1 & \cdots E_u \\
 W_5^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= (2/N)(V - 2J) \sin k_2 \sin k'_2 & \cdots E_u
 \end{aligned} \tag{8.30}$$

上式の右の A_{1g}, B_{1g}, E_u の記号は $W_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ が $\mathbf{k}$ または $\mathbf{k}'$ の関数として D_{4h} の既約表現 A_{1g}, B_{1g}, E_u に属することを示す. 同様にして $W^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Y^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Y^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ も

$$\begin{aligned}
 W^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{i=1}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\
 Y^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{i=1}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\
 Y^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{i=1}^5 Y_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{8.31}$$

と分解される。ここで

$$\begin{aligned} W_1^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= (1/N)(U - 8V + 4J) & \cdots A_{1g} \\ W_2^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)(V - 2J)\gamma(\mathbf{k})\gamma(\mathbf{k}') & \cdots A_{1g} \\ W_3^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)(V - 2J)\eta(\mathbf{k})\eta(\mathbf{k}') & \cdots B_{1g} \end{aligned} \quad (8.32)$$

$$\left. \begin{aligned} W_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= (2/N)(V - 2J) \sin k_1 \sin k'_1 & \cdots E_u \\ W_5^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= (2/N)(V - 2J) \sin k_2 \sin k'_2 & \cdots E_u \end{aligned} \right\} \quad (8.33)$$

$$\begin{aligned} Y_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)(U + 4J) & \cdots A_{1g} \\ Y_2^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)V\gamma(\mathbf{k})\gamma(\mathbf{k}') & \cdots A_{1g} \\ Y_3^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)V\eta(\mathbf{k})\eta(\mathbf{k}') & \cdots B_{1g} \end{aligned} \quad (8.34)$$

$$\left. \begin{aligned} Y_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(2/N)V \sin k_1 \sin k'_1 & \cdots E_u \\ Y_5^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(2/N)V \sin k_2 \sin k'_2 & \cdots E_u \end{aligned} \right\} \quad (8.35)$$

$$\begin{aligned} Y_1^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)(U - 4J) & \cdots A_{1g} \\ Y_2^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)V\gamma(\mathbf{k})\gamma(\mathbf{k}') & \cdots A_{1g} \\ Y_3^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(1/N)V\eta(\mathbf{k})\eta(\mathbf{k}') & \cdots B_{1g} \end{aligned} \quad (8.36)$$

$$\left. \begin{aligned} Y_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(2/N)V \sin k_1 \sin k'_1 & \cdots E_u \\ Y_5^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(2/N)V \sin k_2 \sin k'_2 & \cdots E_u \end{aligned} \right\} \quad (8.37)$$

と既約分解される。

自由エネルギー F_{HF} , SCF 条件の表式を導くために有用な次の命題を証明する。

命題 8.4. 次の等式が成り立つ。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k} + \mathbf{q}s, \mathbf{k}'l \mid V \mid \mathbf{k}s', \mathbf{k}' + \mathbf{q}l'] \sigma_{s's}^\lambda \sigma_{l'l}^\mu \\ &= \begin{cases} 2\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow \rangle - \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow \rangle, & \lambda = \mu = 0 \text{ のとき} \\ -\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow \rangle, & \lambda = \mu = 1, 2, 3 \text{ のとき} \\ 0, & \lambda \neq \mu \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned} \quad (8.38)$$

証明. まず $\lambda = \mu = 0$ の場合を考える。 $\sigma_{11}^0 = \sigma_{22}^0 = 1, \sigma_{12}^0 = \sigma_{21}^0 = 0$ であるので

$$\frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k} + \mathbf{q}s, \mathbf{k}'l \mid V \mid \mathbf{k}s', \mathbf{k}' + \mathbf{q}l'] \sigma_{s's}^0 \sigma_{l'l}^0 \quad (8.39)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left\{ [\mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow] + [\mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \downarrow \mid V \mid \mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k}' + \mathbf{q} \downarrow] \right. \\ &\quad \left. + [\mathbf{k} + \mathbf{q} \downarrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow] + [\mathbf{k} + \mathbf{q} \downarrow, \mathbf{k}' \downarrow \mid V \mid \mathbf{k} \downarrow, \mathbf{k}' + \mathbf{q} \downarrow] \right\} \\ &= 2\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow \rangle - \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow \mid V \mid \mathbf{k}' + \mathbf{q} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow \rangle \end{aligned} \quad (8.40)$$

$\lambda = \mu = 1$ の場合

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [k+qs, k'l | V | ks', k'+ql'] \sigma_{s's}^1 \sigma_{l'l}^1 \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ [k+q \uparrow, k' \uparrow | V | k \downarrow, k'+q \downarrow] + [k+q \uparrow, k' \downarrow | V | k \downarrow, k'+q \uparrow] \right. \\
 & \quad \left. + [k+q \downarrow, k' \uparrow | V | k \uparrow, k'+q \downarrow] + [k+q \downarrow, k' \downarrow | V | k \uparrow, k'+q \uparrow] \right\} \\
 &= -\langle k+q \uparrow, k' \uparrow | V | k' + q \uparrow, k \uparrow \rangle
 \end{aligned} \tag{8.41}$$

を得る. $\lambda = \mu = 2, 3$ の場合についても同様な式を証明できる. $\lambda = 0, \mu = 1$ の場合

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [k+qs, k'l | V | ks', k'+ql'] \sigma_{s's}^0 \sigma_{l'l}^1 \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ [k+q \uparrow, k' \uparrow | V | k \uparrow, k'+q \downarrow] + [k+q \uparrow, k' \downarrow | V | k \uparrow, k'+q \uparrow] \right. \\
 & \quad \left. + [k+q \downarrow, k' \uparrow | V | k \downarrow, k'+q \downarrow] + [k+q \downarrow, k' \downarrow | V | k \downarrow, k'+q \uparrow] \right\} \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{8.42}$$

を得る. 他の $\lambda \neq \mu$ の場合も同様の関係式を証明できる. ■

$x_0^\lambda(k)$ は SCF 条件 (6.85) を $a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'}$ の係数に適用すると

$$\begin{aligned}
 \sum_{\lambda=0}^3 x_0^\lambda(k) \sigma_{ss'}^\lambda &= \{-2t\gamma(k) - \mu\} \delta_{ss'} + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ll'} [ks, k'l | V | ks', k'l'] \langle a_{\mathbf{k}'l}^\dagger a_{\mathbf{k}'l'} \rangle \\
 &= \{-2t\gamma(k) - \mu\} \delta_{ss'} + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ll'} \sum_{\lambda=0}^3 [ks, k'l | V | ks', k'l'] \sigma_{l'l}^\lambda \rho_0^\lambda(k')
 \end{aligned} \tag{8.43}$$

を得る. ここで命題 8.2 を使った. (8.43) の両辺に $\frac{1}{2} \sigma_{s's}^0$ を掛けて ss' につき和を取ると

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{\lambda=0}^3 \sum_{ss'} x_0^\lambda(k) \sigma_{ss'}^\lambda \sigma_{s's}^0 &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \{-2t\gamma(k) - \mu\} \delta_{ss'} \sigma_{s's}^0 \\
 & \quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} \sum_{\lambda=0}^3 [ks, k'l | V | ks', k'l'] \sigma_{s's}^0 \sigma_{l'l}^\lambda \rho_0^\lambda(k')
 \end{aligned} \tag{8.44}$$

を得る. 命題 8.4 を使うと

$$\begin{aligned}
 x_0^0(k) &= -2t\gamma(k) - \mu \\
 & \quad + \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ 2\langle k \uparrow, k' \uparrow | V | k \uparrow, k' \uparrow \rangle - \langle k \uparrow, k' \uparrow | V | k' \uparrow, k \uparrow \rangle \right\} \rho_0^0(k')
 \end{aligned} \tag{8.45}$$

を得る. 同様に (8.43) の両辺に $\frac{1}{2} \sigma_{s's}^\mu$ ($\mu \neq 0$) を掛けて ss' につき和を取ると

$$x_0^\mu(k) = \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ -\langle k \uparrow, k' \uparrow | V | k' \uparrow, k \uparrow \rangle \right\} \rho_0^\mu(k'), \quad \mu \neq 0 \text{ のとき} \tag{8.46}$$

を得る. $x_0^\lambda(\mathbf{k})$ と同様な方法で, $x_1^\lambda(\mathbf{k})$ に対する次の SCF 条件を得る.

$$\begin{aligned}
 x_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ 2 \langle \mathbf{k} + \mathbf{Q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow | V | \mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k}' + \mathbf{Q} \uparrow \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \langle \mathbf{k} + \mathbf{Q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow | V | \mathbf{k}' + \mathbf{Q} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow \rangle \right\} \rho_1^0(\mathbf{k}') \\
 x_1^\mu(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ - \langle \mathbf{k} + \mathbf{Q} \uparrow, \mathbf{k}' \uparrow | V | \mathbf{k}' + \mathbf{Q} \uparrow, \mathbf{k} \uparrow \rangle \right\} \rho_1^\mu(\mathbf{k}'), \quad \mu \neq 0 \text{ のとき}
 \end{aligned} \tag{8.47}$$

(8.24), (8.28), (8.31) の記号を使い (8.45), (8.46), (8.47) をまとめて次の SCF 条件を得る.

$$\begin{aligned}
 x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 x_0^\mu(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^\mu(\mathbf{k}'), \quad \mu \neq 0 \text{ のとき} \\
 x_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
 x_1^\mu(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 Y_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^\mu(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}), \quad \mu \neq 0 \text{ のとき}
 \end{aligned} \tag{8.48}$$

自由エネルギー F_{HF} は一般的表式 (6.64) を Hubbard 模型 (7.6) に適用し, 命題 8.3 を考慮すると

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k}s, \mathbf{k}'l | V | \mathbf{k}s', \mathbf{k}'l'] \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'l}^\dagger a_{\mathbf{k}'l'} \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k} + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}'l | V | \mathbf{k}s', \mathbf{k}' + \mathbf{Q}l'] \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \rangle \langle a_{\mathbf{k}'l}^\dagger a_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}l'} \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_j \{ f_j \log f_j + (1 - f_j) \log(1 - f_j) \}
 \end{aligned} \tag{8.49}$$

を得る. ここで

$$f_j = (1 + e^{\beta E_j})^{-1} \tag{8.50}$$

であり, E_j は平均場ハミルトニアン (8.3) の固有値である.

(8.49) の第 2 項と第 3 項は命題 8.2, 命題 8.4 を使うと次のように書ける.

(8.49) の第2項 + 第3項

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k}s, \mathbf{k}'l | V | \mathbf{k}s', \mathbf{k}'l'] \left(\sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^{\lambda} \rho_0^{\lambda}(\mathbf{k}) \right) \left(\sum_{\mu=0}^3 \sigma_{l'l}^{\mu} \rho_0^{\mu}(\mathbf{k}') \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k} + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}'l | V | \mathbf{k}s', \mathbf{k}' + \mathbf{Q}l'] \left(\sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^{\lambda} \rho_1^{\lambda}(\mathbf{k}) \right) \left(\sum_{\mu=0}^3 \sigma_{l'l}^{\mu} \rho_1^{\mu}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \right) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda, \mu=1}^3 \left\{ \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k}s, \mathbf{k}'l | V | \mathbf{k}s', \mathbf{k}'l'] \sigma_{s's}^{\lambda} \sigma_{l'l}^{\mu} \right\} \rho_0^{\lambda}(\mathbf{k}) \rho_0^{\mu}(\mathbf{k}') \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda, \mu=1}^3 \left\{ \sum_{ss'} \sum_{ll'} [\mathbf{k} + \mathbf{Q}s, \mathbf{k}'l | V | \mathbf{k}s', \mathbf{k}' + \mathbf{Q}l'] \sigma_{s's}^{\lambda} \sigma_{l'l}^{\mu} \right\} \rho_1^{\lambda}(\mathbf{k}) \rho_1^{\mu}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{i=1}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^{\lambda}(\mathbf{k}) \rho_0^{\lambda}(\mathbf{k}') \\
&+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{i=1}^5 Y_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^{\lambda}(\mathbf{k}) \rho_1^{\lambda}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \quad (8.51)
\end{aligned}$$

ここで3番目の等号は命題 8.4 と (8.24) の定義を使った。従って自由エネルギー F_{HF} は次のようにまとめられる。

$$\begin{aligned}
F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{i=1}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^{\lambda}(\mathbf{k}) \rho_0^{\lambda}(\mathbf{k}') \\
&+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{i=1}^5 Y_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^{\lambda}(\mathbf{k}) \rho_1^{\lambda}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
&+ \frac{1}{\beta} \sum_j \{f_j \log f_j + (1 - f_j) \log(1 - f_j)\} \quad (8.52)
\end{aligned}$$

各状態の物理的な性格を図形的に把握するために、次のような局所的秩序変数 (local order parameter) を定義する。

$$\begin{aligned}
d(\mathbf{n}) &= \sum_s \langle a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}s} \rangle && \text{格子点 } \mathbf{n} \text{ における電子密度} \\
p(\mathbf{n})_{\mu} &= \sum_s \langle a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_{\mu}s} \rangle && \text{格子点 } \mathbf{n} \text{ と } \mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mu} \text{ におけるボンドオーダー} \\
s^{\lambda}(\mathbf{n}) &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}s'} \rangle \sigma_{ss'}^{\lambda} && \text{格子点 } \mathbf{n} \text{ におけるスピン密度} \\
t^{\lambda}(\mathbf{n})_{\mu} &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \langle a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_{\mu}s'} \rangle \sigma_{ss'}^{\lambda} && \text{格子点 } \mathbf{n} \text{ と } \mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mu} \text{ におけるスピンボンドオーダー}
\end{aligned} \quad (8.53)$$

ここで最後の2式で $\lambda = 1, 2, 3$ である。

これらの局所的秩序変数を $\rho_l^\mu(\mathbf{k})$ ($l = 1, 2, \mu = 0, 1, 2, 3$) で表そう。Fourier 逆変換 (7.4) を使
うと

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} \rangle &= \frac{1}{N} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'} \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}'s'} \right) \right\rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp\{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{n}\} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \rangle + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^\lambda \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=0}^3 \sigma_{s's}^\lambda \rho_1^\lambda(\mathbf{k}) \quad (8.54)
 \end{aligned}$$

を得る。同様にして

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_\mu s'} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=0}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu) \sigma_{s's}^\lambda \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) \\
 &\quad + \frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=0}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu) \sigma_{s's}^\lambda \rho_1^\lambda(\mathbf{k}) \quad (8.55)
 \end{aligned}$$

(8.54), (8.55) より

$$\begin{aligned}
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \frac{2}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_\mu &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_\mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) + \frac{2}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu) \rho_1^0(\mathbf{k}) \\
 s^\lambda(\mathbf{n}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^\lambda(\mathbf{k}), \quad \lambda \neq 0 \\
 t^\lambda(\mathbf{n})_\mu &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_\mu) \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) + \frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu) \rho_1^\lambda(\mathbf{k}), \quad \lambda \neq 0
 \end{aligned} \quad (8.56)$$

を得る。

(8.52), (8.56) 等の $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ についての和を求めるときに便利な公式を挙げておく。

命題 8.5. ある任意の点群 P_0 を考える。 $f_i^\mu(\mathbf{k}), f_j^\nu(\mathbf{k})$ をそれぞれ点群 P_0 の同値でない既約表現 μ, ν の i, j 番目の基底関数とする。そのとき

$$\sum_{\mathbf{k}} f_i^\mu(\mathbf{k}) f_j^\nu(\mathbf{k})^* = 0 \quad (8.57)$$

が成り立つ。

証明. 任意の $p \in P_0$ に対して

$$\begin{aligned}
 p \cdot f_i^\mu(\mathbf{k}) &\equiv f_i^\mu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \sum_{i'} D_{i'i}^\mu(p) f_{i'}^\mu(\mathbf{k}) \\
 p \cdot f_j^\nu(\mathbf{k}) &\equiv f_j^\nu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}) = \sum_{j'} D_{j'j}^\nu(p) f_{j'}^\nu(\mathbf{k})
 \end{aligned} \quad (8.58)$$

が成り立つ. ここで D^μ, D^ν は P_0 の既約表現 μ, ν の表現行列である. 任意の $p \in P_0$ に対して

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} f_i^\mu(\mathbf{k}) f_j^\nu(\mathbf{k})^* &= \sum_{\mathbf{k}'} f_i^\mu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}') f_j^\nu(p^{-1} \cdot \mathbf{k}')^* \\ &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i'j'} D_{i'i}^\mu(p) D_{j'j}^\nu(p)^* f_{i'}^\mu(\mathbf{k}') f_{j'}^\nu(\mathbf{k}')^* \end{aligned} \quad (8.59)$$

が成り立つ. ここで $\mathbf{k}' = p \cdot \mathbf{k}$ と置いた. (8.59) の p を P_0 の全ての元にわたって加えて $|P_0|$ で割ると

$$\sum_{\mathbf{k}} f_i^\mu(\mathbf{k}) f_j^\nu(\mathbf{k})^* = \sum_{i'j'} \frac{1}{|P_0|} \sum_{p \in P_0} D_{i'i}^\mu(p) D_{j'j}^\nu(p)^* \sum_{\mathbf{k}'} f_{i'}^\mu(\mathbf{k}') f_{j'}^\nu(\mathbf{k}')^* \quad (8.60)$$

を得る. 定理 3.3 (その 1 の p.540) より, $\mu \neq \nu$ のとき

$$\frac{1}{|P_0|} \sum_{p \in P_0} D_{i'i}^\mu(p) D_{j'j}^\nu(p)^* = 0 \quad (8.61)$$

が得られる. 従って (8.60) の左辺はゼロになる. ■

8.2 Γ 点非磁性状態

この節ではオーダーリングベクトルが Γ 点: $\mathbf{k} = (0, 0)$ の非磁性状態を考える. 対応する G_0 の既約表現は $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, \nu)}$ ($\nu = 0, 1$) である. この既約表現に属する平均場ハミルトニアン H_m は表 7.4 (p.265) の (1), (2) の場合に該当し

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}} x_0^0(\mathbf{k}) \{a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}\} \quad (8.62)$$

の型に書ける. H_m は $\check{G}_0^{(\Gamma j, 0, \nu)}$ に属するので $L_0 = L(e_1, e_2), S$ に対して不変である.

H_m が L_0 に不変なとき, 次の命題が成立する.

命題 8.6. H_m が L_0 に対して不変であれば任意の s, s' および $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ ($\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$) に対して

$$\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle = 0 \quad (8.63)$$

が成り立つ.

証明. $T(\mathbf{n}) \in L_0$ ($\mathbf{n} \neq 0$) の作用に対して H_m は不変であるので, 定理 6.3 (p.228) より任意の s, s' および $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ ($\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$) に対して

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle &= \langle (T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}s}^\dagger) (T(\mathbf{n}) \cdot a_{\mathbf{k}'s'}) \rangle \\ &= \langle (\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger) (\exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{n}) a_{\mathbf{k}'s'}) \rangle \\ &= \exp\{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}\} \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle \end{aligned} \quad (8.64)$$

が成り立つ. $\exp\{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}\} \neq 1$ であるので

$$\langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle = 0$$

を得る. ■

S 不変な状態に対して次の命題が成立する.

命題 8.7. H_m が S 不変であれば任意の $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ に対して

$$\begin{aligned}\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle \\ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = 0\end{aligned}\tag{8.65}$$

証明. H_m はスピンの y 軸の周りの π 回転 $u_{2y} = u(\mathbf{e}_2, \pi)$ すなわち

$$u_{2y} \equiv u(\mathbf{e}_2, \pi) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\tag{8.66}$$

に対して不変である. したがって定理 6.3 より

$$\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \langle (u_{2y} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(u_{2y} \cdot a_{\mathbf{k}'\uparrow}) \rangle = \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle\tag{8.67}$$

を得る. また H_m はスピンの z 軸の周りの π 回転 $u_{2z} = u(\mathbf{e}_3, \pi)$, すなわち

$$u_{2z} \equiv u(\mathbf{e}_3, \pi) = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}\tag{8.68}$$

に対して不変である. したがって定理 6.3 より

$$\begin{aligned}\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle &= \langle (u_{2z} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(u_{2z} \cdot a_{\mathbf{k}'\downarrow}) \rangle \\ &= \langle (-i a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(i a_{\mathbf{k}'\downarrow}) \rangle \\ &= -\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle\end{aligned}$$

となり, $\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = 0$ を得る. 同様にして

$$\langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = 0$$

を得る. ■

命題 8.6, 命題 8.7 より $\rho_l^\lambda(\mathbf{k})$ の中でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k})$ だけで,

$$\rho_0^0(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle\tag{8.69}$$

となる. (8.48) より SCF 条件は

$$x_0^0(\mathbf{k}) = -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} W^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}')\tag{8.70}$$

となる. (8.62) の H_m の形より

$$\rho_0^0(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \frac{1}{\exp\{\beta x_0^0(\mathbf{k})\} + 1} = f(\mathbf{k})\tag{8.71}$$

を得る. これと (8.52) より自由エネルギー F_{HF} は

$$F_{\text{HF}} = \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^0(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}') \\ + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ f(\mathbf{k}) \log f(\mathbf{k}) + (1 - f(\mathbf{k})) \log(1 - f(\mathbf{k})) \right\} \quad (8.72)$$

で与えられる. 第3項の $\frac{2}{\beta}$ の2はスピンの $\uparrow, \downarrow$ 両方の寄与を意味する.

局所的秩序変数の $s^\lambda(\mathbf{n}), t^\lambda(\mathbf{n})_\mu$ ($\lambda \neq 0$) はゼロになり $d(\mathbf{n}), p(\mathbf{n})_\mu$ は次式で与えられる.

$$d(\mathbf{n}) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_1 + i \sin k_1) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_2 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_2 + i \sin k_2) \rho_0^0(\mathbf{k}) \quad (8.73)$$

で与えられる.

(8.70), (8.28), (8.29), (8.30) 命題 7.1 を考慮すると平均場ハミルトニアン H_m は D_{4h} の既約表現 A_{1g}, B_{1g}, E_u の成分のみ存在することがわかる. 表 7.4 より W_1^0, W_2^0 からは表 7.4 の (1) の場合に該当し, $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$ に属する H_m^0 が, W_3^0 からは表 7.4 の (1) の場合に該当し, $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$ に属する H_m の成分が, W_4^0, W_5^0 からは表 7.4 の (2) の場合に該当し, $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 0, 1)}$ に属する H_m の成分が導かれる. $\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 0, 1)}$ に属する H_m の成分を持つ解は $t = 0$ の場合の以外には存在しないことが示されるので²³⁾, ここでは取り上げない. この節では $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$ と $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$ の場合を考察する.

8.2.1 $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$

ここで H_m が G_0 の恒等表現 $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$ に属すると仮定する. したがって H_m の固定部分群は

$$G(\Gamma A_{1g}, 0, 0) = \mathbf{P} \times \mathbf{S} \times \mathbf{R} = G_0 \quad (8.74)$$

で与えられる. H_m が $\mathbf{L}_0, \mathbf{S}$ に対して不変であるので命題 8.6, 命題 8.7 より

$\rho_l^\lambda(\mathbf{k})$ ($l = 0, 1, \lambda = 0, 1, 2, 3$) でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k})$ だけであり

$$\rho_0^0(\mathbf{k}) = \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \quad (8.75)$$

が成り立つ. また命題 8.1(p.268) により $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は実関数である. H_m が D_{4h} に対して不変であるので, 定理 6.3 により任意の $p \in D_{4h}$ に対して

$$\rho_0^0(p \cdot \mathbf{k}) = \langle a_{(p \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{(p \cdot \mathbf{k})\uparrow} \rangle = \langle (p \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(p \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle = \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \rho_0^0(\mathbf{k}) \quad (8.76)$$

が成り立つ。したがって $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} に対して不変な関数, すなわち D_{4h} の A_{1g} 表現に属する事がわかる. $\eta(\mathbf{k}), (\sin k_1, \sin k_2)$ は D_{4h} の B_{1g}, E_u 表現に属するので, 命題 8.5 より

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_1 - \cos k_2) \rho_0^0(\mathbf{k}) = 0 \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^0(\mathbf{k}) &= 0 \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \rho_0^0(\mathbf{k}) &= 0\end{aligned}\tag{8.77}$$

が成り立つ. (8.77) の第 1 式より

$$\sum_{\mathbf{k}} \cos k_1 \rho_0^0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \cos k_2 \rho_0^0(\mathbf{k})\tag{8.78}$$

が成り立つ. SCF 条件 (8.48) と (8.77) より (8.62) の $x_0^0(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned}x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} W_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}'} W_2^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + (U + 8V - 4J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &\quad + \{-(V - 2J)\} \gamma(\mathbf{k}) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \gamma(\mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}\end{aligned}\tag{8.79}$$

ここで実数 a, b は

$$\begin{aligned}a &= -2t - (V - 2J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \bar{\mu} &= \mu - (U + 8V - 4J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k})\end{aligned}\tag{8.80}$$

で与えられる. これより平均場ハミルトニアンは

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \equiv H_m^0\tag{8.81}$$

で与えられる. H_m^0 が G_0 の恒等表現 $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 0, 0)}$ に属することは容易に確かめられる.

(8.81) の H_m の形と (8.71) より

$$\rho_0^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{1 + \exp \{ \beta (a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}) \}}\tag{8.82}$$

となり, $\bar{\mu}$ は

$$\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) = n_e \equiv \text{サイトあたりの電子数}\tag{8.83}$$

が成り立つように定められる.

Hartree-Fock 自由エネルギー F_{HF} , 電荷密度 $d(\mathbf{n})$, ボンドオーダー $p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ は命題 8.5, (8.72), (8.73), (8.78) より

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \{(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k})\} + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{\rho_0^0(\mathbf{k}) \log \rho_0^0(\mathbf{k}) + (1 - \rho_0^0(\mathbf{k})) \log(1 - \rho_0^0(\mathbf{k}))\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 = p(\mathbf{n})_2 &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \cos k_1 \rho_0^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.84}$$

で与えられる. したがって電荷密度, ボンドオーダーとも位置方向によらず一定である. この様子を図 8.1 に示す. この状態は対称性を全く破らない状態で, 通常高温側で実現していると考えられる正常状態 (normal state) である.

SCF 条件を利用して, 数値的に $a, \bar{\mu}$ を求めるには, 通常 $a, \bar{\mu}$ の初期値 $a_0, \bar{\mu}_0$ を仮定し, (8.82) より $\rho_0^0(\mathbf{k})$ を求め, (8.83) が成り立つように新しい $\bar{\mu}_1$ を定める. 新しい $\bar{\mu}_1$ と a_0 とで (8.82) より計算した $\rho_0^0(\mathbf{k})$ を (8.80) に代入して新しい a_1 を求める. この過程 $(a_0, \mu_0) \rightarrow (a_1, \mu_1) \rightarrow \dots$, を逐次的に繰り返して収束値が得られるまで繰り返す. 高温では一般に上記の正常状態にあり, その電子状態は平均場ハミルトニアン H_m^0 で記述される.

温度を下げていくと, H_m^0 で記述される状態が不安定になり対称性が破れた状態に転移して行く. 平均場ハミルトニアン H_m は H_m^0 に対称性を破った H_m^1 が加わり $H_m = H_m^0 + H_m^1$ の型になる. H_m^1 の属する空間が第 4 章で述べた $\ker L$ に対応する. $\ker L$ は G_0 の HFB ハミルトニアン空間 W_{HFB} における既約表現空間になる. Sattinger の定理より自由エネルギーの極値を与える H_m の対称性 (固定部分群) は H_m^1 の対称性 (固定部分群) で定まる. この固定部分群は H_m^1 が属する G_0 の既約表現が定まれば群論的に定まり, 模型の詳細にはよらない.

8.2.2 $\check{G}_0^{(\Gamma_{B_{1g}}, 0, 0)}$

平均場ハミルトニアン H_m が H_m^0 に $\check{G}_0^{(\Gamma_{B_{1g}}, 0, 0)}$ に属する H_m^1 を加えた

$$H_m = H_m^0 + H_m^1 \tag{8.85}$$

で与えられる状態を考える. 既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma_{B_{1g}}, 0, 0)}$ は 1 次元表現であり, その基底を h とすると $T(\mathbf{n}) \in L_0, p \in D_{2h}, p' \in C_{4z}^+ D_{2h}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, r \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{n}) \cdot h &= h \\
 p \cdot h &= h \\
 p' \cdot h &= -h \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h &= h
 \end{aligned} \tag{8.86}$$

$$r \cdot h = h$$

が成り立つ。従って既約表現 $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$ の固定部分群とその固定点部分空間は

$$\begin{aligned} G(\Gamma B_{1g}, 0, 0) &= D_{2h} L_0 \mathbf{SR} \\ \text{Fix}(G(\Gamma B_{1g}, 0, 0)) &= \{h\} \end{aligned} \quad (8.87)$$

で与えられる。 H_m は $G(\Gamma B_{1g}, 0, 0)$ に不変であり、これは $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ の場合と同様に $L_0 \mathbf{SR}$ を含むので $\rho_l^\lambda(\mathbf{k})$ でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k})$ だけである。 $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ の場合との違いは H_m が D_{4h} 不変ではなく、 D_{2h} 不変であることである。従って $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g に属する。表 8.1 に見られ

D_{2h}	E	C_{2z}	C_{2y}	C_{2x}	I	IC_{2z}	IC_{2y}	IC_{2x}	基底
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	$\cos k_1 + \cos k_2, \cos k_1 - \cos k_2$
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$\sin k_1 \sin k_2$
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	+1	-1	$\sin k_1 \sin k_3$
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$\sin k_2 \sin k_3$
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$\sin k_1 \sin k_2 \sin k_3$
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$\sin k_3$
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$\sin k_2$
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	$\sin k_1$

表 8.1: D_{2h} の既約表現の指標

るように様に $\eta(\mathbf{k}), \sin k_1, \sin k_2$ は D_{2h} の A_g, B_{3u}, B_{2u} に属するので命題 8.5 より

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^0(\mathbf{k}) &= 0 \\ \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \rho_0^0(\mathbf{k}) &= 0 \end{aligned} \quad (8.88)$$

が成り立つ。また $\eta(\mathbf{k})$ と $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は同じ A_g に属するので、一般的には

$$\sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \neq 0 \quad (8.89)$$

である。

(8.48) より $x_0^0(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0 \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) + b\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (8.90)$$

で与えられる。ここで

$$\begin{aligned} a &= -2t - (V - 2J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= -(V - 2J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.91)$$

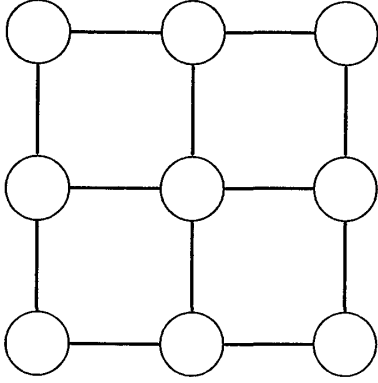


図 8.1: $G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ 状態の電荷密度とボンドオーダー

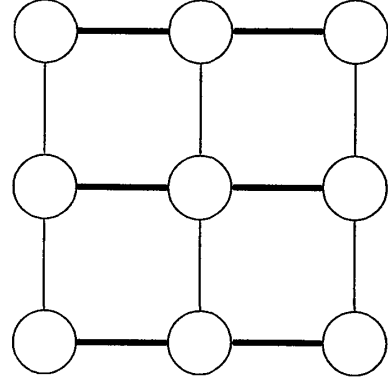


図 8.2: $G(\Gamma B_{1g}, 0, 0)$ 状態の電荷密度とボンドオーダー

$$\tilde{\mu} = \mu - (U + 8V - 4J) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k})$$

このようにして平均場ハミルトニアン H_m を得る.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}s} b\eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (8.92)$$

H_m^1 が既約表現 $\tilde{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$ に属することは容易に確かめられる. これに対応する状態を $G(\Gamma B_{1g}, 0, 0)$ 状態と呼ぼう.

(8.72), (8.73) より F_{HF} , $d(\mathbf{n})$, $p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ は次式で与えられる.

$$\begin{aligned} F_{HF} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \{ (-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \} \\ &\quad + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{ \rho_0^0(\mathbf{k}) \log \rho_0^0(\mathbf{k}) + (1 - \rho_0^0(\mathbf{k})) \log(1 - \rho_0^0(\mathbf{k})) \} \\ d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_1 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{ \gamma(\mathbf{k}) + \eta(\mathbf{k}) \} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{ \gamma(\mathbf{k}) - \eta(\mathbf{k}) \} \rho_0^0(\mathbf{k}) \neq p(\mathbf{n})_1 \end{aligned} \quad (8.93)$$

図 8.2 (p.282) にこの状態の電荷密度, ボンドオーダーのパターンを示す. このパターンが元の回転対称性 $D_{4h} = D_{2h} + C_{4z}^+ D_{2h}$ のうち $D_{2h} = \{E, C_{2z}, C_{2x}, C_{2y}\} \times C_I$ の対称性を保存し,

$$\begin{aligned} C_{4z}^+ D_{2h} &= \{C_{4z}^+, C_{4z}^+ C_{2z}, C_{4z}^+ C_{2y}, C_{4z}^+ I, C_{4z}^+ C_{2z} I, C_{4z}^+ C_{2y} I\} \\ &= \{C_{4z}^+, C_{4z}^-, C_{2a}, C_{2b}, C_{4z}^+ I, C_{4z}^- I, C_{2a} I, C_{2b} I\} \end{aligned} \quad (8.94)$$

の対称性を破っていることに注意されたい。この状態をボンドオーダーの対称性が破れたという意味でボンドオーダー波:BOW (bond order wave) と呼ぶ。この状態は並進, スピン回転, グローバルゲージ変換, 時間反転の対称性は保存され, 対称性の破れは空間回転 D_{4h} のみが破られ D_{2h} となり, 図式的に

$$D_{4h}L_0SR \xrightarrow{\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}} D_{2h}L_0SR$$

と書くことが出来る。

8.3 M点非磁性状態

この節ではオーダーリングベクトル $\mathbf{k}$ が M 点すなわち $\mathbf{k} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ の場合の非磁性状態を考察する。^{19, 23)} この場合の平均場ハミルトニアンは正常状態のハミルトニアン H_m^0 に $\check{G}_0^{(Mj, 0, \nu)}$ ($\nu = 1, 0$) に属する H_m^1 が加わる。平均場ハミルトニアンは表 7.4 の (7), (8) の場合に該当して

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}s} x_1^0(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (8.95)$$

で与えられる。 H_m は $\mathbf{S}$ に対して不変であるので命題 8.7 より, $\rho_0^\lambda(\mathbf{k}), \rho_1^\lambda(\mathbf{k})$ でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の場合だけである。SCF 条件 (8.48) をこの場合に適応すると

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ x_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \end{aligned} \quad (8.96)$$

ここで次の等式を証明しておく。

$$x_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -x_0^0(\mathbf{k}) - 2\bar{\mu} \quad (8.97)$$

(8.97) の証明。

(8.96), (8.29), (8.30) より

$$x_0^0(\mathbf{k}) = -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} W_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=2}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \quad (8.98)$$

$$x_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = 2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} W_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=2}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \quad (8.99)$$

(8.98)+(8.99) より

$$x_0^0(\mathbf{k}) + x_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -2\mu + 2 \sum_{\mathbf{k}'} W_1^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') = -2\bar{\mu} \quad (8.100)$$

を得る。 ■

(8.95) の平均場ハミルトニアン H_m は次の様に書ける.

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s (a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger) \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & \{x_1^0(\mathbf{k})\}^* \\ x_1^0(\mathbf{k}) & x_0^0(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}s} \\ a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s} \end{pmatrix} \quad (8.101)$$

ここで $\sum_{\mathbf{k}}'$ は第1ブリルアン・ゾーンの半分

$$BZ_1 = \{\mathbf{k} \mid |k_x + k_y| \leq \pi\} \quad (8.102)$$

での和を意味する. (8.97) を使うと H_m は次のように 2×2 のユニタリ行列 $U(\mathbf{k})$ によって対角化される.

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s A_{\mathbf{k}s}^\dagger X(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}s} \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s A_{\mathbf{k}s}^\dagger U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) X(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}s} \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}s} \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s \{E_1(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}s} + E_2(\mathbf{k}) \beta_{\mathbf{k}s}^\dagger \beta_{\mathbf{k}s}\} \end{aligned} \quad (8.103)$$

ここで

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}s}^\dagger &= (a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger) \\ X(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & \{x_1^0(\mathbf{k})\}^* \\ x_1^0(\mathbf{k}) & x_0^0(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \end{pmatrix} \\ E(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} -E_0(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} & 0 \\ 0 & E_0(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\ E_0(\mathbf{k}) &= \sqrt{(x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu})^2 + |x_1^0(\mathbf{k})|^2} \\ U(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\ \alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger &= (\alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger, \beta_{\mathbf{k}s}^\dagger) = A_{\mathbf{k}s}^\dagger U(\mathbf{k}) = (a_{\mathbf{k}s}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\ u_{\mathbf{k}} &= \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ v_{\mathbf{k}} &= -e^{i\alpha} \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (8.104)$$

ここで $e^{i\alpha}$ は $x_1^0(\mathbf{k}) = e^{i\alpha} |x_1^0(\mathbf{k})|$ の位相因子であり, $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ は次式を満足する.

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 &= 1 \\ u_{\mathbf{k}}^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 &= -\frac{x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}}{E_0(\mathbf{k})} \\ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} &= -\frac{x_1^0(\mathbf{k})}{2E_0(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (8.105)$$

(8.103) より

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_s} \rangle &= \{1 + e^{\beta(-E_0(\mathbf{k}) - \bar{\mu})}\}^{-1} \equiv f_1(\mathbf{k}) \\
 \langle \beta_{\mathbf{k}_s}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_s} \rangle &= \{1 + e^{\beta(E_0(\mathbf{k}) - \bar{\mu})}\}^{-1} \equiv f_2(\mathbf{k}) \\
 \langle \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger \beta_{\mathbf{k}_s} \rangle &= 0 \\
 \langle \beta_{\mathbf{k}_s}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_s} \rangle &= 0
 \end{aligned} \tag{8.106}$$

を得る. (8.104) より

$$(a_{\mathbf{k}_s}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger) = A_{\mathbf{k}_s}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger U^\dagger(\mathbf{k}) = (\alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger, \beta_{\mathbf{k}_s}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{8.107}$$

これより

$$\begin{aligned}
 a_{\mathbf{k}_s}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}_s}^\dagger \\
 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger &= v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger + u_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}_s}^\dagger
 \end{aligned} \tag{8.108}$$

を得る. (8.106) と (8.108) より

$$\begin{aligned}
 \rho_0^0(\mathbf{k}) &\equiv \langle a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 f_1(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 f_2(\mathbf{k}) \\
 \rho_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &\equiv \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s} \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2 f_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 f_2(\mathbf{k}) \\
 \rho_1^0(\mathbf{k}) &\equiv \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\
 \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &\equiv \langle a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s} \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k}))
 \end{aligned} \tag{8.109}$$

を得る.

(8.52), (8.56) より系の自由エネルギー F_{HF} , 電荷密度 $d(\mathbf{n})$, ボンドオーダー $p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ の次の表式を得る.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu \right\} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
 &\quad + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) \right. \\
 &\quad \left. + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k})) \right\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \frac{2}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_\mu &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_\mu} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \frac{2}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_\mu} \rho_1^0(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.110}$$

ここで $\mu = 1, 2$ である.

表 7.4 を考慮すると, (8.32) より W_1^Q からは定数の $x_1^0(\mathbf{k})$ が得られ, これは偶関数で Q 偶であるので, 表 7.4 の (7) の場合に該当し, $\tilde{G}_0^{(MA_{1g}, 0, 0)}$ が得られる.

W_2^Q からは $x_1^0(\mathbf{k})$ が $c\gamma(\mathbf{k})$ (c は定数) となり, これは偶関数で Q 奇であるので表 7.4 の (8) の場合に該当し, $\check{G}_0^{(MA_{1g},0,1)}$ が得られる.

W_3^Q からは $x_1^0(\mathbf{k})$ として $c\eta(\mathbf{k})$ (c は定数) が得られ, これは偶関数で Q 奇であるので, 表 7.4 の (8) の場合に該当し, $\check{G}_0^{(MB_{1g},0,1)}$ が得られる.

W_4^Q および W_5^Q からは $x_1^0(\mathbf{k})$ として $c_1 \sin k_x, c_2 \sin k_y$ が得られ, これは奇関数で Q 奇であるので, 表 7.4 の (7) の場合に該当し, $\check{G}_0^{(ME_u,0,0)}$ が出現する.

$\check{G}_0^{(MA_{1g},0,1)}$ より導かれる状態は $t = 0$ でなければ HF 方程式の解が存在しないことが示される.²³⁾ したがってここではこれを議論しないことにする. 以下 $\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}, \check{G}_0^{(MB_{1g},0,1)}, \check{G}_0^{(ME_u,0,0)}$ の場合について考察する.

8.3.1 $\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}$

平均場ハミルトニアン H_m として H_m^0 に $\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}$ に属する H_m^1 が加わった

$$H_m = H_m^0 + H_m^1 \quad (8.111)$$

で与えられる状態を考える.

既約表現 $\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}$ は 1 次元表現であり, その基底を h とすると $p \in D_{4h}$, $T(\mathbf{n}) \in L_1 = L(e_1 + e_2, e_1 - e_2), T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, r \in \mathbf{R}$ にたいして

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot h &= h \\ T(\mathbf{m}) \cdot h &= -h \\ p \cdot h &= h \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h &= h \\ r \cdot h &= h \end{aligned} \quad (8.112)$$

が成り立つ. すなわち奇数個の単位並進 $T(e_1)L_1$ の作用に対してのみ h は符号を変える. 従って既約表現 $\check{G}_0^{(MA_{1g},0,0)}$ の固定部分群とその固定点部分空間は

$$\begin{aligned} G(MA_{1g}, 0, 0) &= D_{4h}L_1SR \\ \text{Fix}(G(MA_{1g}, 0, 0)) &= \{h\} \end{aligned} \quad (8.113)$$

となる.

H_m は $G(MA_{1g}, 0, 0)$ に不変であり, S に不変であるので $\rho_0^\lambda(\mathbf{k}), \rho_1^\lambda(\mathbf{k})$ でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ だけである. 命題 8.7 より

$$\begin{aligned} \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\ \rho_1^0(\mathbf{k}) &= \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (8.114)$$

ここで $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を考察しよう. H_m が D_{4h} に対して不変であるから (8.76) と同様にして $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} 不変な関数である. また命題 8.1 より

$$\rho_1^0(\mathbf{k}) = \{\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q})\}^* \quad (8.115)$$

が成り立つ. H_m の時間反転対称性と定理 6.3 より

$$\begin{aligned}
 \rho_1^0(\mathbf{k}) &= \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
 &= \langle (t \cdot a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle^* \\
 &= \langle (-a_{(-\mathbf{k}-\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger)(-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \rangle^* \\
 &= \langle a_{(-\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle^* \\
 &= \rho_1^0(-\mathbf{k})^*
 \end{aligned} \tag{8.116}$$

が得られ, H_m の空間反転対称性から

$$\rho_1^0(\mathbf{k}) = \rho_1^0(-\mathbf{k}) \tag{8.117}$$

が得られる. (8.115), (8.116), (8.117) および H_m の D_{4h} 対称性から $\rho_1^0(\mathbf{k})$ は

$$\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = \rho_1^0(\mathbf{k}) \tag{8.118}$$

を満たす D_{4h} 対称性を持つ実関数であることが分かる. (8.118) より

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &= \sum_{\mathbf{k}}' \{ \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \rho_1^0(\mathbf{k}) \} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}}' \{ \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k}) - \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k}) \} = 0
 \end{aligned} \tag{8.119}$$

ここで $\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\gamma(\mathbf{k})$ を使った. 以上の $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を使うと SCF 条件 (8.96) より

$$\begin{aligned}
 x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}
 \end{aligned} \tag{8.120}$$

$$\begin{aligned}
 x_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} W_1^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
 &= b
 \end{aligned} \tag{8.121}$$

を得る. ここで実数 a, b は次の SCF 条件で定まる.

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 b &= -\{(8V - U - 4J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q})
 \end{aligned} \tag{8.122}$$

したがって平均場ハミルトニアンは次式の様になる.

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\
 H_m^1 &= b \sum_{\mathbf{k}_s} a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s}
 \end{aligned} \tag{8.123}$$

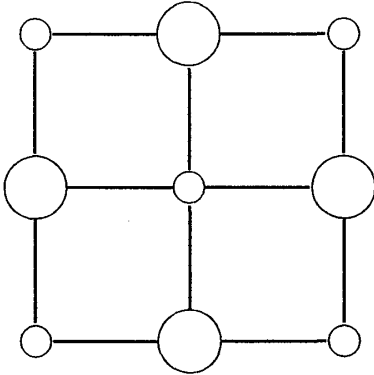
(8.119) および $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を使うと (8.110) より

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} = & 2 \sum_{\mathbf{k}} \{-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu\} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 & + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} W_1^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k}') \\
 & + \frac{2}{\beta} \sum'_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) \\
 & + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log (1 - f_1(\mathbf{k})) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log (1 - f_2(\mathbf{k}))\}
 \end{aligned} \tag{8.124}$$

$$\begin{aligned}
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \frac{(2e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}})}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.125}$$

を得る. ここで $\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = \rho_1^0(\mathbf{k})$ より成り立つ

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_\mu} \rho_1^0(\mathbf{k}) &= \sum'_{\mathbf{k}} \{e^{ik_\mu} \rho_1^0(\mathbf{k}) + e^{i(k_\mu + \pi)} \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q})\} \\
 &= \sum'_{\mathbf{k}} e^{ik_\mu} \{\rho_1^0(\mathbf{k}) - \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q})\} = 0
 \end{aligned} \tag{8.126}$$



を使った. このようにボンドオーダー $p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ は実数で一樣かつ等方的である. 一方電荷密度 $d(\mathbf{n})$ は大きさが交替するパターンになる. この様子を図 8.3 に示す. 電荷密度のパターンが $G(MA_{1g}, 0, 0)$ に不変であることに注意されたい. この状態を電荷密度波: CDW (charge density wave) と呼ぶ. 図式的に書くと並進対称性 $L_0 = L(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ のみが破られ, より低い並進対称性 $L_1 = L(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2)$ を持つ状態になる. 図式的に

$$D_{4h}L_0SR \xrightarrow{\check{G}_0^{(MA_{1g}, 0, 0)}} D_{4h}L_1SR$$

図 8.3: $G(MA_{1g}, 0, 0)$ 状態の電荷密度とボンドオーダー. $\bigcirc$ の大小は電荷密度の大小を示す.

8.3.2 $\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 1)}$

平均場ハミルトニアン H_m に $\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 0)}$ に属する H_m^1 が加わった

$$H_m = H_m^0 + H_m^1 \tag{8.127}$$

で与えられる状態を考える。既約表現 $\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 1)}$ は 1 次元表現であり、その基底を h とすると $p \in D_{2h}, p' \in C_{4z}^+ D_{2h}, T(\mathbf{n}) \in L_1, T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, \tilde{\phi} \in \Phi, t \in \mathbf{R}$ にたいして

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot h &= h \\ T(\mathbf{m}) \cdot h &= -h \\ p \cdot h &= h \\ p' \cdot h &= -h \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h &= h \\ \tilde{\phi} \cdot h &= h \\ t \cdot h &= -h \end{aligned} \tag{8.128}$$

が成り立つ。 h は $T(e_1), C_{4z}^+, t$ に対して符号をかえるが、そのうちの二つを結合した $C_{4z}^+ T(e_1), tT(e_1)$ の作用に対して不変である。従って既約表現 $\check{G}_0^{(MB_{1g}, 0, 0)}$ の固定部分群とその固定点部分空間は

$$\begin{aligned} G(MB_{1g}, 0, 0) &= \{E + tT(e_1)\} \{E + C_{4z}^+ T(e_1)\} D_{2h} L_1 S \Phi \\ \text{Fix}(G(MB_{1g}, 0, 0)) &= \{h\} \end{aligned} \tag{8.129}$$

となる。 H_m は $G(MB_{1g}, 0, 1)$ に対して不変である。 H_m の S 不変性より、(8.114) が成り立つ。 H_m の固定部分群 $G(MB_{1g}, 0, 1)$ の構造より、定理 6.3 を使って $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を定めよう。 H_m の $C_{4z}^+ T(e_1)$ 不変性より

$$\begin{aligned} \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle (C_{4z}^+ T(e_1) \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) (C_{4z}^+ T(e_1) \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle \\ &= \langle (e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_1} a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger) (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_1} a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}) \rangle \\ &= \langle a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow} \rangle = \rho_0^0(C_{4z}^+ \mathbf{k}) \end{aligned} \tag{8.130}$$

を得る。これと $\rho_0^0(\mathbf{k})$ の D_{2h} 不変性を考慮すると $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} 不変な関数であることが分かる。

また H_m の $tT(e_1)$ 不変性より

$$\begin{aligned} \rho_1^0(\mathbf{k}) &= \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle (tT(e_1) \cdot a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger) (tT(e_1) \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle^* \\ &= \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_1} (-a_{(-\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger) (-a_{-\mathbf{k}\downarrow}) \rangle^* \\ &= -\langle a_{(-\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle^* \\ &= -\rho_1^0(-\mathbf{k})^* \end{aligned} \tag{8.131}$$

を得る。 $I \in D_{2h}$ 不変性より $\rho_1^0(-\mathbf{k}) = \rho_1^0(\mathbf{k})$ が成り立つので $\rho_1^0(\mathbf{k})$ は純虚数関数となる。同様に $\rho_1^0(\mathbf{k})$ の $C_{4z}^+ T(e_1)$ 不変性より

$$\rho_1^0(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) = -\rho_1^0(\mathbf{k}) \tag{8.132}$$

が成り立つ. $\rho_1^0(\mathbf{k})$ の D_{2h} 不変性と (8.132) より $\rho_1^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} に関して B_{1g} 対称性を持つ関数であることが分かる. また (8.115) がこの場合にも成り立ち,

$$\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\rho_1^0(\mathbf{k}) \quad (8.133)$$

が成立する. したがって $\rho_1^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の B_{1g} 対称性を持ち (8.133) を満たす純虚数関数となる. 以後 $\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$ と置く. ここで $\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$ は実関数である.

以上の $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を利用すると SCF 条件 (8.96) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\ x_1^0(\mathbf{k}) &= ib\eta(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.134)$$

を得る. ここで実数 a, b は

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ ib &= -\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{aligned} \quad (8.135)$$

で与えられる. したがって平均場ハミルトニアンは次式で与えられる.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}s} \eta(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (8.136)$$

$\rho_0^0(\mathbf{k})$ と $\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$ の対称性を使って (8.110) より $F_{\text{HF}}, d(\mathbf{n}), p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ は次の様に求められる.

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \{-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu\} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} W_3^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{1r}^0(\mathbf{k}) \rho_{1r}^0(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (8.137)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}}' \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) \\ &\quad + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \end{aligned}$$

$$d(\mathbf{n}) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k})$$

$$p(\mathbf{n})_1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) + i \left(\frac{e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}}{L} \right) \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_{1r}^0(\mathbf{k}) \quad (8.138)$$

$$p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) - i \left(\frac{e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}}{L} \right) \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_{1r}^0(\mathbf{k})$$

ここで $\rho_1^0(\mathbf{k})$ が B_{1g} 対称性を持つことから導かれる等式

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_1} \rho_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_1 + i \sin k_1) \rho_1^0(\mathbf{k}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \cos k_1 \rho_1^0(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \cos(C_{2a} \cdot \mathbf{k})_1 \rho_1^0(C_{2a} \cdot \mathbf{k}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \cos k_2 (-\rho_1^0(\mathbf{k})) = - \sum_{\mathbf{k}} \cos k_2 \rho_1^0(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_1^0(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.139}$$

および, $\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\rho_1^0(\mathbf{k})$ を使った.

(8.138) よりボンドオーダーが複素数なので系は電流密度を持つ可能性がある. (8.136), 命題 D.1, 命題 D.2 より H_m は次の様に書ける.

$$\begin{aligned}
 H_m = \sum_{\mathbf{n}_s} \{ & -\bar{\mu} a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}} + \frac{1}{2} (a + i b e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}) a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{(\mathbf{n} + \mathbf{e}_1)_s} + \frac{1}{2} (a + i b e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}) a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{(\mathbf{n} - \mathbf{e}_1)_s} \\
 & + \frac{1}{2} (a - i b e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}) a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{(\mathbf{n} + \mathbf{e}_2)_s} + \frac{1}{2} (a - i b e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}) a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{(\mathbf{n} - \mathbf{e}_2)_s} \}
 \end{aligned} \tag{8.140}$$

これより (D.7) の $h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0$ は

$$h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0 = \frac{1}{2} (a + i b e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}) \tag{8.141}$$

となる. (8.138) と (8.141) および (D.7) から

$$J_{\mathbf{n}\bar{\mathbf{n}}}^0 = \frac{e}{\hbar} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (a \eta(\mathbf{k}) \rho_{1r}(\mathbf{k}) + b \gamma(\mathbf{k}) \rho_0(\mathbf{k})) \tag{8.142}$$

を得る. 電流密度のパターンを図 8.4 に示す. この種の状態を電流密度波: CCW (charge current wave) と呼ぶ. 時間反転 t (矢印の向きを変える), 単位並進 $T(\mathbf{e}_1), T(\mathbf{e}_2)$, 4 分の 1 回転 $C_{4z}^\pm$ の対称性は破れているが, それらの 2 個の積: $tT(\mathbf{e}_1), tC_{4z}^\pm, T(\mathbf{e}_1)C_{4z}^\pm$ 等の対称性は保存していることに注意されたい. この状態は flux phase²⁴⁾ または d-density wave²⁵⁾ とも呼ばれている.

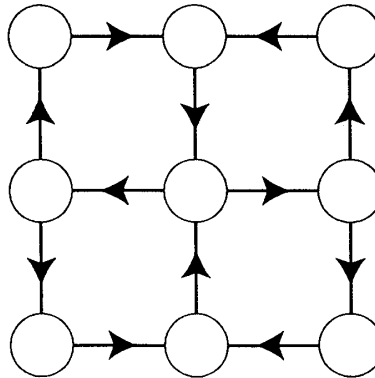


図 8.4: $G(MB_{1g}, 0, 0)$ 状態の電流密度. 矢印は電流を示す.

8.3.3 $\check{G}_0^{(ME_u, 0, 0)}$

平均場はハミルトニアン H_m が H_m^0 に $\check{G}_0^{(ME_u, 0, 0)}$ に属する H_m^1 を加えた

$$H_m = H_m^0 + H_m^1 \quad (8.143)$$

で与えられる状態を考察する. 既約表現 $\check{G}_0^{(ME_u, 0, 0)}$ は 2 次元表現であり, その基底を (h_1, h_2) とすると, $p \in D_{4h}, T(\mathbf{n}) \in L_1, T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, r \in \mathbf{R}$ にたいして

$$\begin{aligned} T(\mathbf{n}) \cdot h_i &= h_i \\ T(\mathbf{m}) \cdot h_i &= -h_i \\ p \cdot h_i &= \sum_{i'=1}^2 D_{i'i}(p) h_{i'} \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= h_i \\ r \cdot h_i &= h_i \end{aligned} \quad (8.144)$$

が成り立つ. ここで $i = 1, 2$ であり, $D_{i'i}(p)$ は D_{4h} の E_u 表現の表現行列 (付録 B p.340 参照) の $(i'i)$ 成分である. (h_1, h_2) を D_4 のなかで考えれば, (h_1, h_2) は D_4 の E 表現に属する. 例 4.4 (その 1 p.565) より D_4 の中では物理的に同値でない固定部分群とその 1 次元固定点部分空間は次のものである.

$$C_{2x}, \quad \text{Fix}(C_{2x}) = \{h_1\}_R \quad (8.145)$$

$$C_{2a}, \quad \text{Fix}(C_{2a}) = \{(h_1 + h_2)\}_R \quad (8.146)$$

G_0 全体で考察すると $\check{G}_0^{(ME_u, 0, 0)}$ の基底である (h_1, h_2) は $L_1, S, \mathbf{R}$ に対して不変であり, $I, C_{2z} \in D_{4h}, T(e_1) \in L_0$ に対して符号を変える. したがって表現空間 $\{h_1, h_2\}_R$ における固定部分群は必ず

$$(E + IC_{2z})\{E + T(e_1)C_{2z}\}L_1S\mathbf{R}$$

を含む. これと (8.145) と (8.146) を考慮すると $\check{G}_0^{(ME_u, 0, 0)}$ での固定部分群とその 1 次元固定点部分空間は次の様になる.

$$\begin{aligned} G(ME_u, 0, 0)_1 &= \{E + T(e_1)C_{2z}\}C_{2vx}L_1S\mathbf{R} \\ \text{Fix}(G(ME_u, 0, 0)_1) &= \{h_1\}_R \end{aligned} \quad (8.147)$$

$$\begin{aligned} G(ME_u, 0, 0)_2 &= \{E + T(e_1)C_{2z}\}C_{2va}L_1S\mathbf{R} \\ \text{Fix}(G(ME_u, 0, 0)_2) &= \{(h_1 + h_2)\}_R \end{aligned} \quad (8.148)$$

ここで

$$\begin{aligned} C_{2vx} &= (E + IC_{2z})C_{2x} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\} \\ C_{2va} &= (E + IC_{2z})C_{2a} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\} \end{aligned} \quad (8.149)$$

である. 以下 $G(ME_u, 0, 0)_1, G(ME_u, 0, 0)_2$ を固定部分群とする平均場ハミルトニアンについて考察する.

(1) $G(ME_u, 0, 0)_1$

平均場ハミルトニアン H_m は

$$G(H_m) = G(ME_u, 0, 0)_1 = \{E + T(e_1)C_{2z}\}C_{2vx}L_1SR \quad (8.150)$$

に対して不変である。 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を考察しよう。 $G(MB_{1g}, 0, 0)$ の場合と同様な考察により、命題 8.1 と H_m の $T(e_1)C_{2z}, C_{2vx}$ 不変性から $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g に属し、 $\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$ は

$$\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^0(\mathbf{k}) = -\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -i\rho_{1I}^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \quad (8.151)$$

を満たす D_{2h} の B_{3u} に属する純虚数値関数であることがわかる（ D_{2h} の既約表現は表 8.1 p.281 参照）。ここで $\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$ は実数値関数である。 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を使うと (8.48) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (8.152)$$

$$\begin{aligned} x_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} W_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k}') \\ &= ib \sin k_1 \end{aligned} \quad (8.153)$$

が得られる。ここで実数 a, b, c は次の SCF 条件で定まる。

$$\begin{aligned} a &= -t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ c &= -\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ ib &= -2\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{aligned} \quad (8.154)$$

従って平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\ H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}_s} \sin k_1 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\ H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}_s} \eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \end{aligned} \quad (8.155)$$

で与えられる。 H_m^2 は $\tilde{G}_0^{(ME_u, 0, 0)}$ に属する主要成分 H_m^1 が導入される事によって誘導される副次的な成分で、 $\tilde{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 0, 0)}$ に属する。 D_{4h} の多次元表現の場合はこのような副次的な成分が生じる事がある。 H_m^2 が $G(H_m) = G(ME_u, 0, 0)_1$ に不変であることに注意されたい。 $\rho_0^0(\mathbf{k})$ と $\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$

の対称性を使って (8.110) より F_{HF} , $d(\mathbf{n})$, $p(\mathbf{n})_1$, $p(\mathbf{n})_2$ は次の様に求められる.

$$\begin{aligned}
 F_{HF} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \{-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu\} \rho_0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &\quad - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} W_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{1I}^0(\mathbf{k}) \rho_{1I}^0(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}}' \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) \\
 &\quad + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \quad (8.156) \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma(\mathbf{k}) + \eta(\mathbf{k})) \rho_0^0(\mathbf{k}) - 2 \left(\frac{e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}}{N} \right) \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_{1I}^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\gamma(\mathbf{k}) - \eta(\mathbf{k})) \rho_0^0(\mathbf{k})
 \end{aligned}$$

(8.156) より $d(\mathbf{n})$ と $p(\mathbf{n})_2$ は実数でサイトによらず一様である. $p(\mathbf{n})_1$ は図 8.5 に示すように交互に交替するパターンを持つ BOW である. このタイプの対称性を持つ $t - J$ 模型の解は Affleck と Marston²⁴⁾ によって求められており, "Peiers phase" と呼ばれている. このパターンが C_{2x} , IC_{2z} , $T(e_1)C_{2z}$ 等に不変であることは容易に確かめられる.

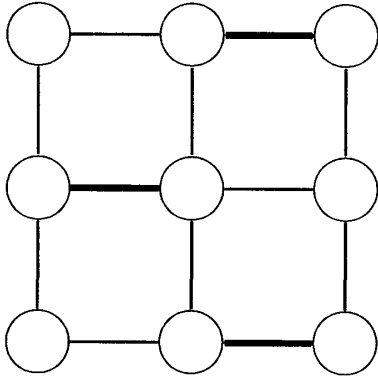


図 8.5: $G(MEu, 0, 0)_1$ 状態の電荷密度とボンドオーダー.

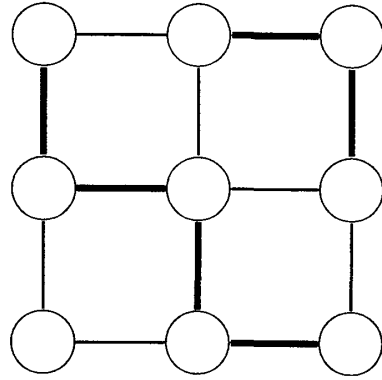


図 8.6: $G(ME, 0, 0)_2$ 状態の電荷密度とボンドオーダー.

(2) $G(MEu, 0, 0)_2$

平均場ハミルトニアン H_m は

$$G(H_m) = G(MEu, 0, 0)_2 = \{E + T(e_1)C_{2z}\} C_{2va} L_1 \mathbf{SR} \quad (8.157)$$

に対して不変である. $G(MB_{1g}, 0, 0)$ の場合と同様な方法で $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は $D_{2ah} = \{E, C_{2z}, C_{2a}, C_{2b}\} \times C_I$ の A_g に属し, $\rho_1^0(\mathbf{k})$ は

$$\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^0(\mathbf{k}) = -\rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -i\rho_{1I}^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \quad (8.158)$$

D_{2ah}	E	C_{2z}	C_{2b}	C_{2a}	I	IC_{2z}	IC_{2b}	IC_{2a}	基底
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	$\cos k_1 + \cos k_2, \sin k_1 \sin k_2$
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	$\cos k_1 - \cos k_2$
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	$(\sin k_1 - \sin k_2) \sin k_3$
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	$(\sin k_1 - \sin k_2) \sin k_3$
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$(\sin k_1 + \sin k_2)(\sin k_1 - \sin k_2) \sin k_3$
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	$\sin k_3$
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	$(\sin k_1 - \sin k_2)$
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	$(\sin k_1 + \sin k_2)$

 表 8.2: D_{2ah} の既約表現の指標と基底

を満たす D_{2ah} の B_{3u} に属する純虚数値関数であることが分かる。また $\rho_{1I}^0(\mathbf{k})$ は実数値関数である。ここで D_{2ah} の既約表現の指標と基底は表 8.2 に記載されているものである。一方

$$\begin{aligned}
 W_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_5^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= 2\{(V - 2J)/N\} \{ \sin k_1 \sin k'_1 + \sin k_2 \sin k'_2 \} \\
 &= -\{(V - 2J)/N\} \{ (\sin k_1 + \sin k_2)(\sin k'_1 + \sin k'_2) \\
 &\quad + (\sin k_1 - \sin k_2)(\sin k'_1 - \sin k'_2) \}
 \end{aligned} \tag{8.159}$$

と $\eta(\mathbf{k}), (\sin k_1 + \sin k_2), (\sin k_1 - \sin k_2)$ が D_{2ah} の B_{1g}, B_{3u}, B_{2u} に属することを考慮して, $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^0(\mathbf{k})$ の対称性を使うと, (8.48) より

$$\begin{aligned}
 x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &= a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}
 \end{aligned} \tag{8.160}$$

$$\begin{aligned}
 x_1^0(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \\
 &= ib(\sin k_1 + \sin k_2)
 \end{aligned} \tag{8.161}$$

が得られる。ここで実数 a , は次の SCF 条件

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 ib &= -\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \{ \sin k_x + \sin k_2 \} \rho_1^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q})
 \end{aligned} \tag{8.162}$$

で定まる。これより平均場ハミルトニアン H_m は

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\
 H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}_s} (\sin k_1 + \sin k_2) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s}
 \end{aligned} \tag{8.163}$$

で与えられる.

$\rho_0^0(\mathbf{k})$ と $\rho_1^0(\mathbf{k}) = i\rho_{1r}^0(\mathbf{k})$ の対称性を使って (8.110) より次の $F_{\text{HF}}, d(\mathbf{n}), p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ を得る.

$$\begin{aligned}
F_{\text{HF}} &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \{-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu\} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
&\quad - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 W_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_{1r}^0(\mathbf{k}) \rho_{1r}^0(\mathbf{k}') \\
&\quad + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}}' \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) \\
&\quad + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\
d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
p(\mathbf{n})_1 = p(\mathbf{n})_2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) - \left(\frac{2e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}}}{L}\right) \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_{1r}^0(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{8.164}$$

(8.164) より $d(\mathbf{n})$ はサイトによらず一様で $p(\mathbf{n})_1, p(\mathbf{n})_2$ は図 8.6 (p.294) のような交替するパターンを持つ BOW である. このタイプの対称性を持つ $t-J$ 模型の解は Affleck と Marston²⁴⁾ によって求められており, "Kite phase" と呼ばれた.

8.4 Γ 点磁性状態

この節ではオーダリングベクトルが Γ 点: $\mathbf{k} = (0, 0)$ のスピン回転対称性を破った既約表現 $\bar{G}_0^{(\Gamma j, 1, \nu)} (\nu = 0, 1)$ より導出される磁性状態を考察する. この場合平均場ハミルトニアンは次の型になる.

$$\begin{aligned}
H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\
H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}_{s'}} \\
H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\lambda=1}^3 x_0^\lambda(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_{s'}}
\end{aligned} \tag{8.165}$$

$x_0^0(\mathbf{k}), x_0^\lambda(\mathbf{k}), (\lambda \neq 0)$ は SCF 条件 (8.48) より

$$\begin{aligned}
x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
x_0^\lambda(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^\lambda(\mathbf{k}' + \mathbf{Q})
\end{aligned} \tag{8.166}$$

で与えられる. (8.10) より $x_0^\lambda(\mathbf{k}), \lambda = 0, 1, 2, 3$ は実関数である.

H_m は L_0 に不変であるので命題 8.6 より $\rho_1^\lambda(\mathbf{k}) = 0, (\lambda = 0, 1, 2, 3)$ となる. 従って (8.52), (8.56) より自由エネルギー F_{HF} , 電荷密度 $d(\mathbf{n})$, ボンドオーダー $p(\mathbf{n})_\mu$, スピン密度 $s^\lambda(\mathbf{n})$, スピンボンド

オーダー $t^\lambda(\mathbf{n})_\mu$ は次式で与えられる.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{l=1}^5 W_l^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^0(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{l=1}^5 Y_l^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^\lambda(\mathbf{k})\rho_0^\lambda(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_j \{f_j \log f_j + (1-f_j) \log(1-f_j)\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_\mu &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp(ik_\mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^\lambda(\mathbf{n}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^\lambda(\mathbf{k}), \quad \lambda \neq 0 \\
 t^\lambda(\mathbf{n})_\mu &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp(ik_\mu)\rho_0^\lambda(\mathbf{k}), \quad \lambda \neq 0
 \end{aligned} \tag{8.167}$$

既約表現 $G_0^{(\Gamma_{j,1,\mu})}$ ($\mu = 0, 1$) に属する H_m^1 は (8.166), (8.34), (8.35) より D_{4h} に関して A_{1g}, B_{1g}, E_u の対称性を持つものに分かれる事がわかる. Y_1^0, Y_2^0 および Y_3^0 より導かれる H_m^1 は表 7.4 の (4) の場合に対応し, $G_0^{(\Gamma_{A_{1g},1,1})}, G_0^{(\Gamma_{B_{1g},1,1})}$ に属することが分かる. Y_4^0, Y_4^0 より導かれる H_m^1 は表 7.4 の (3) の場合に対応し, $G_0^{(\Gamma_{E_u,1,0})}$ に対応することが分かる. 以後各場合について考察する.

8.4.1 $\tilde{G}_0^{(\Gamma_{A_{1g},1,1})}$

既約表現 $G_0^{(\Gamma_{A_{1g},1,1})}$ は 3 次元表現であり, その表現空間の基底を h_1, h_2, h_3 とする. そのとき $p \in L_0 D_{4h}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, \tilde{\phi} \in \Phi, t \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
 p \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2, 3 \\
 \tilde{\phi} \cdot h_i &= h_i, \quad i = 1, 2, 3 \\
 t \cdot h_i &= -h_i, \quad i = 1, 2, 3 \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= \sum_j R_{ji}(\mathbf{n}, \theta) h_j
 \end{aligned} \tag{8.168}$$

ここで $R(\mathbf{n}, \theta)$ は (7.100) で定義される 3 次元回転行列である.

$\tilde{G}_0^{(\Gamma_{A_{1g},1,1})}$ の固定部分群とその固定点部分空間を求めよう. $L_0 D_{4h} \Phi$ に対して h_1, h_2, h_3 は不変であるので, 空間 $\{h_1, h_2, h_3\}_R$ における ST ($T = (E, t)$) の 1 次元の固定点部分空間を持つ固定部分群を考察すればよい.

まず S の中での固定部分群を考察する. (8.168) に見られるように, S の $\{h_1, h_2, h_3\}_R$ への作用は 3 次元回転群 $SO(3)$ の 3 次元ユークリッド空間 $\{e_1, e_2, e_3\}$ への作用と等価である. S の中での固定部分群を求める問題は 3 次元実空間の 3 次元回転群 $SO(3)$ の表現空間 $\{e_1, e_2, e_3\}_R$ における

固定部分群とその固定点部分空間を求める問題に帰着する. $SO(3)$ の固定部分群がある回転, 例えば e_3 軸の周りの θ 回転 $R(e_3, \theta)$ を含めばその固定点部分空間は $\{e_3\}_R$ でなければならない. 一方 $\{e_3\}_R$ は e_3 軸の周りの任意の回転に不変である. したがって $SO(3)$ の $\{e_1, e_2, e_3\}_R$ における固定部分群とその固定点部分空間の一つとして

$$\begin{aligned} C(e_3) &\equiv \{R(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \\ \text{Fix}(C(e_3)) &= \{e_3\}_R \end{aligned} \quad (8.169)$$

が考えられる. 他の任意の単位ベクトル n の周りの回転の場合についても, 対応する固定部分群とその固定点部分空間

$$\begin{aligned} C(n) &\equiv \{R(n, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \\ \text{Fix}(C(n)) &= \{n\}_R \end{aligned} \quad (8.170)$$

を得る. $C(n)$ と $C(e_3)$ は互いに共役であることが次のようにして示される. ベクトル n に回転操作 R_n を行って e_3 になるとする. すなわち

$$R_n \cdot n = e_3 \quad (8.171)$$

$C(e_3)$ が e_3 の固定部分群であることを

$$C(e_3) \cdot e_3 = e_3 \quad (8.172)$$

と表示する. (8.171) を (8.172) に代入すると

$$C(e_3) \cdot (R_n \cdot n) = R_n \cdot n \quad (8.173)$$

となる. これより

$$\{(R_n)^{-1} C(e_3) R_n\} \cdot n = n \quad (8.174)$$

となり

$$C(n) = \{(R_n)^{-1} C(e_3) R_n\} \quad (8.175)$$

が得られ, $C(n)$ は $C(e_3)$ に共役すなわち同値であることが分かる. これより固定部分群とその固定点部分空間の代表として

$$\begin{aligned} C(e_3) &\equiv \{R(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\} \\ \text{Fix}(C(e_3)) &= \{e_3\}_R \end{aligned} \quad (8.176)$$

を取ることが出来る. S と $SO(3)$, $\{h_1, h_2, h_3\}_R$ と $\{e_1, e_2, e_3\}_R$ の対応関係により, S の $\{h_1, h_2, h_3\}_R$ における固定部分群とその固定点部分空間の代表として

$$\begin{aligned} A(e_3) &\equiv \{u(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}_R \\ \text{Fix}(A(e_3)) &= \{h_3\}_R \end{aligned} \quad (8.177)$$

を得る.

h_3 が $D_{4h}L_0A(e_3)\Phi$ に不変であり, $u_{2y} = u(e_2, \pi), t$ に対して符号を変えることを考慮すると, G_0 で $\check{G}_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ の固定部分群とその固定点部分空間の代表として

$$\begin{aligned} G(\Gamma A_{1g}, 1, 1) &= (E + tu_{2y})D_{4h}L_0A(e_3)\Phi \\ \text{Fix}(G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)) &= \{h_3\}_R \end{aligned} \quad (8.178)$$

を考えておけばよい.

既約表現 $G^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ から導かれる状態の平均場ハミルトニアン H_m は $G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$ に不変である. これに基づいて $\rho_0^\lambda(\mathbf{k})$ の対称性を考察しよう.

H_m は $A(e_3)$ に対して不変である. そのとき次の命題が成り立つ.

命題 8.8. H_m が $A(e_3)$ の作用に不変のとき

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle &= 0 \\ \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (8.179)$$

が成り立つ.

証明. H_m が $u_{2z} = u(e_3, \pi) \in A(e_3)$ に対して不変である. (7.13) (p.234) より

$$u_{2z} = \cos \frac{\pi}{2} 1_2 - i\sigma^3 \sin \frac{\pi}{2} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad (8.180)$$

を考慮すると, 定理 6.3 より

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle &= \langle (u_{2z} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(u_{2z} \cdot a_{\mathbf{k}'\downarrow}) \rangle \\ &= \langle (-ia_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(-ia_{\mathbf{k}'\downarrow}) \rangle \\ &= -\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (8.181)$$

を得る. 従って

$$\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = 0$$

を得る.

$$\langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = 0$$

も同様に証明できる. ■

H_m は tu_{2y} の対称性を持っている. この場合次の命題が成立する.

命題 8.9. H_m が tu_{2y} の作用に不変なとき

$$\langle a_{-\mathbf{k}s}^\dagger a_{-\mathbf{k}'s'} \rangle^* = \langle a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}'s'} \rangle \quad (8.182)$$

が成り立つ.

証明. $s = s' = \uparrow$ の場合を考える.

$$u_{2y} = \cos \frac{\pi}{2} 1_2 - i\sigma^2 \sin \frac{\pi}{2} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.183)$$

を考慮すると, 定理 6.3 より

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle &= \langle (tu_{2y} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(tu_{2y} \cdot a_{\mathbf{k}'\uparrow}) \rangle^* \\ &= \langle (t \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}'\downarrow}) \rangle^* \\ &= \langle (a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(a_{-\mathbf{k}'\uparrow}) \rangle^* \\ &= \langle a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\uparrow} \rangle^* \end{aligned} \quad (8.184)$$

を得る. 他の場合も同様に証明することが出来る. ■

以上より

$$\begin{aligned} \rho_0^1(\mathbf{k}) &= \rho_0^2(\mathbf{k}) = 0 \\ \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \{\rho_0^0(-\mathbf{k})\}^* \\ \rho_0^3(\mathbf{k}) &= \{\rho_0^3(-\mathbf{k})\}^* \end{aligned} \quad (8.185)$$

を得る. 命題 8.1 および H_m の D_{4h} 不変性より $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する実関数であることが分かる.

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の対称性と (8.166) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (8.186)$$

$$\begin{aligned} x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &= b\gamma(\mathbf{k}) - \mu_1 \end{aligned} \quad (8.187)$$

ここで実数 $a, \tilde{\mu}, b, \mu_1$ は

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \tilde{\mu} &= \mu - (U + 8V - 4J)/N \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= -(1/N)V \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ \mu_1 &= (1/N)(U + 4J) \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.188)$$

で与えられる。したがって H_m は

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (b\gamma(\mathbf{k}) - \mu_1) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \quad (8.189)$$

の形になる。

(8.189) のハミルトニアン H_m はスピンの $\uparrow, \downarrow$ で分離したハミルトニアンとなり、次のように書き直すことが出来る。

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\ H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a+b)\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}^\uparrow \} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a-b)\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}^\downarrow \} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ \tilde{\mu}^\uparrow &= \tilde{\mu} + \mu_1 \\ \tilde{\mu}^\downarrow &= \tilde{\mu} - \mu_1 \end{aligned} \quad (8.190)$$

ここでスピンの $\uparrow, \downarrow$ によって化学ポテンシャルのみならず軌道エネルギーも異なっていることに注目されたい。 $V = 0$ の場合は $b = 0$ となり、(8.190) のハミルトニアンは通常の Hubbard 模型となり、いわゆる Stoner の強磁性 (FM) 状態のハミルトニアンになる。

(8.190) の H_m の形より

$$\begin{aligned} \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \frac{1}{\exp \{ \beta \{ (a+b)\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}^\uparrow \} \} + 1} \\ \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \frac{1}{\exp \{ \beta \{ (a-b)\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}^\downarrow \} \} + 1} \end{aligned} \quad (8.191)$$

が得られる。これより

$$\begin{aligned} \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) + \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) \} \\ \rho_0^3(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{ \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) - \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) \} \end{aligned} \quad (8.192)$$

を得る。

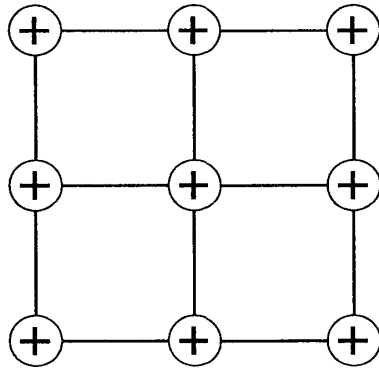
$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の A_{1g} 対称性と命題 8.5 より、(8.167) の自由エネルギー F_{HF} 、局所的秩序変数は次式の様になる。

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2 \{ -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu \} \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{ \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) \log \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) + (1 - \rho_0^\uparrow(\mathbf{k})) \log (1 - \rho_0^\uparrow(\mathbf{k})) \} \\ &\quad + \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) \log \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) + (1 - \rho_0^\downarrow(\mathbf{k})) \log (1 - \rho_0^\downarrow(\mathbf{k})) \} \end{aligned} \quad (8.193)$$

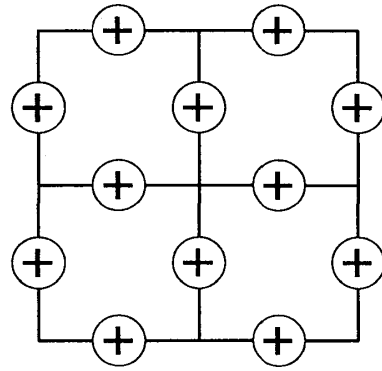
$$\begin{aligned}
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 = p(\mathbf{n})_2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^3(\mathbf{n}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 t^3(\mathbf{n})_1 = t^3(\mathbf{n})_2 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k})
 \end{aligned}$$

を得る.

電荷密度とボンドオーダーは $(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$ 状態と同様に位置, 方向によらず一定である. スピン密度とスピンボンドオーダーは一様に z 方向を向いている. 図 8.7 にスピン密度とスピンボンドオーダーのパターンを示す. この状態は標準的な強磁性状態: FM (ferromagnetic state) である. 群論的には ΓA_{1g} FM 状態と呼んでもよい.



(a) スピン密度



(b) スピンボンドオーダー

図 8.7: $(G(\Gamma A_{1g}, 1, 1))$ 状態の (a) スピン密度と (b) スピンボンドオーダー. $\bigcirc$ の中の $+$ はスピンの向きが z 方向であることを示す.

8.4.2 $\check{G}_0^{(\Gamma B_{1g}, 1, 1)}$

既約表現 $G_0^{(\Gamma B_{1g}, 1, 1)}$ は $G_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ の場合と同様に 3 次元表現であり, その基底を h_1, h_2, h_3 とすれば, $T(\mathbf{m}) \in L_0$, $p \in D_{2h}$, $p' \in C_{4z}^+ D_{2h}$, $u(\mathbf{n}, \theta) \in S$, $\tilde{\phi} \in \Phi$, $t \in \mathbb{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{m}) \cdot h_i &= h_i, & i &= 1, 2, 3 \\
 p \cdot h_i &= h_i, & i &= 1, 2, 3 \\
 p' \cdot h_i &= -h_i, & i &= 1, 2, 3 \\
 \tilde{\phi} \cdot h_i &= h_i, & i &= 1, 2,
 \end{aligned} \tag{8.194}$$

$$t \cdot h_i = -h_i, \quad i = 1, 2, 3$$

$$u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i = \sum_j R_{ji}(\mathbf{n}, \theta) h_j$$

となる。 $G_0^{(\Gamma A_{1g}, 1, 1)}$ の場合と同様に考察すると、 S の $\{h_1, h_2, h_3\}_R$ における固定部分群とその固定点部分空間の代表として

$$A(e_3) = \{u(e_3, \theta) \mid 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$$

$$\text{Fix}(A(e_3)) = \{h_3\}_R \quad (8.195)$$

を得る。 h_3 が $D_{2h} L_0 A(e_3) \Phi$ に対して不変であり、 $u_{2y}, t, C_{4z}^+, u_{2x} = u(e_1, \pi)$ の作用に対して符号を変えるので、 $tu_{2y}, C_{4z}^+ u_{2x}$ に対して不変となる。 従って G_0 での固定部分群とその固定点部分空間は

$$G(\Gamma B_{1g}, 1, 1) = (E + tu_{2y})(E + C_{4z}^+ u_{2x}) D_{2h} L_0 A(e_3) \Phi$$

$$\text{Fix}(G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)) = \{h_3\}_R \quad (8.196)$$

となる。 平均場ハミルトニアン H_m は $G(\Gamma B_{1g}, 1, 1)$ に不変である。 $G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$ の場合と同様に $A(e_3)$ を含むので $\rho_l^\lambda(\mathbf{k})$ でゼロでないのは $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ だけである。

$$u_{2x} = \cos \frac{\pi}{2} - i\sigma^1 \sin \frac{\pi}{2} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad (8.197)$$

を考慮すると H_m の $C_{4z}^+ u_{2x}$ 不変性と定理 6.3 より

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle (C_{4z}^+ u_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) (C_{4z}^+ u_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle \\ &= \langle (-ia_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\downarrow}^\dagger) (ia_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\downarrow}^\dagger) \rangle \\ &= \langle a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\downarrow}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (8.198)$$

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= \langle (C_{4z}^+ u_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (C_{4z}^+ u_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}\downarrow}) \rangle \\ &= \langle (-ia_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger) (ia_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger) \rangle \\ &= \langle a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k})\uparrow}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (8.199)$$

が成立する。 これより

$$\begin{aligned} \rho_0^0(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \rho_0^3(C_{4z}^+ \cdot \mathbf{k}) &= -\rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.200)$$

を得る。 H_m が D_{2h} 不変であるので $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ が D_{2h} 不変であることを考慮すると、 (8.200) より $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ はそれぞれ D_{4h} の A_{1g}, B_{1g} に属することが分かる。

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の対称性を考慮すると、 (8.166) より

$$\begin{aligned}
 x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}
 \end{aligned} \tag{8.201}$$

$$\begin{aligned}
 x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Y_3^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 &= b\eta(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.202}$$

が得られる. ここで実数 a, b は

$$\begin{aligned}
 a &= 2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 b &= -(1/N)V \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^3(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.203}$$

で与えられる. したがって平均場ハミルトニアンは次の様に書ける.

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\
 H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} b\eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}_{s'}}
 \end{aligned} \tag{8.204}$$

$G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$ の場合と同様に (8.204) のハミルトニアンは次のようにスピンの $\uparrow, \downarrow$ を分離して書き直すことが出来る.

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^\uparrow + H_m^\downarrow \\
 H_m^\uparrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{a\gamma(\mathbf{k}) + b\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\} a_{\mathbf{k}_\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_\uparrow} \\
 H_m^\downarrow &= \sum_{\mathbf{k}} \{a\gamma(\mathbf{k}) - b\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\} a_{\mathbf{k}_\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_\downarrow}
 \end{aligned} \tag{8.205}$$

(8.205) より

$$\begin{aligned}
 \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \langle a_{\mathbf{k}_\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_\uparrow} \rangle = \frac{1}{\exp\{a\gamma(\mathbf{k}) + b\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\} + 1} \equiv f^\uparrow(\mathbf{k}) \\
 \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \langle a_{\mathbf{k}_\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_\downarrow} \rangle = \frac{1}{\exp\{a\gamma(\mathbf{k}) - b\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\} + 1} \equiv f^\downarrow(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.206}$$

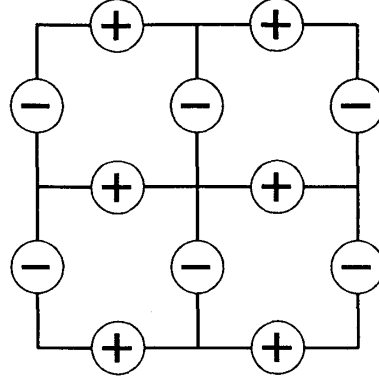


図 8.8: $G(\Gamma B_{1g}, 1, 1)$ 状態のスピンボンドオーダーのパターン. $\oplus$ と $\ominus$ は z 軸方向のスピン成分を示す.

(8.167) と命題 8.5 より次の表式を得る.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^0(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} W_3^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^3(\mathbf{k})\rho_0^3(\mathbf{k}') \\
 &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f^\uparrow(\mathbf{k}) \log f^\uparrow(\mathbf{k}) + (1 - f^\uparrow(\mathbf{k})) \log (1 - f^\uparrow(\mathbf{k})) \\
 &\quad + f^\downarrow(\mathbf{k}) \log f^\downarrow(\mathbf{k}) + (1 - f^\downarrow(\mathbf{k})) \log (1 - f^\downarrow(\mathbf{k}))\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^\lambda(\mathbf{n}) &= 0, \quad \lambda \neq 0 \\
 t^3(\mathbf{n})_1 &= -t^3(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k})\rho_0^3(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.207}$$

を得る. 図 8.8 に状態 $(\Gamma B_{1g}, 1, 1)$ のスピンボンドオーダーのパターンを示す. この種の状態をスピンボンドオーダー波:SBOW (spin bond order wave) と呼ぶ.

8.4.3 $\check{G}^{(\Gamma E_u, 1, 0)}$

既約表現 $\check{G}^{(\Gamma E_u, 1, 0)}$ は $2 \times 3 = 6$ 次元表現であり, その表現空間 $W(\Gamma E_u, 1, 0)$ の基底を $h_{i\lambda}$ ($i = 1, 2, \lambda = 1, 2, 3$) とする. $T(\mathbf{m}) \in L_0, p \in D_{4h}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S, r \in \mathbf{R}$ に対して

$$\begin{aligned}
 T(\mathbf{m}) \cdot h_{i\lambda} &= h_{i\lambda} \\
 p \cdot h_{i\lambda} &= \sum_{i'=1}^2 h_{i'\lambda} D_{i'i}(p)
 \end{aligned}$$

$$u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_{i\lambda} = \sum_{\mu=1}^3 R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) h_{i\mu} \quad (8.208)$$

$$r \cdot h_{i\lambda} = h_{i\lambda}$$

ここで $D(p)$ は D_{4h} の E_u 表現の表現行列 (付録 B p.340 参照) である. 各基底 $h_{i\lambda}$ は $L_0, \mathbf{R}$ に対して不変であるので, 表現空間 $W(\Gamma E_u, 1, 0)$ における $G_{DS} = D_{4h} \times S$ のなかで固定部分群を考察すればよい.

まず固定部分群が純粋スピン回転, たとえば z 軸まわりのスピン回転 $u(\mathbf{e}_3, \theta)$ を含む場合を考える. その固定点部分空間 $W(u(\mathbf{e}_3, \theta))$ は

$$W(u(\mathbf{e}_3, \theta)) = \{h_{13}, h_{23}\}_{\mathbf{R}} \quad (8.209)$$

の形でなければならない. 逆に (8.209) の $W(u(\mathbf{e}_3, \theta))$ 内の任意のベクトルは z 軸周りの任意のスピン回転の群 $A(\mathbf{e}_3)$ に不変である. $W(u(\mathbf{e}_3, \theta))$ を $W(A(\mathbf{e}_3))$ と記すことにする. すなわち

$$W(A(\mathbf{e}_3)) = \{h_{13}, h_{23}\}_{\mathbf{R}} \quad (8.210)$$

$W(A(\mathbf{e}_3))$ における D_4 の固定部分群と固定点部分空間は例 4.4 (その 1 の p.565) にあるように

$$C_{2x}, \quad \text{Fix}(C_{2x}) = \{h_{13}\}_{\mathbf{R}} \quad (8.211)$$

$$C_{2a}, \quad \text{Fix}(C_{2a}) = \{h_{13} + h_{23}\}_{\mathbf{R}} \quad (8.212)$$

で与えられる. h_{13}, h_{23} は I, C_{2z}, u_{2x} に対して符号を変えるので $G_0 = D_{4h} L_0 S \mathbf{R}$ の中で考えると, $G(\Gamma E_u, 1, 0)$ での固定部分群と固定点部分空間は

$$G(\Gamma E_u, 1, 0)_1 = (E + C_{2z} u_{2x}) C_{2vx} L_0 A(\mathbf{e}_3) \mathbf{R} \quad (8.213)$$

$$\text{Fix}(G(\Gamma E_u, 1, 0)_1) = \{h_{13}\}_{\mathbf{R}}$$

$$G(\Gamma E_u, 1, 0)_2 = (E + C_{2z} u_{2x}) C_{2va} L_0 A(\mathbf{e}_3) \mathbf{R} \quad (8.214)$$

$$\text{Fix}(G(\Gamma E_u, 1, 0)_2) = \{h_{13} + h_{23}\}_{\mathbf{R}}$$

となる. ここで

$$C_{2vx} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\} \quad (8.215)$$

$$C_{2va} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\}$$

である.

今度は純粋なスピン回転を含まない固定部分群を求めよう. そのため $G_{DS} = D_4 \times S$ の部分群を考える.

まず何らかの形で (スピン回転と結合している元も含む) D_4 の全ての元が含まれている G_{DS} の部分群を考える. 定理 2.4 (その 1 の p.530) より求める G_{DS} の部分群 G_{DS}^i は D_4 の正規部分群 N_i によって次のように書ける.

$$G_{SD}^i = (D_4/N_i; S_i) = p_0 N_i u_0 + p_1 N_i u_1 + \cdots + p_m N_i u_m \quad (8.216)$$

ここで D_4 の N_i による剰余類分解が

$$D_4 = p_0 N_i + p_1 N_i + \cdots + p_m N_i, \quad (p_0 = E) \quad (8.217)$$

であり, S_i は D_4/N_i に同型で

$$S_i = \{u_0 = E, u_1, \cdots, u_m\} \quad (8.218)$$

としたとき, 同型対応 $p_n N_i \iff u_n$ があるものとする. 表 2.4 (その 1 の p.523) より D_4 の正規部分群 N_i は $D_4, C_4, D_2, D_{2a}, C_1$ の 5 個存在する. この中で C_1 以外は C_{2z} を含む. C_1 以外の正規部分群より構成される (8.216) の形の部分群は C_{2z} を含む. $h_{i\lambda}$ ($i = 1, 2, \lambda = 1, 2, 3$) は C_{2z} の作用で符号を変える. 従って $W(\Gamma E_u, 1, 0)$ における固定部分群となり得るのは $N_i = C_1$ の場合だけで, 求める部分群は

$$\begin{aligned} G_{DS}^I &= (D_4/C_1; D_4^S) \\ &= \{Eu_0, C_{4z}^+ u_{4z}^+, C_{2z} u_{2z}, C_{4z}^- u_{4z}^-\} + C_{2x} u_{2x} \{Eu_0, C_{4z}^+ u_{4z}^+, C_{2z} u_{2z}, C_{4z}^- u_{4z}^-\} \\ &\equiv {}_{II}D_4 \end{aligned} \quad (8.219)$$

で与えられる. ここで $D_4^S \cong D_4$ は

$$D_4^S = \{E, u_{4z}^+, u_{2z}, u_{4z}^-\} + u_{2x} \{E, u_{4z}^+, u_{2z}, u_{4z}^-\} \quad (8.220)$$

であり, $u_{4z}^\pm$ は

$$u_{4z}^\pm = u(e_3, \pm 2\pi/4) \quad (8.221)$$

で定義される. ${}_{II}D_4$ の固定点部分空間は射影演算子の方法を使うとつぎのようにして求まる. 群 G に不変なベクトルは (3.58) (その 1 p.546) の $P^{(0)}(G)$ を使って求めることが出来る.⁴ 変換性 (8.208) を考慮して h_{11} に $P^{(0)}({}_{II}D_4)$ を作用させると

$$\begin{aligned} P^{(0)}({}_{II}D_4) \cdot h_{11} &= \frac{1}{8} [\{(Eu_0) \cdot h_{11} + (C_{4z}^+ u_{4z}^+) \cdot h_{11} + (C_{2z} u_{2z}) \cdot h_{11} + (C_{4z}^- u_{4z}^-) \cdot h_{11}\} \\ &\quad + (C_{2x} u_{2x}) \{(Eu_0) \cdot h_{11} + (C_{4z}^+ u_{4z}^+) \cdot h_{11} + (C_{2z} u_{2z}) \cdot h_{11} + (C_{4z}^- u_{4z}^-) \cdot h_{11}\}] \\ &= \frac{1}{8} [\{h_{11} + h_{22} + h_{11} + h_{22}\} + \{h_{11} + h_{22} + h_{11} + h_{22}\}] \\ &= \frac{1}{2} \{h_{11} + h_{22}\} \end{aligned} \quad (8.222)$$

を得る. h_{12} に $P^{(0)}({}_{II}D_4)$ を作用させると

$$\begin{aligned} P^{(0)}({}_{II}D_4) \cdot h_{12} &= \frac{1}{8} [\{(Eu_0) \cdot h_{12} + (C_{4z}^+ u_{4z}^+) \cdot h_{12} + (C_{2z} u_{2z}) \cdot h_{12} + (C_{4z}^- u_{4z}^-) \cdot h_{12}\} \\ &\quad + (C_{2x} u_{2x}) \{(Eu_0) \cdot h_{12} + (C_{4z}^+ u_{4z}^+) \cdot h_{12} + (C_{2z} u_{2z}) \cdot h_{12} + (C_{4z}^- u_{4z}^-) \cdot h_{12}\}] \\ &= \frac{1}{8} [\{h_{12} - h_{21} + h_{12} - h_{21}\} + \{-h_{12} + h_{21} - h_{12} + h_{21}\}] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (8.223)$$

⁴(3.58) の左辺 $G^{(0)}(G)$ は $P^{(0)}(G)$ の誤植である.

を得る. 同様にして h_{11} 以外の $W(\Gamma E_u, 1, 0)$ の基底に $P^{(0)}({}_{II}D_4)$ を作用させてもゼロになる. したがって

$$\text{Fix}({}_{II}D_4) = \{h_{11} + h_{22}\}_{\mathbf{R}} \quad (8.224)$$

と求まる. h_{11}, h_{22} が I, u_{2z} で符号を変え, $L_0, \mathbf{R}$ に対して不変であるので, G_0 の中での固定部分群とその固定点部分空間は

$$\begin{aligned} G(\Gamma E_u, 1, 0)_3 &= (E + Iu_{2z})_{II}D_4L_0\mathbf{R} \\ \text{Fix}(G(\Gamma E_u, 1, 0)_3) &= \{h_{11} + h_{22}\}_{\mathbf{R}} \end{aligned} \quad (8.225)$$

となる.

以下 $G(\Gamma E_u, 1, 0)_1, G(\Gamma E_u, 1, 0)_2, G(\Gamma E_u, 1, 0)_3$ の場合を個別に考察する.

(1) $G(\Gamma E_u, 1, 0)_1$ 状態

平均場ハミルトニアン H_m は

$$G(\Gamma E_u, 1, 0)_1 = (E + C_{2z}u_{2x})C_{2vx}L_0A(e_3)\mathbf{R} \quad (8.226)$$

に対して不変である. $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の対称性を考察しよう. H_m が $C_{2z}u_{2x}$ に不変であるので

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle (C_{2z}u_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(C_{2z}u_{2x} \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle \\ &= \langle (-ia_{C_{2z} \cdot \mathbf{k}\downarrow}^\dagger)(ia_{C_{2z} \cdot \mathbf{k}\downarrow}) \rangle \\ &= \langle a_{C_{2z} \cdot \mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{C_{2z} \cdot \mathbf{k}\downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (8.227)$$

が成り立ち, 同様に

$$\langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \langle a_{C_{2z} \cdot \mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{C_{2z} \cdot \mathbf{k}\uparrow} \rangle \quad (8.228)$$

を得る. 従って

$$\begin{aligned} \rho_0^0(C_{2z} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \rho_0^3(C_{2z} \cdot \mathbf{k}) &= -\rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.229)$$

が成り立つ. また H_m が IC_{2z} に不変であるので

$$\begin{aligned} \rho_0^0(C_{2z}I \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(I \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \rho_0^3(C_{2z}I \cdot \mathbf{k}) &= -\rho_0^3(I \cdot \mathbf{k}) = \rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.230)$$

が成り立つ. H_m が $t \in \mathbf{R}$ に不変であるので

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle^* \\ &= \langle (-a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)(-a_{-\mathbf{k}\downarrow}) \rangle^* \\ &= \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle^* \end{aligned} \quad (8.231)$$

を得る. 同様に

$$\langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \langle a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\uparrow} \rangle^* \quad (8.232)$$

を得る. 従って

$$\begin{aligned} \rho_0^0(\mathbf{k}) &= (\rho_0^0(-\mathbf{k}))^* \\ \rho_0^3(\mathbf{k}) &= -(\rho_0^3(-\mathbf{k}))^* \end{aligned} \quad (8.233)$$

を得る. $\rho_0^0(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の偶関数, $\rho_0^3(\mathbf{k})$ が $\mathbf{k}$ の奇関数であることを考慮し, C_{2x} 不変性とあわせると $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g, B_{3u} に属する実数値関数であることが分かる.

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の以上の対称性を考慮すると表 8.1 (p.281) と (8.166) より

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= -2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &= a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{aligned} \quad (8.234)$$

$$\begin{aligned} x_0^3(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} Y_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &= b \sin k_1 \end{aligned} \quad (8.235)$$

が得られる. ここで実数 a, b はここで a, b, c はつぎの SCF 条件で定まる.

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ c &= -\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= -\{2V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.236)$$

従って平均場ハミルトニアンはつぎのようになる.

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\ H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} b \sin k_1 a_{\mathbf{k}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}_{s'}} \\ H_m^2 &= \sum_{\mathbf{k}_s} c\eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \end{aligned} \quad (8.237)$$

$G(ME_u, 0, 0)_1$ の場合と同様に H_m^2 は H_m^1 が生ずることによって副次的に誘導される成分である. (8.237) の H_m の形より

$$\begin{aligned} \rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\exp \{a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) + b \sin k_1 - \tilde{\mu}\} + 1} \equiv f^\uparrow(\mathbf{k}) \\ \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\exp \{a\gamma(\mathbf{k}) + c\eta(\mathbf{k}) - b \sin k_1 - \tilde{\mu}\} + 1} \equiv f^\downarrow(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.238)$$

を得る. これより $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ が求められる. $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の対称性と (8.167) より次の自由エネルギー F_{HF} , 局所的秩序変数の表式を得る.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} = & \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^0(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 & + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} Y_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^3(\mathbf{k})\rho_0^3(\mathbf{k}') \\
 & + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f^\uparrow(\mathbf{k}) \log f^\uparrow(\mathbf{k}) + (1 - f^\uparrow(\mathbf{k})) \log(1 - f^\uparrow(\mathbf{k})) \\
 & + f^\downarrow(\mathbf{k}) \log f^\downarrow(\mathbf{k}) + (1 - f^\downarrow(\mathbf{k})) \log(1 - f^\downarrow(\mathbf{k}))\} \\
 d(\mathbf{n}) = & \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{\gamma(\mathbf{k}) + \eta(\mathbf{k})\} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_2 = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{\gamma(\mathbf{k}) - \eta(\mathbf{k})\} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^3(\mathbf{n}) = & 0 \\
 t^3(\mathbf{n})_1 = & i \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^3(\mathbf{k}) \\
 t^3(\mathbf{n})_2 = & 0
 \end{aligned} \tag{8.239}$$

$t^3(\mathbf{n})_1$ が複素数であるのでスピン流密度が存在する. その表式を求めるために, 命題 D.1(p.345) を使って H_m のサイト表示を求める. (8.237) より

$$\begin{aligned}
 H_m = & \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} \left\{ -\bar{\mu} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} + \frac{1}{2}(a+c) a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1)s'} + \frac{1}{2}(a+c) a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1)s'} \right. \\
 & + \frac{1}{2}(a-c) a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2)s'} + \frac{1}{2}(a-c) a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2)s'} \left. \right\} \sigma_{ss'}^0 \\
 & + \frac{b}{2i} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'}) \sigma_{ss'}^3
 \end{aligned} \tag{8.240}$$

これより

$$\begin{aligned}
 h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0 &= \frac{1}{2}(a+c) \\
 h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^0 &= \frac{1}{2}(a-c) \\
 h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^3 &= \frac{b}{2i} \\
 h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_0}^3 &= 0
 \end{aligned} \tag{8.241}$$

を得る. (8.239), (8.241) を (E.6) 代入してスピン流密度

$$\begin{aligned}
 J^3(\mathbf{n})_1 &= -\frac{e}{2N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \{2(a+c) \sin k_1 \rho_0^3(\mathbf{k}) - b(\gamma(\mathbf{k}) + \eta(\mathbf{k})) \rho_0^0(\mathbf{k})\} \\
 J^3(\mathbf{n})_2 &= 0
 \end{aligned} \tag{8.242}$$

図8.9にボンドオーダーとスピン流密度パターンを示す。この種の状態をスピン流密度波:SCW(spin current wave) という。

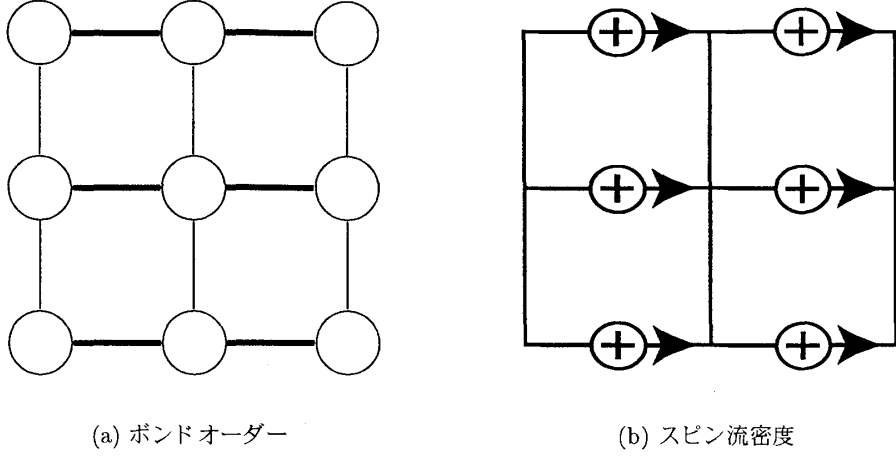


図 8.9: $(G(\Gamma E_u, 1, 0)_1)$ 状態の (a) ボンドオーダーと (b) スピン流密度。

(2) $G(\Gamma E_u, 1, 0)_2$ 状態

平均場ハミルトニアン H_m は

$$G(\Gamma E_u, 1, 0)_2 = (E + C_{2z}u_{2x})C_{2va}L_0A(e_3)\mathbf{R} \quad (8.243)$$

に対して不変である。 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の対称性を考察しよう。 $G(\Gamma E_u, 1, 0)_1$ と同様に H_m が $C_{2z}u_{2x}, IC_{2z}, C_{2a}, t$ に不変であることを使うと、 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ は D_{2ah} の A_g, B_{3u} に属する実数値関数であることが分かる。

$$\begin{aligned} Y_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + Y_5^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -(2V/N) \{ \sin k_1 \sin k'_1 + \sin k_2 \sin k'_2 \} \\ &= -(V/N) \{ (\sin k_1 + \sin k_2)(\sin k'_1 + \sin k'_2) \\ &\quad + (\sin k_1 - \sin k_2)(\sin k'_1 - \sin k'_2) \} \end{aligned} \quad (8.244)$$

を考慮すると、(8.166) より平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= b \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (\sin k_1 + \sin k_2) a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}bs'} \end{aligned} \quad (8.245)$$

で与えられる。ここで実数 a, c は次の SCF 条件で定まる。

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{ (V - 2J)/N \} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= -(V/N) \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \rho_0^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.246)$$

(8.245) の H_m の形より

$$\begin{aligned}\rho_0^\uparrow(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\exp\{a\gamma(\mathbf{k}) + b(\sin k_1 + \sin k_2) - \tilde{\mu}\} + 1} \equiv f^\uparrow(\mathbf{k}) \\ \rho_0^\downarrow(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\exp\{a\gamma(\mathbf{k}) - b(\sin k_1 + \sin k_2) - \tilde{\mu}\} + 1} \equiv f^\downarrow(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (8.247)$$

を得る. これより $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ が得られる.

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^3(\mathbf{k})$ の対称性と (8.167) より次の自由エネルギー F_{HF} と局所的秩序変数の表式を得る.

$$\begin{aligned}F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^0(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}') \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Y_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\rho_0^3(\mathbf{k})\rho_0^3(\mathbf{k}') \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f^\uparrow(\mathbf{k}) \log f^\uparrow(\mathbf{k}) + (1 - f^\uparrow(\mathbf{k})) \log(1 - f^\uparrow(\mathbf{k})) \\ &\quad + f^\downarrow(\mathbf{k}) \log f^\downarrow(\mathbf{k}) + (1 - f^\downarrow(\mathbf{k})) \log(1 - f^\downarrow(\mathbf{k}))\} \\ d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k}) \\ s^3(\mathbf{n}) &= 0 \\ t^3(\mathbf{n})_1 &= t^3(\mathbf{n})_2 = i\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}b} (\sin k_1 + \sin k_2)\rho_0^3(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (8.248)$$

$t^3(\mathbf{n})_1$ が複素数であるのでスピン流密度が存在する. その表式を求めるために, 命題 D.1 (p.344) を使って H_m のサイト表示を求める. (8.245) より

$$\begin{aligned}H_m &= \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} \left\{ -\tilde{\mu} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} + \frac{1}{2} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1)s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1)s'} \right. \\ &\quad \left. + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2)s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2)s'} \right\} \sigma_{ss'}^0 \\ &\quad + \frac{b}{2i} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \sigma_{ss'}^3\end{aligned}\quad (8.249)$$

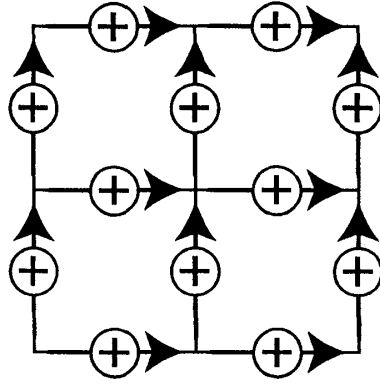
これより

$$\begin{aligned}h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^0 = \frac{a}{2} \\ h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^3 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^3 = \frac{b}{2i}\end{aligned}\quad (8.250)$$

を得る. (8.248), (8.250) を (E.6) 代入してスピン流密度

$$J^3(\mathbf{n})_1 = J^3(\mathbf{n})_2 = -\frac{e}{2N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \{a(\sin k_1 + \sin k_2)\rho_0^3(\mathbf{k}) - b\gamma(\mathbf{k})\rho_0^0(\mathbf{k})\}\quad (8.251)$$

図 8.10 にこの SCW 状態のスピン流密度パターンを示す.


 図 8.10: $G(\Gamma E, 1, 0)_2$ 状態のスピン流密度のパターン.

(3) $G(\Gamma E_u, 1, 0)_3$ 状態

平均場ハミルトニアン H_m の

$$G(H_m) = G(\Gamma E_u, 1, 0)_3 = (E + Iu_{2z})_{II} D_4 L_0 \mathbf{R} \quad (8.252)$$

不変性を利用して $\rho_0^\lambda(\mathbf{k})$ ($\lambda = 0, 1, 2, 3$) の対称性を考察する. まず $t \in \mathbf{R}$ より

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle (t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger)(t \cdot a_{\mathbf{k}\uparrow}) \rangle^* \\ &= \langle (-a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger)(a_{(-\mathbf{k})\downarrow}) \rangle^* \\ &= \langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle^* \end{aligned} \quad (8.253)$$

同様にして

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= \langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow} \rangle^* \\ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= -\langle a_{(-\mathbf{k})\downarrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\uparrow} \rangle^* \\ \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= -\langle a_{(-\mathbf{k})\uparrow}^\dagger a_{(-\mathbf{k})\downarrow} \rangle^* \end{aligned} \quad (8.254)$$

命題 8.1 (8.253), (8.254) より

$$\begin{aligned} \rho_0^0(\mathbf{k}) &= (\rho_0^0(-\mathbf{k}))^* = \rho_0^0(-\mathbf{k}) \\ \rho_0^\lambda(\mathbf{k}) &= -(\rho_0^\lambda(-\mathbf{k}))^* = -\rho_0^\lambda(-\mathbf{k}), \quad \lambda = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (8.255)$$

を得る.

同様の方法で H_m の Iu_{2z} 不変性より

$$\begin{aligned} \rho_0^0(-\mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \rho_0^3(-\mathbf{k}) &= \rho_0^3(\mathbf{k}) \\ \rho_0^1(-\mathbf{k}) &= -\rho_0^1(\mathbf{k}) \\ \rho_0^2(-\mathbf{k}) &= -\rho_0^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.256)$$

(8.255) と (8.256) より

$$\rho_0^3(\mathbf{k}) = 0 \quad (8.257)$$

が成り立つ. H_m の $C_{2x}u_{2x}$ 不変性より

$$\begin{aligned} \rho_0^0(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \rho_0^1(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^1(\mathbf{k}) \\ \rho_0^2(C_{2x} \cdot \mathbf{k}) &= -\rho_0^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.258)$$

を得る. H_m の $C_4^+u_{4z}^+$ 不変性より

$$\begin{aligned} \rho_0^0((C_{4z}^+)^{-1} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ \rho_0^1((C_{4z}^+)^{-1} \cdot \mathbf{k}) &= \rho_0^2(\mathbf{k}) \\ \rho_0^2((C_{4z}^+)^{-1} \cdot \mathbf{k}) &= -\rho_0^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.259)$$

を得る. これより $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属し, $(\rho_0^1(\mathbf{k}), \rho_0^2(\mathbf{k}))$ は D_{4h} の E_u に属する実数値関数であることが分かる.

SCF 条件 (8.166) と $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_0^1(\mathbf{k}), \rho_0^2(\mathbf{k})$ の対称性を考慮すると平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= b \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (\sin k_1 \sigma_{ss'}^1 + \sin k_2 \sigma_{ss'}^2) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \quad (8.260)$$

で与えられる. ここで実数 a, b は SCF 条件

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= -\frac{2}{N} V \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^1(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.261)$$

で与えられる. (8.260) の平均場ハミルトニアンは次のように書ける.

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \{ (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + c(\sin k_1 - i \sin k_2) a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ &\quad + b(\sin k_1 + i \sin k_2) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \begin{pmatrix} a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} & b(\sin k_1 - i \sin k_2) \\ b(\sin k_1 + i \sin k_2) & a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8.262)$$

これを対角化して次の式を得る.

$$\begin{aligned}
 H_m &= \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^\dagger X(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^\dagger U(\mathbf{k}) U^\dagger(\mathbf{k}) X(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) U^\dagger A_{\mathbf{k}} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \{ E_1(\mathbf{k}) \alpha_1^\dagger(\mathbf{k}) \alpha_1(\mathbf{k}) + E_2(\mathbf{k}) \alpha_2^\dagger(\mathbf{k}) \alpha_2(\mathbf{k}) \}
 \end{aligned} \tag{8.263}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 A_{\mathbf{k}}^\dagger &= (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \\
 X(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} & c(\sin k_1 - i \sin k_2) \\ c(\sin k_1 + i \sin k_2) & a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \end{pmatrix} \\
 E(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 E_1(\mathbf{k}) &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} + |c| (\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)^{1/2} \\
 E_2(\mathbf{k}) &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} - |c| (\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)^{1/2} \\
 U(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}) & -v(\mathbf{k})^* \\ v(\mathbf{k}) & u(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 u(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\
 v(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sin k_1 + i \sin k_2}{\sqrt{\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2}} \\
 \alpha^\dagger(\mathbf{k}) &= (\alpha_1^\dagger(\mathbf{k}), \alpha_2^\dagger(\mathbf{k})) = A_{\mathbf{k}}^\dagger U(\mathbf{k}) = (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}) & -v(\mathbf{k})^* \\ v(\mathbf{k}) & u(\mathbf{k}) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{8.264}$$

(8.264) の最後の式より

$$(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) = (\alpha_1^\dagger(\mathbf{k}), \alpha_2^\dagger(\mathbf{k})) \begin{pmatrix} u(\mathbf{k}) & v(\mathbf{k})^* \\ -v(\mathbf{k}) & u(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \tag{8.265}$$

を得る. (8.263) の H_m の形から

$$\langle \alpha_i(\mathbf{k}) \alpha_j(\mathbf{k}) \rangle = \delta_{ij} \{ \exp(\beta E_i(\mathbf{k})) + 1 \}^{-1} = \delta_{ij} f_i(\mathbf{k}) \tag{8.266}$$

(8.265) と (8.266) より

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} \{ f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k}) \} \\
 \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= uv \{ f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k}) \} \\
 \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= uv^* \{ f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k}) \}
 \end{aligned} \tag{8.267}$$

を得る. これより

$$\begin{aligned}
\rho_0^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \{f_1(\mathbf{k}) + f_2(\mathbf{k})\} \\
\rho_0^1(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \frac{\sin k_1}{\sqrt{\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2}} \{f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})\} \\
\rho_0^2(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \frac{\sin k_2}{\sqrt{\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2}} \{f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})\}
\end{aligned} \tag{8.268}$$

自由エネルギー F_{HF} , 局所的秩序変数は (8.167) より

$$\begin{aligned}
F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2t\gamma(\mathbf{k}) - \mu)\rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
&\quad + 2 \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \{Y_4^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^1(\mathbf{k}) \rho_0^1(\mathbf{k}')\} \\
&\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k}))\} \\
&\quad + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\
d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
s^\lambda(\mathbf{n}) &= 0, \quad \lambda = 1, 2, 3 \\
t^1(\mathbf{n})_1 &= t^2(\mathbf{n})_2 = \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^1(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{8.269}$$

で与えられる. ここで

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_0^1(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}} \sin((C_{4z}^+)^{-1} \cdot \mathbf{k})_1 \rho_0^1((C_{4z}^+)^{-1} \cdot \mathbf{k}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 \rho_0^2(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{8.270}$$

を使った. $t^1(\mathbf{n})_1, t^2(\mathbf{n})_2$ が複素数であるのでスピン流密度が存在する. 命題 D.1 (p.344) と (8.260) より H_m のサイト表示は次の様に書ける.

$$\begin{aligned}
H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left\{ -\tilde{\mu} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} + \frac{1}{2} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1)s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1)s'} \right. \\
&\quad \left. + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2)s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2)s'} \right\} \sigma_{ss'}^0 \\
&\quad + \frac{b}{2i} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} \left\{ (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'}) \sigma_{ss'}^1 \right. \\
&\quad \left. + (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \sigma_{ss'}^2 \right\}
\end{aligned} \tag{8.271}$$

これより

$$\begin{aligned}
 h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^0 = \frac{1}{2}a \\
 h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^1 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^2 = \frac{b}{2i} \\
 h_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_j}^3 &= 0, \quad j = 1, 2 \\
 h_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^1 &= h_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^2 = 0
 \end{aligned} \tag{8.272}$$

を得る. (8.269), (8.272) を (E.6) に代入してスピン流密度

$$J^1(\mathbf{n})_1 = J^2(\mathbf{n})_2 = -\frac{e}{2N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \{a \sin k_1 \rho_0^1(\mathbf{k}) + a \sin k_2 \rho_0^2(\mathbf{k}) - b\gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k})\} \tag{8.273}$$

を得る. 図 8.11 にこの SCW 状態のスピン流密度のパターンを示す.

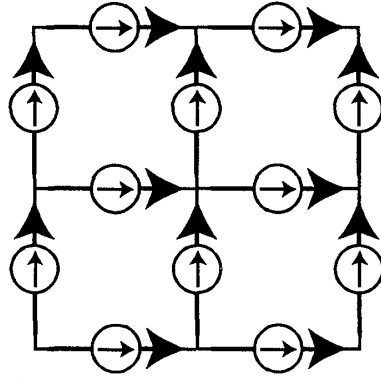


図 8.11: $G(\Gamma E, 1, 0)_3$ 状態のスピン流密度のパターン. $\circ$ 内の矢印 $\rightarrow, \uparrow$ はスピンの x, y 成分を表す.

8.5 M 点磁性状態

この節ではオーダリングベクトルが M 点: $\mathbf{k} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ を持つ既約表現 $\check{G}_0^{(Mj, 1, \nu)}$ ($\nu = 0, 1$) より導かれる状態を考察する. この場合の平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\
 H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sum_{\lambda=1}^3 x_1^\lambda(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{\mathbf{k}_{s'}}
 \end{aligned} \tag{8.274}$$

ここで $x_1^\lambda(\mathbf{k}), \rho_1^\lambda(\mathbf{k})$ は (8.10), 命題 8.1 より

$$\begin{aligned}
 x_1^\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{Q})^* &= x_1^\lambda(\mathbf{k}) \\
 \rho_1^\lambda(\mathbf{k})^* &= \rho_1^\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{Q})
 \end{aligned} \tag{8.275}$$

を満たす. (8.48) より $x_1^\lambda(\mathbf{k})$ は SCF 条件

$$x_1^\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^5 Y_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{Q}), \quad \lambda \neq 0 \quad (8.276)$$

で与えられる. $Y_1^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは定数の $x_1^\lambda(\mathbf{k})$ が得られ, これは $\mathbf{k}$ の偶関数で Q 偶であるので, 表 7.4 (p.265) の (10) の場合に該当し, H_m^1 は $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$ に属することが分かる.

$Y_2^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは $x_1^\lambda(\mathbf{k})$ は $c\gamma(\mathbf{k})$, (c は定数) の形になり, 偶関数で Q 奇であるので表 7.4 の (9) の場合に該当し, H_m^1 は $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 0)}$ に属することが分かる.

$Y_3^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは $x_1^\lambda(\mathbf{k})$ は $c\eta(\mathbf{k})$, (c は定数) の形になり, 偶関数で Q 奇であるので表 7.4 の (9) の場合に該当し, H_m^1 は $\check{G}_0^{(MB_{1g}, 1, 0)}$ に属することが分かる.

$Y_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), Y_5^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ からは $x_1^\lambda(\mathbf{k})$ は $c_1 \sin k_1 + c_2 \sin k_2$, (c_1, c_2 は定数) の形になり, 奇関数で Q 奇であるので表 7.4 の (10) の場合に該当し, H_m^1 は $\check{G}_0^{(ME_u, 1, 1)}$ に属することが分かる.

以下 $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$, $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 0)}$, $\check{G}_0^{(MB_{1g}, 1, 0)}$, $\check{G}_0^{(ME_u, 1, 1)}$ の場合について考察する.

上記の各場合に $A(e_3)$ に不変な状態が現れる. ここで $A(e_3)$ 不変な

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} x_0^0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\ H_m^1 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} x_1^3(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}_{s'}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} x_1^3(\mathbf{k}) \{ a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_\uparrow} - a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}_\downarrow} \} \end{aligned} \quad (8.277)$$

で表されるの平均場ハミルトニアンに対角化と $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の表式を求めておく. (8.277) は次の様に対角化できる.

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s A_{\mathbf{k}_s}^\dagger X_s(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}_s} \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s A_{\mathbf{k}_s}^\dagger U_s(\mathbf{k}) U_s^\dagger(\mathbf{k}) X_s(\mathbf{k}) U_s(\mathbf{k}) U_s^\dagger(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}_s} \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_s \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}_s} \end{aligned} \quad (8.278)$$

ここで

$$\begin{aligned} X_\uparrow(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & x_1^3(\mathbf{k})^* \\ x_1^3(\mathbf{k}) & x_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{pmatrix} \\ X_\downarrow(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} x_0^0(\mathbf{k}) & -x_1^3(\mathbf{k})^* \\ -x_1^3(\mathbf{k}) & x_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{pmatrix} \\ A_{\mathbf{k}_s}^\dagger &= (a_{\mathbf{k}_s}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger) \\ \alpha_{\mathbf{k}_s}^\dagger &= (\alpha_{1\mathbf{k}_s}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}_s}^\dagger) = A_{\mathbf{k}_s}^\dagger U_s(\mathbf{k}) \\ E(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} -E_0(\mathbf{k}) - \bar{\mu} & 0 \\ 0 & E_0(\mathbf{k}) - \bar{\mu} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$E_0(\mathbf{k}) = ((x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu})^2 + |x_1^3(\mathbf{k})|^2)^{1/2} \quad (8.279)$$

$$U_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}$$

$$U_{\downarrow}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}$$

$$u_{\mathbf{k}} = \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{1/2}$$

$$v_{\mathbf{k}} = -e^{i\alpha} \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{1/2}$$

ここで $e^{i\alpha}$ は $x_1^3(\mathbf{k}) = e^{i\alpha} |x_1^3(\mathbf{k})|$ の位相因子である. $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ は次の条件を満たす.

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 &= 1 \\ u_{\mathbf{k}}^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 &= -\frac{x_0^0(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}}{E_0(\mathbf{k})} \\ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} &= -\frac{x_1^3(\mathbf{k})}{2E_0(\mathbf{k})} \\ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* &= -\frac{x_1^3(\mathbf{k})^*}{2E_0(\mathbf{k})} \end{aligned} \quad (8.280)$$

(8.278), (8.279) より

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{1\mathbf{k}_s}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}_s} \rangle &= \{ \exp(\beta E_1(\mathbf{k})) + 1 \}^{-1} \equiv f_1(\mathbf{k}) \\ \langle \alpha_{2\mathbf{k}_s}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}_s} \rangle &= \{ \exp(\beta E_2(\mathbf{k})) + 1 \}^{-1} \equiv f_2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.281)$$

を得る. また (8.279) より

$$\begin{aligned} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger) &= (\alpha_{1\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\ (a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger) &= (\alpha_{1\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8.282)$$

(8.281) と (8.282) より

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \rangle &= u_{\mathbf{k}}^2 f_1(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 f_2(\mathbf{k}) \\ \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s} \rangle &= |v_{\mathbf{k}}|^2 f_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 f_2(\mathbf{k}) \\ \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow} \rangle &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\ \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= -u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\ \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow} \rangle &= -u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (8.283)$$

を得る. これより

$$\begin{aligned}
\rho_0^0(\mathbf{k}) &= u_{\mathbf{k}}^2 f_1(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 f_2(\mathbf{k}) \\
\rho_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &= |v_{\mathbf{k}}|^2 f_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 f_2(\mathbf{k}) \\
\rho_1^3(\mathbf{k}) &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\
\rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k}))
\end{aligned} \tag{8.284}$$

を得る.

8.5.1 $\tilde{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$

既約表現 $\tilde{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$ は 3 次元表現である. その表現空間の基底を h_1, h_2, h_3 とする.

$p \in D_{4h}, T(\mathbf{n}) \in L_1, T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1 = (L_0 - L_1), \tilde{\phi} \in \Phi, t \in \mathbf{R}, u(\mathbf{n}, \theta) \in S$ の h_i ($i = 1, 2, 3$) への作用は

$$\begin{aligned}
p \cdot h_i &= h_i \\
T(\mathbf{n}) \cdot h_i &= h_i \\
T(\mathbf{m}) \cdot h_i &= -h_i \\
\tilde{\phi} \cdot h_i &= h_i \\
t \cdot h_i &= -h_i \\
u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= \sum_j R_{ji}(\mathbf{n}, \theta) h_j
\end{aligned} \tag{8.285}$$

で与えられる. 第 8.4.1 節の場合との違いは $T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1, t \in \mathbf{R}$ の作用に対する符号が $(-)$ になっている所だけである. 従って第 8.4.1 節と同様な考察により, $T(e_1)u_{2x}, tu_{2y}$ に対して h_3 が不変であることを考慮すると, $\tilde{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$ の固定部分群と固定点部分空間として

$$\begin{aligned}
G(MA_{1g}, 1, 1) &= (E + T(e_1)u_{2x})(E + tu_{2y})D_{4h}L_1A(e_3)\Phi \\
\text{Fix}(G(MA_{1g}, 1, 1)) &= \{h_3\}_{\mathbf{R}}
\end{aligned} \tag{8.286}$$

を得る.

H_m の $G(MA_{1g}, 1, 1)$ 不変性を利用して $\rho_i^\lambda(\mathbf{k})$ ($i = 0, 1, \lambda = 1, 2, 3$) の対称性を考察する. 命題 8.8 (p.299) より, $A(e_3)$ 対称性があるため

$$\rho_i^1(\mathbf{k}) = \rho_i^2(\mathbf{k}) = 0, \quad i = 0, 1 \tag{8.287}$$

である. $T(e_1)u_{2x}$ 不変性より

$$\begin{aligned}
\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\
\langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= -\langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle
\end{aligned} \tag{8.288}$$

(8.288) より

$$\rho_0^3(\mathbf{k}) = \rho_1^0(\mathbf{k}) = 0 \tag{8.289}$$

を得る. tu_{2y} , D_{4h} 不変性より $\rho_0^0(\mathbf{k})$, $\rho_1^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する実関数であることが示される.
 $\rho_0^0(\mathbf{k})$, $\rho_1^3(\mathbf{k})$ の D_{4h} 対称性を考慮すると, SCF 条件 (8.48) より 平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\ H_m^1 &= b \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}_{s'}} \end{aligned} \quad (8.290)$$

ここで実数 a, b は次の SCF 条件で定まる.

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ b &= -\{(U - 4J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{aligned} \quad (8.291)$$

ここで $\rho_1^3(\mathbf{k})$ が実数であること, (8.275) から導かれる $\rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = \rho_1^3(\mathbf{k})$ を考慮して

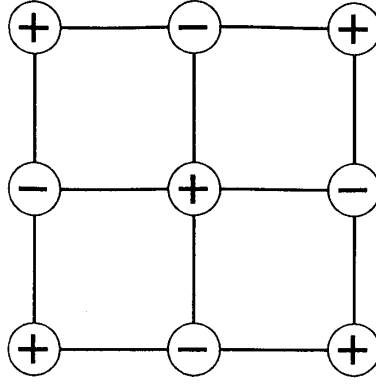
$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &= \sum_{\mathbf{k}}' \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + \sum_{\mathbf{k}}' \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \rho_1^3(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) - \sum_{\mathbf{k}}' \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) = 0 \end{aligned} \quad (8.292)$$

なる関係を用いた.

$\rho_0^0(\mathbf{k})$, $\rho_1^3(\mathbf{k})$ の対称性を用いると, (8.52), (8.56) より次の自由エネルギー F_{HF} , 局所的秩序変数の表式を得る.

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} Y_1^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^3(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) \\ &\quad + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\ d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_\mu &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ s^3(\mathbf{n}) &= \frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \rho_1^3(\mathbf{k}) \\ t^3(\mathbf{n})_\mu &= 0 \end{aligned} \quad (8.293)$$

図 8.12 に $G(MA_{1g}, 1, 1)$ 状態のスピンドensityのパターンを示す. この状態をスピンドensity波:SDW (spin density wave) という. また反強磁性:AF (antiferromagnetism) とも呼ばれる.


 図 8.12: $G(MA_{1g}, 1, 1)$ 状態のスピン密度のパターン.

8.5.2 $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 0)}$

既約表現 $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 0)}$ は 3 次元表現である. その基底を h_1, h_2, h_3 とすると $p \in D_{4h}, T(\mathbf{n}) \in L_1, T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1 = (L_0 - L_1), \phi \in \Phi, t \in \Phi$ の h_i ($i = 1, 2, 3$) への作用は

$$\begin{aligned}
 p \cdot h_i &= h_i \\
 T(\mathbf{n}) \cdot h_i &= h_i \\
 T(\mathbf{m}) \cdot h_i &= -h_i \\
 \bar{\phi} \cdot h_i &= h_i \\
 t \cdot h_i &= h_i \\
 u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= \sum_j R_{ji}(\mathbf{n}, \theta) h_j
 \end{aligned} \tag{8.294}$$

で与えられる. $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$ の場合との違いは h_i に対する t の作用が (+) になるだけである. 従ってこの場合の $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 0)}$ の固定部分群と固定点部分空間として

$$\begin{aligned}
 G(MA_{1g}, 1, 0) &= (E + T(e_1)u_{2x})D_{4h}L_1A(e_3)\mathbf{R} \\
 \text{Fix}(G(MA_{1g}, 1, 0)) &= \{h_3\}_{\mathbf{R}}
 \end{aligned} \tag{8.295}$$

を得る. $\check{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 1)}$ の場合と同様な手法により $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} 表現に属する実数値関数であり, $\rho_1^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} 表現に属する純虚数値関数であることが分かる. 命題 8.1 より

$$\rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\rho_1^3(\mathbf{k}) \tag{8.296}$$

を得る. $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の以上の対称性を考慮すると SCF 条件 (8.48) より平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\
 H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}_s} \sum_{ss'} \gamma(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}_s}
 \end{aligned} \tag{8.297}$$

で与えられる. ここで実数 a, b は SCF 条件

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ ib &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = \{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.298)$$

で定まる. $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の対称性を用いると, (8.52), (8.56) より次の自由エネルギー F_{HF} , 局所的秩序変数の表式を得る.

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} Y_2^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^3(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) \\ &\quad + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\ d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_{\mu} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ s^3(\mathbf{n}) &= 0 \\ t^3(\mathbf{n})_{\mu} &= \frac{1}{2N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.299)$$

ここで $\rho_1^3(\mathbf{k})$ が純虚数のため $t^3(\mathbf{n})_{\mu}$ が純虚数であることに注意されたい. したがってスピン流密度の存在が予想される. 命題 D.1, 命題 D.2, (8.297) より H_m のサイト表示は次のようになる.

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left\{ -\tilde{\mu} a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}s'} + \frac{1}{2} a (a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1)s'} + a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1)s'}) \right. \\ &\quad \left. + a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2)s'} + a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2)s'} \right\} \sigma_{ss'}^0 \\ &\quad + \frac{ib}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \{ (a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} a_{\mathbf{n}s}^{\dagger} a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \sigma_{ss'}^3 \} \end{aligned} \quad (8.300)$$

これより

$$\begin{aligned} h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^0 = \frac{1}{2} a \\ h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^3 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^3 = \frac{ib}{2} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \end{aligned} \quad (8.301)$$

を得る.

$$\begin{aligned} x_0^0(\mathbf{k}) &= a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\ x_1^3 &= ib\gamma(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.302)$$

を (8.279) に代入すると

$$E_0(\mathbf{k}) = \sqrt{(a\gamma(\mathbf{k}))^2 + (b\gamma(\mathbf{k}))^2} = \sqrt{a^2 + b^2} |\gamma(\mathbf{k})| \quad (8.303)$$

これらを (8.280), (8.284) に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) &= \sum'_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) + \sum'_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \rho_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \\ &= \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) (\rho_0^0(\mathbf{k}) - \rho_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q})) \\ &= \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) (u_{\mathbf{k}}^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\ &= -\frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} \frac{a(\gamma(\mathbf{k}))^2}{E_0(\mathbf{k})} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\ &= -\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} |\gamma(\mathbf{k})| (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (8.304)$$

同様にして

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) = \frac{ib}{\sqrt{a^2 + b^2}} \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} |\gamma(\mathbf{k})| (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \quad (8.305)$$

を得る.

$$S \equiv \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} |\gamma(\mathbf{k})| (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \quad (8.306)$$

と定義すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) &= -\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} S \\ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) &= \frac{ib}{\sqrt{a^2 + b^2}} S \end{aligned} \quad (8.307)$$

を得る. これを (8.298) に代入すると

$$\begin{aligned} a &= -2t + (V - 2J) \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} S \\ ib &= V \frac{ib}{\sqrt{a^2 + b^2}} S \end{aligned} \quad (8.308)$$

を得る. (8.308) の第2式より

$$S = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{V} \quad (8.309)$$

となる. これと (8.299) より

$$\begin{aligned} p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = -\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} S = -\frac{a}{V} \\ t^3(\mathbf{n})_1 &= t^3(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{2} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \frac{ib}{V} \end{aligned} \quad (8.310)$$

(8.301) と (8.310) とスピン流密度の表式 (E.6) より

$$\begin{aligned} J^3(\mathbf{n})_1 &= J^3(\mathbf{n})_2 = -\frac{e}{\hbar} \left\{ 2\text{Im} \left[\frac{a}{2} \frac{1}{2} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \frac{ib}{V} \right] + \text{Im} \left[\frac{ib}{2} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \left(-\frac{a}{V} \right) \right] \right\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (8.311)$$

が得られる。従って状態 $G(MA_{1g}, 1, 0)$ はスピンボンドオーダーは複素数であるが、スピン流密度はゼロとなるとなる奇妙な状態である。これを擬スピン流密度波:PSCW(pseudo spin current wave)と呼ぼう。

8.5.3 $\tilde{G}_0^{(MB_{1g}, 1, 0)}$

既約表現 $\tilde{G}_0^{(MB_{1g}, 1, 0)}$ は 3 次元表現で、その基底を h_1, h_2, h_3 とすると、
 $p \in D_{2h}, p_1 \in C_{4z}^+ D_{2h}, T(\mathbf{n}) \in L_1, T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1 = (L_0 - L_1), \phi \in \Phi, t \in \Phi$ の
 h_i ($i = 1, 2, 3$) への作用は

$$\begin{aligned} p \cdot h_i &= h_i \\ p_1 \cdot h_i &= -h_i \\ T(\mathbf{n}) \cdot h_i &= h_i \\ T(\mathbf{m}) \cdot h_i &= -h_i \\ \tilde{\phi} \cdot h_i &= h_i \\ t \cdot h_i &= h_i \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_i &= \sum_j R_{ji}(\mathbf{n}, \theta) h_j \end{aligned} \quad (8.312)$$

で与えられる。 $\tilde{G}_0^{(MA_{1g}, 1, 0)}$ の場合との違いは $p_1 \in C_{4z}^+ D_{2h}$ の h_i に対する作用が $(-)$ になるだけであるので、 $\tilde{G}_0^{(MB_{1g}, 1, 0)}$ の固定部分群と固定点部分空間は

$$\begin{aligned} G(MB_{1g}, 1, 0) &= (E + T(e_1)u_{2x})(E + C_{4z}^+ T(e_1))D_{2h}L_1A(e_3)\mathbf{R} \\ \text{Fix}(G(MB_{1g}, 1, 0)) &= \{h_3\}_{\mathbf{R}} \end{aligned} \quad (8.313)$$

で与えられる。

$G(MA_{1g}, 1, 1)$ の場合と同様な考察により、 $G(MB_{1g}, 1, 0)$ 対称性から $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_{1g} に属する実数値関数、 $\rho_1^3(\mathbf{k})$ は D_{4h} の B_{1g} に属する純虚数値関数で

$$\rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\rho_1^3(\mathbf{k}) \quad (8.314)$$

を満たすことが分かる。 $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の以上の対称性を考慮すると SCF 条件 (8.48) より平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}s} \sum_{ss'} \eta(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \quad (8.315)$$

で与えられる. ここで実数 a, b は SCF 条件

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ ib &= -\{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = \{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.316)$$

で定まる. また (8.52), (8.56) より次の自由エネルギー F_{HF} , 局所的秩序変数の表式を得る.

$$\begin{aligned} F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} Y_3^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^3(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\ &\quad + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) \\ &\quad + f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\ d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ p(\mathbf{n})_\mu &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ s^3(\mathbf{n}) &= 0 \\ t^3(\mathbf{n})_1 &= \frac{1}{2N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) \\ t^3(\mathbf{n})_2 &= -\frac{1}{2N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.317)$$

ここで $\rho_1^3(\mathbf{k})$ が純虚数のため $t^3(\mathbf{n})_\mu$ が純虚数であることに注意されたい. 従ってスピン流密度の存在が予想される. 命題 D.1, 命題 D.2, (8.315) より H_m のサイト表示は

$$\begin{aligned} H_m &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \left\{ -\tilde{\mu} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} + \frac{1}{2} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1)s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1)s'} \right. \\ &\quad \left. + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2)s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2)s'}) \right\} \sigma_{ss'}^0 \\ &\quad + \frac{ib}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{ss'} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \{ (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \sigma_{ss'}^3 \} \end{aligned} \quad (8.318)$$

となる. これより

$$\begin{aligned} h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^0 &= h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^0 = \frac{1}{2}a \\ h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}^3 &= -h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}^3 = \frac{ib}{2} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \end{aligned} \quad (8.319)$$

を得る. (8.317), (8.319), (E.6) より次のスピン流密度を得る.

$$J^3(\mathbf{n})_1 = -J^3(\mathbf{n})_2 = -\frac{e}{2\hbar} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{a\eta(\mathbf{k}) \rho_{1I}^3(\mathbf{k}) + b\gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k})\} \quad (8.320)$$

ここで $\rho_{II}^3(\mathbf{k}) = -i\rho_I^3(\mathbf{k})$ で定義される実数値関数である。図 8.13 に $G(MB_{1g}, 1, 0)$ 状態のスピンの流密度のパターンを示す。これは SCW 状態の一種である。

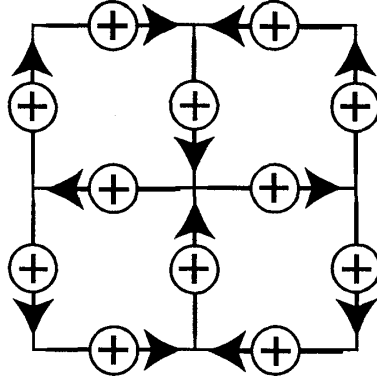


図 8.13: $G(MB_{1g}, 1, 1)$ 状態のスピンの流密度のパターン。

8.5.4 $\check{G}_0^{(ME_u, 1, 1)}$

既約表現 $\check{G}_0^{(ME_u, 1, 1)}$ は $2 \times 3 = 6$ 次元表現であり、その基底を $h_{i\lambda}$ ($i = 1, 2, \lambda = 1, 2, 3$) とする。 $p \in D_{4h}, T(\mathbf{n}) \in L_1, T(\mathbf{m}) \in T(e_1)L_1 = (L_0 - L_1), \phi \in \Phi, t \in \Phi$ の $h_{i\lambda}$ への作用は

$$\begin{aligned} p \cdot h_{i\lambda} &= \sum_{i'=1}^2 h_{i'\lambda} D_{i'i}(p) \\ T(\mathbf{n}) \cdot h_{i\lambda} &= h_{i\lambda} \\ T(\mathbf{m}) \cdot h_{i\lambda} &= -h_{i\lambda} \\ \tilde{\phi} \cdot h_{i\lambda} &= h_{i\lambda} \\ t \cdot h_{i\lambda} &= -h_{i\lambda} \\ u(\mathbf{n}, \theta) \cdot h_{i\lambda} &= \sum_{\mu} R_{\mu\lambda}(\mathbf{n}, \theta) h_{i\mu} \end{aligned} \tag{8.321}$$

で与えられる。ここで $D(p)$ は D_{4h} の E 表現の表現行列である。

$\check{G}_0^{(\Gamma E_u, 1, 1)}$ の場合と同様な考察をすると、 $\check{G}_0^{(ME_u, 1, 1)}$ の固定部分群とその固定点部分空間は

$$\begin{aligned} G(ME_u, 1, 1)_1 &= (E + C_{2y}u_{2y})(E + T(e_1)u_{2x})(E + tu_{2y})C_{2vx}L_1A(e_3)\Phi \\ \text{Fix}(G(ME_u, 1, 1)_1) &= \{h_{13}\}_R \end{aligned} \tag{8.322}$$

$$\begin{aligned} G(ME_u, 1, 1)_2 &= (E + C_{2b}u_{2y})(E + T(e_1)C_{2b})(E + tu_{2y})C_{2va}L_1A(e_3)\Phi \\ \text{Fix}(G(ME_u, 1, 1)_2) &= \{h_{13} + h_{23}\}_R \end{aligned} \tag{8.323}$$

$$\begin{aligned} G(ME_u, 1, 1)_3 &= (E + T(e_1)u_{2z})(E + IC_{2z})(E + tu_{2z})_{II}D_4L_1\Phi \\ \text{Fix}(G(ME_u, 1, 1)_3) &= \{h_{11} + h_{22}\}_R \end{aligned} \tag{8.324}$$

で与えられる。

(1) $G(ME_u, 1, 1)_1$ 状態

H_m は

$$G(ME_u, 1, 1)_1 = (E + C_{2y}u_{2y})(E + T(e_1)u_{2x})(E + tu_{2y})C_{2vx}L_1A(e_3)\Phi \quad (8.325)$$

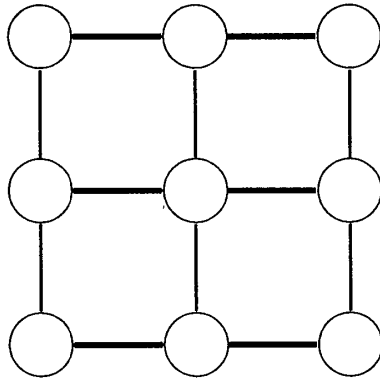
に不変であるので $G(GE_u, 1, 1)_1$ 状態の場合と同様な方法で $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{2h} の A_g に属する実数値関数で, $\rho_1^3(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^3(\mathbf{k})$ は D_{2h} の B_{3u} に属する純虚数値関数 ($\rho_{1I}^3(\mathbf{k})$ は実数値関数) であることを示すことが出来る. 以上の対称性を考慮すると, SCF 条件 (8.48) より平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_m &= H_m^0 + H_m^1 + H_m^2 \\ H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} \{a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}\} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\ H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} \sin k_1 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'} \\ H_m^2 &= c \sum_{\mathbf{k}s} \eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \end{aligned} \quad (8.326)$$

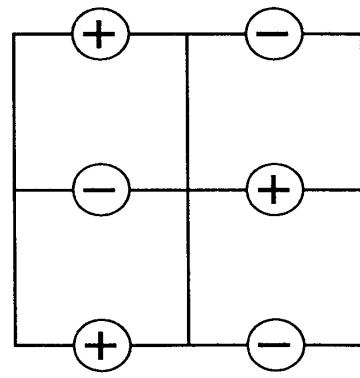
で与えられる. ここで実数 a, b, c は次の SCF 条件で定まる.

$$\begin{aligned} a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ c &= -\{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\ ib &= \{2V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_1^3(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (8.327)$$

H_m^2 は $\check{G}_0^{(ME_u, 1, 1)}$ に属する H_m^1 の出現によって副次的に生ずる誘導される成分である. $\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の対称性と (8.52), (8.56) より, 次の自由エネルギー F_{HF} と局所的秩序変数の表式を得る.



(a) ボンドオーダー



(b) スピンボンドオーダー

図 8.14: $G(ME_u, 1, 1)_1$ 状態の (a) ボンドオーダーと (b) スピンボンドオーダー.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^3 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} Y_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^3(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
 &+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) \\
 &+ f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{\gamma(\mathbf{k}) + \eta(\mathbf{k})\} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{\gamma(\mathbf{k}) - \eta(\mathbf{k})\} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^3(\mathbf{n}) &= 0 \\
 t^3(\mathbf{n})_1 &= -\frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_{1I}^3(\mathbf{k}) \\
 t^3(\mathbf{n})_2 &= 0
 \end{aligned} \tag{8.328}$$

図 8.14 にボンドオーダーとスピンボンドオーダーのパターンを示す. この状態は SBOW である.

(2) $G(ME_u, 1, 1)_2$ 状態

H_m は

$$G(ME_u, 1, 1)_2 = (E + C_{2b}u_{2y})(E + T(\mathbf{e}_1)C_{2b})(E + tu_{2y})C_{2va}L_1A(\mathbf{e}_3)\Phi \tag{8.329}$$

に不変であるので $G(GE_u, 1, 1)_2$ 状態の場合と同様な方法で $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{2ah} の A_g に属する実数値関数で, $\rho_1^3(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^3(\mathbf{k})$ は D_{2ah} の B_{3u} に属する純虚数値関数 ($\rho_{1I}^3(\mathbf{k})$ は実数値関数) であることを示すことが出来る. 以上の対称性を考慮すると, SCF 条件 (8.48) より平均場ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}_s} \{a\gamma(\mathbf{k}) - \bar{\mu}\} a_{\mathbf{k}_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_s} \\
 H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (\sin k_1 + \sin k_2) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}_{s'}}
 \end{aligned} \tag{8.330}$$

で与えられる. ここで実数 a, b は次の SCF 条件で定まる.

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 ib &= \{V/N\} \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \rho_1^3(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.331}$$

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の対称性と (8.52), (8.56) より, 次の自由エネルギー F_{HF} と局所的秩序変数の表式を

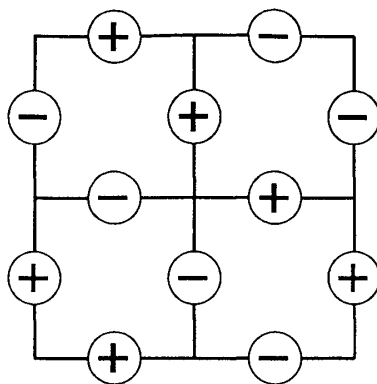


図 8.15: $G(ME_u, 1, 1)_2$ 状態のスピンボンドオーダーのパターン.

得る.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=4}^5 Y_i^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^3(\mathbf{k}) \rho_1^3(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \\
 &+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) \\
 &+ f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^3(\mathbf{n}) &= 0 \\
 t^3(\mathbf{n})_1 &= t^3(\mathbf{n})_2 = -\frac{1}{2N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} (\sin k_1 + \sin k_2) \rho_{1I}^3(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.332}$$

図 8.15 にこの SBOW のスピンボンドオーダーのパターンを示す.

$G(ME_u, 1, 1)_3$ 状態

H_m は

$$G(ME_u, 1, 1)_3 = (E + T(e_1)u_{2z})(E + IC_{2z})(E + tu_{2z})_{II} D_4 L_1 \Phi \tag{8.333}$$

に不変であるので $G(\Gamma E_u, 1, 1)_3$ 状態の場合と同様な方法で $\rho_0^0(\mathbf{k})$ は D_{4h} の A_g に属する実数値関数で, $\rho_1^1(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^1(\mathbf{k})$, $\rho_1^2(\mathbf{k}) = i\rho_{1I}^2(\mathbf{k})$ は D_{4h} の E_u に属する純虚数値関数 ($\rho_{1I}^1(\mathbf{k})$, $\rho_{1I}^2(\mathbf{k})$ は実数値関数) であることを示すことが出来る. 以上の対称性を考慮すると, SCF 条件 (8.48) より平均場

ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H_m &= H_m^0 + H_m^1 \\
 H_m^0 &= \sum_{\mathbf{k}s} \{a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}\} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} \\
 H_m^1 &= ib \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} (\sin k_1 \sigma_{ss'}^1 + \sin k_2 \sigma_{ss'}^2) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'}
 \end{aligned} \tag{8.334}$$

で与えられる. ここで実数 a, b は次の SCF 条件で定まる.

$$\begin{aligned}
 a &= -2t - \{(V - 2J)/N\} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 ib &= \{2V/N\} \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_1^1(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.335}$$

(8.334) の平均場ハミルトニアン H_m は次のように対角化される.

$$\begin{aligned}
 H_m &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_{l=+-} A_{\mathbf{k}l}^\dagger X_l(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}l} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_{l=+-} A_{\mathbf{k}l}^\dagger U_l(\mathbf{k}) U_l^\dagger(\mathbf{k}) X_l(\mathbf{k}) U_l(\mathbf{k}) U_l^\dagger(\mathbf{k}) A_{\mathbf{k}l} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}}' \sum_{l=+-} \alpha_{\mathbf{k}l}^\dagger E(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}l}
 \end{aligned} \tag{8.336}$$

ここで

$$\begin{aligned}
 X_+(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} & -ib(\sin k_1 - i \sin k_2) \\ ib(\sin k_1 + i \sin k_2) & a\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) - \tilde{\mu} \end{pmatrix} \\
 X_-(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} & -ib(\sin k_1 + i \sin k_2) \\ ib(\sin k_1 - i \sin k_2) & a\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) - \tilde{\mu} \end{pmatrix} \\
 A_{\mathbf{k}+}^\dagger &= (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger) \\
 A_{\mathbf{k}-}^\dagger &= (a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger) \\
 E(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & E_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 E_1(\mathbf{k}) &= -E_0(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\
 E_2(\mathbf{k}) &= E_0(\mathbf{k}) - \tilde{\mu} \\
 E_0 &= \{(a\gamma(\mathbf{k}))^2 + b^2(\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)\}^{1/2}
 \end{aligned} \tag{8.337}$$

$$\begin{aligned}
U_+(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\
U_-(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\
u_{\mathbf{k}} &= \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{a\gamma(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{1/2} \\
v_{\mathbf{k}} &= -e^{i\phi(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{a\gamma(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \right) \right]^{1/2} \\
\alpha_{\mathbf{k}+}^\dagger &= (\alpha_{1\mathbf{k}+}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}+}^\dagger) = A_{\mathbf{k}+}^\dagger U_+(\mathbf{k}) \\
\alpha_{\mathbf{k}-}^\dagger &= (\alpha_{1\mathbf{k}-}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}-}^\dagger) = A_{\mathbf{k}-}^\dagger U_-(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{8.338}$$

ここで $e^{i\phi(\mathbf{k})}$ は $ib(\sin k_1 + i \sin k_2) = e^{i\phi(\mathbf{k})} \{b^2(\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2)\}^{1/2}$ の位相因子である. $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ は次の条件を満たす.

$$\begin{aligned}
u_{\mathbf{k}}^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 &= 1 \\
u_{\mathbf{k}}^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 &= -\frac{a\gamma(\mathbf{k})}{E_0(\mathbf{k})} \\
u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} &= -\frac{ib(\sin k_1 + i \sin k_2)}{2E_0(\mathbf{k})} \\
u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^* &= -\frac{-ib(\sin k_1 - i \sin k_2)}{2E_0(\mathbf{k})}
\end{aligned} \tag{8.339}$$

(8.336), (8.338) より

$$\begin{aligned}
\langle \alpha_{1\mathbf{k}+}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}+} \rangle &= \langle \alpha_{1\mathbf{k}-}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}-} \rangle = \{ \exp(\beta E_1(\mathbf{k})) + 1 \}^{-1} \equiv f_1(\mathbf{k}) \\
\langle \alpha_{2\mathbf{k}+}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}+} \rangle &= \langle \alpha_{2\mathbf{k}-}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}-} \rangle = \{ \exp(\beta E_2(\mathbf{k})) + 1 \}^{-1} \equiv f_2(\mathbf{k}) \\
\langle \alpha_{i\mathbf{k}+}^\dagger \alpha_{j\mathbf{k}-} \rangle &= \langle \alpha_{i\mathbf{k}-}^\dagger \alpha_{j\mathbf{k}+} \rangle = 0, \quad i, j = 1, 2
\end{aligned} \tag{8.340}$$

を得る. (8.336), (8.338) より

$$\begin{aligned}
(a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger) &= A_{\mathbf{k}+}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}+}^\dagger U_+(\mathbf{k})^\dagger = (\alpha_{1\mathbf{k}+}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}+}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}}^* \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \\
(a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger) &= A_{\mathbf{k}-}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}-}^\dagger U_-(\mathbf{k})^\dagger = (\alpha_{1\mathbf{k}-}^\dagger, \alpha_{2\mathbf{k}-}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{8.341}$$

(8.340), (8.341) より

$$\begin{aligned}
\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = u_{\mathbf{k}}^2 f_1(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 f_2(\mathbf{k}) \\
\langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow} \rangle &= \langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow} \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2 f_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 f_2(\mathbf{k}) \\
\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow} \rangle &= u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\
\langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle &= u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*(f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\
\langle a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow} \rangle &= -u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*(f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\
\langle a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle &= -u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k}))
\end{aligned} \tag{8.342}$$

を得る. これより

$$\begin{aligned}
 \rho_0^0(\mathbf{k}) &= u_{\mathbf{k}}^2 f_1(\mathbf{k}) + |v_{\mathbf{k}}|^2 f_2(\mathbf{k}) \\
 \rho_0^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) &= |v_{\mathbf{k}}|^2 f_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 f_2(\mathbf{k}) \\
 \rho_1^1(\mathbf{k}) &= \frac{ic \sin k_1}{2E_0(\mathbf{k})} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k})) \\
 \rho_1^2(\mathbf{k}) &= \frac{ic \sin k_2}{2E_0(\mathbf{k})} (f_1(\mathbf{k}) - f_2(\mathbf{k}))
 \end{aligned} \tag{8.343}$$

$\rho_0^0(\mathbf{k}), \rho_1^3(\mathbf{k})$ の対称性と (8.52), (8.56) より, 次の自由エネルギー F_{HF} と局所的秩序変数の表式を得る.

$$\begin{aligned}
 F_{\text{HF}} &= \sum_{\mathbf{k}} 2(-2\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{i=1}^2 W_i^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_0^0(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}') \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \{Y_4^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^1(\mathbf{k}) \rho_1^1(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) + Y_5^Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rho_1^2(\mathbf{k}) \rho_1^2(\mathbf{k}' + \mathbf{Q})\} \\
 &+ \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \{f_1(\mathbf{k}) \log f_1(\mathbf{k}) + (1 - f_1(\mathbf{k})) \log(1 - f_1(\mathbf{k})) \\
 &+ f_2(\mathbf{k}) \log f_2(\mathbf{k}) + (1 - f_2(\mathbf{k})) \log(1 - f_2(\mathbf{k}))\} \\
 d(\mathbf{n}) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 p(\mathbf{n})_1 &= p(\mathbf{n})_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \rho_0^0(\mathbf{k}) \\
 s^\lambda(\mathbf{n}) &= 0, \quad \lambda = 1, 2, 3 \\
 t^1(\mathbf{n})_1 &= t^2(\mathbf{n})_2 = -\frac{1}{N} \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}) \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 \rho_{1I}^1(\mathbf{k})
 \end{aligned} \tag{8.344}$$

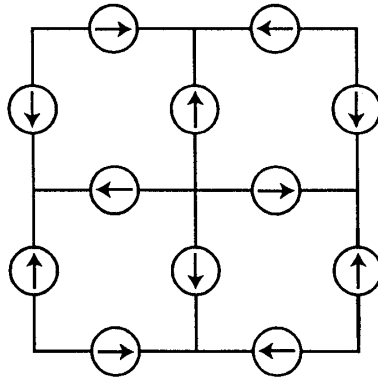


図 8.16: $G(ME_u, 1, 1)_3$ 状態のスピンボンドオーダーのパターン. $\circ$ 内の矢印 $\rightarrow, \uparrow$ は x, y 方向にスピンの向いていることを示す

図 8.16 にスピンボンドオーダーのパターンを示す. この状態は SBOW であるがスピンの向きが 1 軸的ではなく, x, y の 2 次元的な向きを持っている

8.6 まとめ

第 8 章で超伝導以外の状態でオーダーリングベクトルが Γ 点 ($\mathbf{k} = (0, 0)$) または M 点 ($\mathbf{k} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$) である多様な対称性の破れた状態を導き出した. これらを表 8.3, 表 8.4 にまとめた.

これらの導出で既約表現の固定部分群の構造が決定的な役割を果たした. 既約表現から固定部分群を見出す問題は純粋に数学としての群論の問題であって, 物理としての模型には依存しない. 模型が規定するのはどの既約表現が現れるか? という点である.

オーダーリングベクトルを Γ 点, M 点に限った場合, 空間群 $P = D_{4h}L(e_1, e_2)$ の既約表現は点群 D_{4h} の既約表現で規定される. 第 8 章で考察した Hubbard 模型では D_{4h} の既約表現として A_{1g}, B_{1g}, E_u の 3 種類だけ問題になった. 模型に依存して A_{1g}, B_{1g}, E_u 以外の既約表現が現れる可能性がある.

またここでは考えなかった Γ, M 点以外のオーダーリングベクトルをもつ場合, 空間群 P の既約表現 $\check{P}$ の次元がより高くなり, それによる G_0 の既約表現 $\check{G}_0 = \check{P} \otimes \check{S}^{(\mu)} \otimes \check{R}^{(\nu)}$ の固定部分群を求めることはより複雑になる. その場合第 2.3 節 (その 1 p.529) の定理 2.4 等も使いながら固定部分群を求めることになる.

スピン回転群 S の既約表現は恒等表現 $\check{S}^{(0)}$ (シングレット状態に対応する) と $\check{S}^{(1)}$ (磁性状態に対応する) が現れる. 超伝導以外の状態では, $\mathbf{R} = \Phi + t\Phi$ の既約表現は Φ の恒等表現 $\check{\Phi}^{(0)}$ に対応する $\check{R}^{(0)}$ (時間反転対称性を保存する) と $\check{R}^{(1)}$ (時間反転対称性をやぶる) が現れる.

一般的に述べると空間群の既約表現を $\check{P}$ とすると, $\check{S} \otimes \check{R}$ の各表現から次の状態が導かれる.

- (1) $\check{P} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(0)} \implies$ 電荷密度波 (CDW), ボンドオーダー波 (BOW)
- (2) $\check{P} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(1)} \implies$ 電流密度波 (CCW)
- (3) $\check{P} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(0)} \implies$ スピン流密度波 (SCW)
- (4) $\check{P} \otimes \check{S}^{(1)} \otimes \check{R}^{(1)} \implies$ スピン密度波 (SDW), スピンボンドオーダー波 (SBOW)
- (5) $\check{P} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(2)} \implies$ スピンシングレット超伝導状態
- (6) $\check{P} \otimes \check{S}^{(0)} \otimes \check{R}^{(2)} \implies$ スピントリプレット超伝導状態

以上の各状態は P の既約表現 $\check{P}^{(j)}$ によってさらに細分化される. 各既約表現の固定部分群に対応した平均場ハミルトニアン H_m が求まる. これらのなかでどの状態が最も安定であるか? は群論的考察だけでは決定できない. それは t, U, V, J 等のパラメーターや電子数に依存しており, 数値計算の結果で判定する必要がある. 群論的手法は可能な状態のリストを作り, その状態の平均場ハミルトニアンの標準型を与える. 数値計算もこれに基づいてやればより容易になる. その 3 では上記の (5) (6) に対応する超伝導状態, 縮退 Hubbard 模型の対称性の破れた状態, ボルテックス状態, 強磁性, 反強磁性秩序存在下での超伝導状態について解説する予定である.

状態	固定部分群	$H_m^1(k)_{ss'}$
$G(\Gamma A_{1g}, 0, 0)$: 正常状態	$D_{4h} L_0 \mathbf{SR}$	0
$G(\Gamma B_{1g}, 0, 0)$: BOW	$D_{2h} L_0 \mathbf{SR}$	$b\eta(k)a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}s}$
$G(MA_{1g}, 0, 0)$: CDW	$D_{4h} L_1 \mathbf{SR}$	$ba_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(MB_{1g}, 0, 1)$: CCW	$(E + tT(e_1))(E + T(e_1)C_{4z}^+)D_{2h} L_1 \mathbf{S}\Phi$	$ib\eta(k)a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(ME_u, 0, 0)_1$: BOW	$(E + T(e_1)C_{2z})C_{2vx} L_1 \mathbf{SR}$	$ib \sin k_1 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}s'}^{**}$
$G(ME_u, 0, 0)_2$: BOW	$(E + T(e_1)C_{2z})C_{2va} L_1 \mathbf{SR}$	$ib(\sin k_1 + \sin k_2)a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^0 a_{\mathbf{k}s'}$

$$H_m^0 = \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}$$

$$H_m = H_m^0 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} H_m^1(k)_{ss'}$$

$$^{**} \text{の場合 } H_m = H_m^0 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} H_m^1(k)_{ss'} + c \sum_{\mathbf{k}s} \eta(k) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}$$

$$C_{2vx} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\}$$

$$C_{2va} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\}$$

表 8.3: 非磁性状態の固定部分群と平均場ハミルトニアン

状態	固定部分群	$H_m^1(k)_{ss'}$
$G(\Gamma A_{1g}, 1, 1)$: FM	$M(e_2)D_{4h} L_0 A(e_3)\Phi$	$(b\gamma(k) - \mu_1)a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(\Gamma B_{1g}, 1, 1)$: SBOW	$M(e_2)(E + C_{4z}^+ u_{2x})D_{2h} L_0 A(e_3)\Phi$	$b\eta(k)a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(\Gamma E_u, 1, 0)_1$: SCW	$(E + C_{2z} u_{2x})C_{2vx} L_0 A(e_3)\mathbf{R}$	$+b \sin k_1 a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}^{**}$
$G(\Gamma E_u, 1, 0)_2$: SCW	$(E + C_{2z} u_{2x})C_{2va} L_0 A(e_3)\mathbf{R}$	$b(\sin k_1 + \sin k_2)a_{\mathbf{k}s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(\Gamma E_u, 1, 0)_3$: SCW	$(E + Iu_{2z})_{II} D_{4h} L_0 \mathbf{R}$	$b(\sin k_1 \sigma_{ss'}^1 + \sin k_2 \sigma_{ss'}^2)a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'}$
$G(MA_{1g}, 1, 1)$: AF	$M(e_2)T_x D_{4h} L_1 A(e_3)\Phi$	$ba_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(MA_{1g}, 1, 0)$: PSCW	$T_x D_{4h} L_1 A(e_3)\mathbf{R}$	$ib\gamma(k)a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(MB_{1g}, 1, 0)$: SCW	$(E + C_{4z}^+ T(e_1))T_x D_{2h} L_1 A(e_3)\mathbf{R}$	$ib\eta(k)a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(ME_u, 1, 1)_1$: SBOW	$(E + C_{2y} u_{2y})T_x M(e_2)C_{2vx} L_1 A(e_3)\Phi$	$ib \sin k_1 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}^{**}$
$G(ME_u, 1, 1)_2$: SBOW	$(E + C_{2b} u_{2y})T_x M(e_2)C_{2va} L_1 A(e_3)\Phi$	$ib(\sin k_1 + \sin k_2)a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 a_{\mathbf{k}s'}$
$G(ME_u, 1, 1)_3$: SBOW	$(E + T(e_1)u_{2z})(E + Iu_{2z})M(e_3)_{II} D_4 L_1 \Phi$	$ib(\sin k_1 \sigma_{ss'}^1 + \sin k_2 \sigma_{ss'}^2)a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'}$

$$H_m^0 = \sum_{\mathbf{k}s} (a\gamma(\mathbf{k}) - \tilde{\mu}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}$$

$$H_m = H_m^0 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} H_m^1(k)_{ss'}$$

$$^{**} \text{の場合 } H_m = H_m^0 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ss'} H_m^1(k)_{ss'} + c \sum_{\mathbf{k}s} \eta(k) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s}$$

$$C_{2vx} = \{E, C_{2x}, IC_{2z}, IC_{2y}\}$$

$$C_{2va} = \{E, C_{2a}, IC_{2z}, IC_{2b}\}$$

$$T_x = (E, T(e_1)u_{2x})$$

$$M(e_i) = (E, tu_{2i})$$

表 8.4: 磁性状態の固定部分群と平均場ハミルトニアン

付 録 A 定理 6.2 の証明

HFB 自由エネルギーの表式 (6.73a) を使い

$$\begin{aligned} F(Z_g) &= \langle \mathcal{H} \rangle_{Z_g} + \frac{1}{2\beta} \text{tr}[R(Z_g) \log R(Z_g) + (1_{2N} - R(Z_g)) \log(1_{2N} - R(Z_g))] \\ &= F(Z) = \langle \mathcal{H} \rangle_Z + \frac{1}{2\beta} \text{tr}[R(Z) \log R(Z) + (1_{2N} - R(Z)) \log(1_{2N} - R(Z))] \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

を示せばよい. まず次の等式を準備しておく. $g \in G_0$ の条件 (6.98) の第 1 式の左から $g_{li}^\dagger$, 右から g_{jk} を掛けて i, j につき和を取ると

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \sum_{i'j'} g_{li}^\dagger g_{ii'} (T_{i'j'} - \mu \delta_{i'j'})^{(*)} g_{j'j}^\dagger g_{jk} &= \sum_{ij} g_{li}^\dagger (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) g_{jk} \\ (T_{lk} - \mu \delta_{lk})^{(*)} &= \sum_{ij} g_{li}^\dagger (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) g_{jk} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

を得る. また (6.98) の第 2 式の左から $g_{li}^\dagger g_{tn}^\dagger$, 右から $g_{jk} g_{ms}$ をかけて i, j, m, n で和を取ると,

$$\begin{aligned} \sum_{ijmn} \sum_{i'j'm'n'} g_{li}^\dagger g_{ii'} g_{tn}^\dagger g_{nn'} \langle i'n' | V | j'm' \rangle^{(*)} g_{j'j}^\dagger g_{jk} g_{m'm}^\dagger g_{ms} &= \sum_{ijmn} g_{li}^\dagger g_{tn}^\dagger \langle in | V | jm \rangle g_{jk} g_{ms} \\ \langle lt | V | ks \rangle^{(*)} &= \sum_{ijmn} g_{li}^\dagger g_{tn}^\dagger \langle in | V | jm \rangle g_{jk} g_{ms} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

を得る. また (6.6) と ρ のエルミート性, λ の反対称性を使うと

$$\begin{aligned} [\sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \rho_{ji}]^* &= \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij})^* \rho_{ji}^* \\ &= \sum_{ij} (T_{ji} - \mu \delta_{ji}) \rho_{ij} \\ &= \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) \rho_{ji} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} [\sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \rho_{ji} \rho_{mn}]^* &= \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle^* \rho_{ji}^* \rho_{mn}^* \\ &= \sum_{ijmn} \langle jm | V | in \rangle \rho_{ij} \rho_{nm} \\ &= \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \rho_{ji} \rho_{mn} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned}
 [\sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{ni}^\dagger \lambda_{jm}]^* &= \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle^* (\lambda_{ni}^*)^\dagger (\lambda_{jm})^* \\
 &= \sum_{ijmn} \langle jm | V | in \rangle (\lambda_{mj}^\dagger (\lambda)_{in} \\
 &= \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \lambda_{ni}^\dagger \lambda_{jm} \quad (A.6)
 \end{aligned}$$

が得られる。(6.67)の表式より

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{H} \rangle_{Z_g} &= \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) (\rho_g)_{ji} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \{ (\rho_g)_{ji} (\rho_g)_{mn} - (\rho_g)_{mi} (\rho_g)_{jn} + (\lambda_g)_{ni}^\dagger (\lambda_g)_{jm} \} \quad (A.7)
 \end{aligned}$$

(6.127)より

$$\begin{aligned}
 \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) (\rho_g)_{ji} &= \sum_{ij} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) (g \rho^{(*)} g^\dagger)_{ji} \\
 &= \sum_{ij} \sum_{kl} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) g_{jk} \rho_{kl}^{(*)} g_{li}^\dagger \\
 &= \sum_{kl} \sum_{ij} g_{li}^\dagger (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) g_{jk} \rho_{kl}^{(*)} \\
 &= \sum_{kl} (T_{lk} - \mu \delta_{lk})^{(*)} \rho_{kl}^{(*)} \\
 &= [\sum_{kl} (T_{lk} - \mu \delta_{lk}) \rho_{kl}]^{(*)} \\
 &= \sum_{kl} (T_{lk} - \mu \delta_{lk}) \rho_{kl} \quad (A.8)
 \end{aligned}$$

を得る。ここで第4の等号は(A.2)を使い、最後の等号は(A.4)を使った。

また(A.3)および(A.5)を使って(A.7)の第二項は次式のようにかける。

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (\rho_g)_{ji} (\rho_g)_{mn} &= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (g \rho^{(*)} g^\dagger)_{ji} (g \rho^{(*)} g^\dagger)_{mn} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \sum_{klst} \langle in | V | jm \rangle g_{jk} \rho_{kl}^{(*)} g_{li}^\dagger g_{ms} \rho_{st}^{(*)} g_{tn}^\dagger \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{klst} \{ \sum_{ijmn} g_{li}^\dagger g_{tn}^\dagger \langle in | V | jm \rangle g_{jk} g_{ms} \} \rho_{kl}^{(*)} \rho_{st}^{(*)} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{klst} \langle lt | V | ks \rangle^{(*)} \rho_{kl}^{(*)} \rho_{st}^{(*)} \\
 &= \{ \frac{1}{2} \sum_{klst} \langle lt | V | ks \rangle \rho_{kl} \rho_{st} \}^{(*)} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{klst} \langle lt | V | ks \rangle \rho_{kl} \rho_{st} \quad (A.9)
 \end{aligned}$$

同様に(A.7)の第3項は

$$-\frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (\rho_g)_{mi} (\rho_g)_{jn} = -\frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle \rho_{mi} \rho_{jn} \quad (A.10)$$

となることが示される. (A.7) の第4項は (A.6) を使ってつぎのようになる.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (\lambda_g)_{ni}^\dagger (\lambda_g)_{jm} &= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (g\lambda^{(*)}g^t)_{ni}^\dagger (g\lambda^{(*)}g^t)_{jm} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \langle in | V | jm \rangle (g^*(\lambda^{(*)})^\dagger g^\dagger)_{ni} (g\lambda^{(*)}g^t)_{jm} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{ijmn} \sum_{lkst} \langle in | V | jm \rangle g_{nk}^* (\lambda^{(*)})_{kl}^\dagger g_{li}^\dagger g_{js} (\lambda_{st}^{(*)} g_{tm}^t) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{lkst} \left\{ \sum_{ijmn} g_{li}^\dagger g_{kn}^\dagger \langle in | V | jm \rangle g_{js} g_{mt} \right\} (\lambda^{(*)})_{kl}^\dagger \lambda_{st}^{(*)} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{lkst} \langle lk | V | st \rangle^{(*)} (\lambda^{(*)})_{kl}^\dagger \lambda_{st}^{(*)} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{lkst} \langle lk | V | st \rangle (\lambda)_{kl}^\dagger \lambda_{st} \tag{A.11}
 \end{aligned}$$

したがって

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{Z_g} = \langle \mathcal{H} \rangle_Z \tag{A.12}$$

が示された. また (6.125) より

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{2\beta} \text{tr}[R(Z_g) \log R(Z_g) + (1_{2N} - R(Z_g)) \log(1_{2N} - R(Z_g))] \\
 &= \frac{1}{2\beta} \text{tr}[\tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger \log(\tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger) + (1_{2N} - \tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger) \log(1_{2N} - \tilde{g} R(Z)^{(*)} \tilde{g}^\dagger)] \\
 &= \frac{1}{2\beta} \text{tr}[R(Z)^{(*)} \log R(Z)^{(*)} + (1_{2N} - R(Z)^{(*)}) \log(1_{2N} - R(Z)^{(*)})] \\
 &= \frac{1}{2\beta} \text{tr}[R(Z) \log R(Z) + (1_{2N} - R(Z)) \log(1_{2N} - R(Z))] \tag{A.13}
 \end{aligned}$$

を得る. 最後の等式は $R(Z)$ のユニタリー性とユニタリー行列 A に対して $\text{tr}(A \log A)$ が実数であることを使った. ■

付 録 B D_{4h} の既約表現行列

D_{4h}	E	C_{4z}^+	C_{2z}	C_{4z}^-	基底関数
A_{1g}	1	1	1	1	$1, \cos k_1 + \cos k_2, \cos k_3$
A_{2g}	1	1	1	1	$f_{A_{2g}}(\mathbf{k})$
B_{1g}	1	-1	1	-1	$(\cos k_1 - \cos k_2)$
B_{2g}	1	-1	1	-1	$\sin k_1 \sin k_2$
E_g	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\{-\sin k_3 \sin k_2, \sin k_3 \sin k_2\}$
D_{4h}	C_{2x}	C_{2y}	C_{2a}	C_{2b}	
A_{1g}	1	1	1	1	
A_{2g}	-1	-1	-1	-1	
B_{1g}	1	1	-1	-1	
B_{2g}	-1	-1	1	1	
E_g	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	
D_{4h}	I	$IC_{4h}^+ = S_{4z}^-$	$IC_{2z} = \sigma_z$	$IC_{4z}^+ = S_{4z}^+$	
A_{1g}	1	1	1	1	
A_{2g}	1	1	1	1	
B_{1g}	1	-1	1	-1	
B_{2g}	1	-1	1	-1	
E_g	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	
D_{4h}	$IC_{2x} = \sigma_x$	$IC_{2y} = \sigma_y$	$IC_{2a} = \sigma_{da}$	$IC_{2b} = \sigma_{db}$	
A_{1g}	1	1	1	1	
A_{2g}	-1	-1	-1	-1	
B_{1g}	1	1	-1	-1	
B_{2g}	-1	-1	1	1	
E_g	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	

基底関数

$$f_{A_{2g}}(\mathbf{k}) = \sin k_1 \sin k_2 (\cos k_1 - \cos k_2)$$

 表 B.1: D_{4h} の偶 (gerade) 既約表現行列.

D_{4h}	E	C_{4z}^+	C_{2z}	C_{4z}^-	基底関数
A_{1u}	1	1	1	1	$f_{1u}(\mathbf{k})$
A_{2u}	1	1	1	1	$\sin k_3$
B_{1u}	1	-1	1	-1	$\sin k_1 \sin k_2 \sin k_3$
B_{2u}	1	-1	1	-1	$f_{B_{2u}}(\mathbf{k})$
E_u	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\{\sin k_1, \sin k_2\}$
D_{4h}	C_{2x}	C_{2y}	C_{2a}	C_{2b}	
A_{1u}	1	1	1	1	
A_{2u}	-1	-1	-1	-1	
B_{1u}	1	1	-1	-1	
B_{2u}	-1	-1	1	1	
E_u	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	
D_{4h}	I	$IC_{4h}^+ = S_{4z}^-$	$IC_{2z} = \sigma_z$	$IC_{4z}^+ = S_{4z}^+$	
A_{1u}	-1	-1	-1	-1	
A_{2u}	-1	-1	-1	-1	
B_{1u}	-1	1	-1	1	
B_{2u}	-1	1	-1	1	
E_u	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	
D_{4h}	$IC_{2x} = \sigma_x$	$IC_{2y} = \sigma_y$	$IC_{2a} = \sigma_{da}$	$IC_{2b} = \sigma_{db}$	
A_{1u}	-1	-1	-1	-1	
A_{2u}	1	1	1	1	
B_{1u}	-1	-1	1	1	
B_{2u}	1	1	-1	-1	
E_u	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	

基底関数

$$f_{A_{1u}} = \sin k_1 \sin k_2 \sin k_3 (\cos k_1 - \cos k_2)$$

$$f_{B_{2u}} = \sin k_3 (\cos k_1 - \cos k_2)$$

表 B.2: D_{4h} の奇 (ungerade) 既約表現行列.

付 録 C (7.100) の証明

証明. Cornwell による方法²²⁾に沿って証明する. $\mathbf{n}$ 軸の周りの角 θ の 3 次元回転 $R(\mathbf{n}, \theta)$ で, 3 次元実空間 $\{e_1, e_2, e_3\}_R$ の基底 $\{e_1, e_2, e_3\}$ が $\{e'_1, e'_2, e'_3\}$ に移動するものとする. すなわち

$$e'_j = \sum_{i=1}^3 e_i R(\mathbf{n}, \theta)_{ij}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (\text{C.1})$$

e_i との内積を取って

$$R(\mathbf{n}, \theta)_{ij} = e_i \cdot e'_j, \quad j, i = 1, 2, 3 \quad (\text{C.2})$$

を得る. まず e_j が $\mathbf{n}$ に一致しない場合を考える. l_j, m_j を次のように定義する.

$$l_j = \frac{\mathbf{n} \times e_j}{|\mathbf{n} \times e_j|} \quad (\text{C.3})$$

$$m_j = l_j \times \mathbf{n} = \frac{(\mathbf{n} \times e_j) \times \mathbf{n}}{|\mathbf{n} \times e_j|} = \frac{e_j - (e_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}}{|\mathbf{n} \times e_j|}$$

ここでベクトル積の公式

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \quad (\text{C.4})$$

を使った. (C.4) を使うと (C.3) より

$$\begin{aligned} m_j \times l_j &= \mathbf{n} \\ l_j \times \mathbf{n} &= m_j \\ \mathbf{n} \times m_j &= l_j \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

を得る. こうして $m_j, l_j, \mathbf{n}$ は互いに直交する単位ベクトルで右手系をなす. (C.3) の第 2 式の最後の表式を使うと e_j は m_j と $\mathbf{n}$ で張られる平面上にあることが分かる. したがって

$$e_j = (e_j \cdot m_j)m_j + (e_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (\text{C.6})$$

と書くことが出来る. ベクトル e_j を $\mathbf{n}$ 軸の周りに θ 回転して e'_j となるとすると, $(e_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ は不変であるので

$$e'_j = (e_j \cdot m_j)m_j \cos \theta + (e_j \cdot m_j)l_j \sin \theta + (e_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (\text{C.7})$$

を得る. 公式

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \quad (\text{C.8})$$

を使うと

$$\begin{aligned} |\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j|^2 &= (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j) \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j) \\ &= 1 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_j)^2 \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

を得る. したがって

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{m}_j &= \frac{\mathbf{e}_j \cdot (\mathbf{e}_j - (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n})}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j|} = \frac{1 - (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{n})^2}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j|} \\ &= |\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j| \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

が得られる. (C.6) より

$$(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{m}_j)\mathbf{m}_j = \mathbf{e}_j - (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (\text{C.11})$$

を得る. (C.3) の第1式と (C.10) より

$$(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{m}_j)\mathbf{l}_j = \mathbf{n} \times \mathbf{e}_j \quad (\text{C.12})$$

を得る. (C.11) と (C.12) を (C.7) に代入すると

$$\mathbf{e}'_j = \{\mathbf{e}_j - (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}\} \cos \theta + (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j) \sin \theta + (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (\text{C.13})$$

を得る. (C.2) と (C.13) より

$$\begin{aligned} R(\mathbf{n}, \theta)_{ij} &= \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_j \\ &= \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j \cos \theta + (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{n})(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n})(1 - \cos \theta) + \mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j) \sin \theta \\ &= \delta_{ij} \cos \theta + n_i n_j (1 - \cos \theta) - \sin \theta \sum_k \epsilon_{ijk} n_k \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

最後の等号は

$$\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_j) = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_i) = -\mathbf{n} \cdot (\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j) = -\sum_k \epsilon_{ijk} n_k \quad (\text{C.15})$$

を使った.

$\mathbf{e}_j$ が $\mathbf{n}$ に一致する場合 $\mathbf{e}'_j = \mathbf{e}_j$ となる. したがって

$$R(\mathbf{n}, \theta)_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_j = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (\text{C.16})$$

となり (C.14) と一致する. ■

付 録 D 電流密度演算子

Hartree-Fock 近似での電流密度演算子を求める.²³⁾ 非磁性状態の HF ハミルトニアンをサイト表示で

$$H_m = \sum_{mn} \sum_s h_{mn}^0 a_{ms}^\dagger a_{ns} \quad (\text{D.1})$$

与えられているものとする. ここで h_{mn}^0 は $m = n$ または m と n が互いに最近接サイトにあるときのみゼロでない値を持つ. 電荷密度演算子

$$\hat{\rho}(n) = \sum_s a_{ns}^\dagger a_{ns} \quad (\text{D.2})$$

に対する Heisenberg の運動方程式は

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(n)}{\partial t} = [H_m, \hat{\rho}(n)] = \sum_{\tilde{n}s} (h_{n\tilde{n}}^0 a_{ns}^\dagger a_{\tilde{n}s} - h_{\tilde{n}n}^0 a_{\tilde{n}s}^\dagger a_{ns}) \quad (\text{D.3})$$

で与えられる. ここで $\tilde{n}$ についての和は n の最近接サイトについての和を意味する. n と $\tilde{n}$ とのボンドを $n \rightarrow \tilde{n}$ の方向に流れる電流密度演算子 $\hat{j}_{n\tilde{n}}^0$ は電荷保存則

$$-e \frac{\partial \hat{\rho}(n)}{\partial t} = \sum_{\tilde{n}} \hat{j}_{n\tilde{n}}^0 \quad (\text{D.4})$$

が成り立つように定義される. (D.3) と (D.4) より

$$\hat{j}_{n\tilde{n}}^0 = -i\frac{e}{\hbar} \sum_s (h_{n\tilde{n}}^0 a_{ns}^\dagger a_{\tilde{n}s} - h_{\tilde{n}n}^0 a_{\tilde{n}s}^\dagger a_{ns}) \quad (\text{D.5})$$

を得る.

$$\begin{aligned} (h_{n\tilde{n}}^0) &= (h_{\tilde{n}n}^0)^* \\ \langle a_{\tilde{n}s}^\dagger a_{ns} \rangle &= \langle a_{ns}^\dagger a_{\tilde{n}s} \rangle^* \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

より電流密度の平均値 $J_{n\tilde{n}}^0 = \langle \hat{j}_{n\tilde{n}}^0 \rangle$ は

$$J_{n\tilde{n}}^0 = \frac{2e}{\hbar} \sum_s \text{Im}[h_{n\tilde{n}}^0 \langle a_{ns}^\dagger a_{\tilde{n}s} \rangle] \quad (\text{D.7})$$

で与えられる.

ここで電流密度の平均値 $J_{n\tilde{n}}^0$ の計算に有用な等式を挙げておく.

命題 D.1. 次の等式が成立する.

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} \\
 \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \quad (\text{D.8}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'})
 \end{aligned}$$

証明

(D.8) の第 2 式を証明する. (7.3) より

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_2}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}'s'} \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} (e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1-\mathbf{n}')} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1-\mathbf{n}')} \\
 &\quad + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2-\mathbf{n}')} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2-\mathbf{n}')}) a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}'s'} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \quad (\text{D.9})
 \end{aligned}$$

を得て (D.8) の第 2 式を得る. 他の等式も同様に証明できる. ■

同様に次の命題を得る.

命題 D.2. 次の等式が成立する.

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}s'} \\
 \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} \\
 &\quad + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \eta(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} + a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'} \\
 &\quad - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'}) \quad (\text{D.10}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_1 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1s'}) \\
 \sum_{\mathbf{k}} \sin k_2 a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})s}^\dagger a_{\mathbf{k}s'} &= \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2s'} - a_{\mathbf{n}s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2s'})
 \end{aligned}$$

証明

(D.10) の第2式をを証明する. (7.3) より

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) a_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})_s}^\dagger a_{\mathbf{k}_{s'}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \left\{ e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_2}) \right. \\
 &\quad \left. \times e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')} a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}'_{s'}} \right\} \\
 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \left\{ e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}+\mathbf{e}_1-\mathbf{n}')} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{e}_1-\mathbf{n}')} \right. \\
 &\quad \left. + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}+\mathbf{e}_2-\mathbf{n}')} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{e}_2-\mathbf{n}')}) a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}'_{s'}} \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \left\{ e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{n}} (a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_1}_{s'} + a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_1}_{s'} \right. \\
 &\quad \left. + a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_2}_{s'} + a_{\mathbf{n}_s}^\dagger a_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_2}_{s'}) \right\} \tag{D.11}
 \end{aligned}$$

を得て (D.10) の第2式を得る. 他の等式も同様に証明できる. ■

付 録 E スピン流密度演算子

Hartree-Fock 近似でのスピン流密度演算子を求める.²³⁾ 磁性状態の HF ハミルトニアンをサイト表示で

$$H_m = \sum_{mn} \sum_{ss'} (h_{mn}^0 a_{m_s}^\dagger a_{n_s} + \sum_{\lambda=1}^3 h_{mn}^\lambda a_{m_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{n_{s'}}) \quad (\text{E.1})$$

与えられているものとする. ここで h_{mn}^0, h_{mn}^λ は $m = n$ または m と n が互いに最近接サイトにあるときのみゼロでない値を持つ. スピン密度演算子

$$\hat{s}_n^\lambda = \frac{1}{2} \sum_{ss'} a_{n_s}^\dagger \sigma_{ss'}^\lambda a_{n_{s'}} \quad (\text{E.2})$$

に対する Heisenberg の運動方程式は

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \hat{s}_n^\lambda}{\partial t} = [\hat{H}_m, \hat{s}_n^\lambda] = & \frac{1}{2} \sum_m \sum_{ss'} \{ (-h_{nm}^0 a_{n_s}^\dagger a_{m_{s'}} + h_{mn}^0 a_{m_s}^\dagger a_{n_{s'}}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ & + (-h_{nm}^\lambda a_{n_s}^\dagger a_{m_{s'}} + h_{mn}^\lambda a_{m_s}^\dagger a_{n_{s'}}) \sigma_{ss'}^0 \\ & - i \sum_{\mu\nu} \epsilon_{\lambda\mu\nu} (h_{nm}^\mu a_{n_s}^\dagger a_{m_{s'}} + h_{mn}^\mu a_{m_s}^\dagger a_{n_{s'}}) \sigma_{ss'}^\nu \} \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

で与えられる. ここで $\epsilon_{\lambda\mu\nu}$ は (7.101) で定義され, (λ, μ, ν) の置換の符号を表す. $\mathbf{n}$ と $\tilde{\mathbf{n}}$ とのボンドを $\mathbf{n} \rightarrow \tilde{\mathbf{n}}$ の方向に流れるスピンの λ 成分の流れの演算子 $\hat{j}_{\mathbf{n}\tilde{\mathbf{n}}}^\lambda$ はスピンの保存則

$$-e \left(\frac{\partial \hat{s}_n^\lambda}{\partial t} \right) = \sum_{\tilde{\mathbf{n}}} \hat{j}_{\mathbf{n}\tilde{\mathbf{n}}}^\lambda \quad (\text{E.4})$$

より次式で与えられる. ここで $\tilde{\mathbf{n}}$ についての和は $\mathbf{n}$ の最近接サイトについての和を意味する.

$$\begin{aligned} \hat{j}_{\mathbf{n}\tilde{\mathbf{n}}}^\lambda = & -(ie/2\hbar) \sum_{ss'} \{ (-h_{\mathbf{n}\tilde{\mathbf{n}}}^0 a_{n_s}^\dagger a_{\tilde{n}_{s'}} + h_{\tilde{\mathbf{n}}\mathbf{n}}^0 a_{\tilde{n}_s}^\dagger a_{n_{s'}}) \sigma_{ss'}^\lambda \\ & + (-h_{\mathbf{n}\tilde{\mathbf{n}}}^\lambda a_{n_s}^\dagger a_{\tilde{n}_{s'}} + h_{\tilde{\mathbf{n}}\mathbf{n}}^\lambda a_{\tilde{n}_s}^\dagger a_{n_{s'}}) \sigma_{ss'}^0 \\ & - i \sum_{\mu\nu} \epsilon_{\lambda\mu\nu} (h_{\mathbf{n}\tilde{\mathbf{n}}}^\mu a_{n_s}^\dagger a_{\tilde{n}_{s'}} + h_{\tilde{\mathbf{n}}\mathbf{n}}^\mu a_{\tilde{n}_s}^\dagger a_{n_{s'}}) \sigma_{ss'}^\nu \} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

平均場ハミルトニアンのエルミート性 $h_{mn}^0 = (h_{nm}^0)^*$, $h_{mn}^\lambda = (h_{nm}^\lambda)^*$ を用いると $\mathbf{n} \Rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_j$ のスピンの λ 成分の流れは

$$\begin{aligned} J^\lambda(\mathbf{n})_j = \langle \hat{j}_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_j}^\lambda \rangle = & -\frac{e}{\hbar} \{ 2\text{Im}[h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_j}^0 t^\lambda(\mathbf{n})_j] + \text{Im}[h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_j}^\lambda p(\mathbf{n})_j] \\ & + \sum_{\mu\nu} \epsilon_{\lambda\mu\nu} \text{Re}[h_{\mathbf{n}\mathbf{n}+\mathbf{e}_j}^\mu t^\nu(\mathbf{n})_j] \} \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

で与えられる. ここで $\text{Re}A, \text{Im}A$ は A の実数部分, 虚数部分を表す.

参考文献

- [1] D. H. Sattinger, Group Theoretical Methods in Bifurcation Theory, Lecture Notes in Mathematics **762** (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [2] A. Vanderbauwhede, Local Bifurcation and Symmetry, Res. Notes Math. **75** (PitMan, Boston, 1982).
- [3] G. Cicogna, Symmetry breakdown from bifurcations, Lettere al Nuovo Cimento **31** (1981), 600.
- [4] M. Golubitsky and D. G. Schaeffer, Singularities and Groups in Bifurcation Theory, Volume I. (Springer-Verlag, 1984).
- [5] M. Golubitsky, I. Stewart and D. G. Schaeffer, Singularities and Groups in Bifurcation Theory, Volume II. (Springer-Verlag, 1985).
- [6] 高木貞治：解析概論 (岩波書店, 1938)
- [7] 松島与三：多様体入門 (裳華房, 1965)
- [8] 鈴木通夫：群論 上 (岩波書店, 1977)
- [9] 彌永昌吉, 小平邦彦：現代数学概説 I (岩波書店, 1961)
- [10] 犬井鉄郎, 田辺行人, 小野寺嘉孝：応用群論 (裳華房, 1976)
- [11] 吉川圭二：群と表現 (岩波書店, 1996)
- [12] G. E. Volovik and L. P. Gorkov, Sov. Phys. JETP **61** (1985), 843.
- [13] H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. **60** (1974), 115. H. Fukutome, Int. J. Quantum Chem. **20** (1981), 995.
- [14] M. Ozaki, J. Math. Phys. **26** (1985), 1524, 1521.
- [15] 高野文彦：多体問題 (培風館, 1975)
- [16] 阿部龍蔵：統計力学 (東京大学出版会, 1966)
- [17] P. Ring and P. Schuck : The Nuclear Many Body Problem (Springer-Verlag, 1980).

- [18] 斯波弘行：電子相関の物理 (岩波書店, 2001)
- [19] M. Ozaki, Int. J. Quantum Chem. **42** (1992), 55.
- [20] G. バーンズ：物性物理学のための群論入門 (培風館, 1983)
- [21] C. J. Bradley and A. P. Cracknell: The Mathematical Theory of Symmetry in Solids (Clarendon Press, Oxford, 1972).
- [22] J. F. Cornwell : Group Theory in Physics Volume I, p.434 (Academic Press, 1984)
- [23] S. Yamamoto and M. Ozaki, Int. J. Quantum Chem. **44** (1992), 949.
- [24] A. Affleck and J. Marston, Phys. Rev. **B 37** (1988), 3774.
- [25] X. Yang and C. Nayak, Phys. Rev. **B 65** (2002), 064523.