

線形応答理論の簡単な例：Drude の公式

京大化研 藤本純治[†]

電場に対する電流の応答と電荷密度の応答を、Green 関数法と Kubo 公式に沿って求めた。ただし、最もシンプルな自由電子系を考え、緩和の機構として点状の非磁性不純物ポテンシャルを仮定した。

まず初めに、電磁場中の自由電子系から出発して、外場のハミルトニアンとしてベクトルポテンシャルには電流が結合し、スカラーポテンシャルには電荷密度が結合することを示す。次に不純物ポテンシャルがない場合の Green 関数を用いて、不純物ポテンシャルを含んだ Green 関数を表し、不純物ポテンシャルの配置について統計処理（不純物平均）したときの Green 関数について述べる。それから、電気伝導度の表式に触れ、電磁ポテンシャルに対する電流の応答係数として積分核を導入し、積分核を計算することで Drude の公式を導く。最後に、パーテクス補正についても計算して、ゲージ不変性が成り立っていることを確かめる。

以下では、アインシュタインの縮約記法（仮の添字が 2 つ現れる場合はそれについて和をとる）を用いる。また \hbar をあらわに表示し、なぜか光速は $c = 1$ としている。

1 モデル：電磁場中の自由電子系と不純物ポテンシャル

考える系は以下のハミルトニアンで与えられる。

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi - \mu + u \sum_{j=1}^{N_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (1.1)$$

すなわち質量 m 、電荷 $-e$ ($e > 0$) の電子が、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 、スカラーポテンシャル $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$ で与えられる古典的な電磁場中を運動し、位置 \mathbf{R}_j ($j = 1, \dots, N_i$) にある δ -関数型の不純物ポテンシャル（大きさは u で、位置については平均操作を行う¹⁾）で散乱されるモデルを考える。ただし μ は化学ポテンシャルである。

まずこのハミルトニアンを第 2 量子化の方法で表そう。すなわち、電子の場の演算子 $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ と $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ を左右からそれぞれかけて、 \mathbf{r} で積分し、スピン σ について和をとると、

$$\mathcal{H}_{2\text{nd}} = \int d\mathbf{r} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi - \mu \right) \psi_\sigma(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{\text{imp}}, \quad (1.2)$$

ただし $\mathcal{H}_{\text{imp}} = u \sum_i^{N_{\text{imp}}} \rho(\mathbf{R}_i)$ とし、 $\rho(\mathbf{r}) = \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r})$ は位置 \mathbf{r} における電子の数密度演算子であり、アインシュタインの縮約記法に則って \sum_σ は明記していない。 \mathcal{H}_{imp} を除く部分を以下のように Fourier 変換する。（ V は系の体積として）

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.3a)$$

$$\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.3b)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (1.3c)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \phi(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (1.3d)$$

[†] fujimoto.junji.8s@kyoto-u.ac.jp

¹⁾ 位置に対する平均操作については、本稿で簡単に説明するが、より詳しい議論は、たとえば文献 [3] の 5 章を参照。

それともなって逆 Fourier 変換は以下ようになる .

$$a_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.4a)$$

$$a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.4b)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} dt \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (1.4c)$$

$$\phi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} dt \phi(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}. \quad (1.4d)$$

$\mathcal{H}_{2\text{nd}}$ の各項を個別に変換していく . $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ と $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ に対して式 (1.3) を用いて , 少し整理すると ,

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - \mu \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} \right) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu + \frac{e}{2m} (\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\mathbf{p}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right) \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu - \frac{ie\hbar}{2m} (\nabla\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\nabla) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right) a_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu - \frac{ie\hbar}{2m} \{(\nabla\cdot\mathbf{A}) + 2\mathbf{A}\cdot\nabla\} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right) a_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu + \frac{e\hbar}{2m} \{-i(\nabla\cdot\mathbf{A}) + 2\mathbf{A}\cdot\mathbf{k}_2\} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right) a_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

を得るが , これらは \mathbf{A} の次数ごとに式 (1.3) を用いると , それぞれ

$$(\mathcal{O}(A^0) \text{ の項}) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu \right) a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2\sigma} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right) a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \quad (1.6)$$

は自由粒子の運動エネルギーを与え ,

$$\begin{aligned} (\mathcal{O}(A) \text{ の項}) &= \frac{e\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} (-i\nabla\cdot\mathbf{A} + 2\mathbf{A}\cdot\mathbf{k}_2) a_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{e\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} \left(-i\nabla\cdot \left(\sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \left(\sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right) \cdot \mathbf{k}_2 \right) a_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{e\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} (2\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} a_{\mathbf{k}_1\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2\sigma} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{e\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} (2\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} \\ &= e \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} a_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\sigma} \\ &= - \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{j}_p(-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (1.7)$$

(最後から一つ前の等号では $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}/2$ ととり直した) は常磁性電流密度 $\mathbf{j}_p(\mathbf{q})$ とベクトルポテンシャルの

結合を表している．ここで常磁性電流密度は

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{q}) = -e \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} a_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma} \quad (1.8)$$

である (付録 A も参照)．また

$$\begin{aligned} (\mathcal{O}(A^2) \text{ の項}) &= \frac{e^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}'} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}', \omega') e^{-i(\omega+\omega')t} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'-\mathbf{q}\sigma} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{j}_d(-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (1.9)$$

ここで $\mathbf{j}_d(\mathbf{q}, \omega)$ は反磁性電流密度演算子

$$\mathbf{j}_d(\mathbf{q}) = -\frac{e^2}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}'} \mathbf{A}(\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'+\mathbf{q}\sigma}. \quad (1.10)$$

そしてスカラーポテンシャルの項については

$$-e \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \phi(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} a_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma} = -e \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(-\mathbf{q}) \phi(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} \quad (1.11)$$

となる．ただし

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma} \quad (1.12)$$

は数密度演算子の波数 \mathbf{q} の Fourier 成分である．

以上をまとめると，電磁ポテンシャルによる外場のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{ext}} = - \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\left(\mathbf{j}_p(-\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mathbf{j}_d(-\mathbf{q}) \right) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) + e \rho(-\mathbf{q}) \phi(\mathbf{q}, \omega) \right) e^{-i\omega t} \quad (1.13)$$

となる²⁾．以下では， $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ とおいて

$$\mathcal{H}_{2\text{nd}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}} + \mathcal{H}_{\text{ext}}, \quad \mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_k - \mu) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \quad (1.14)$$

という系を考える．ただし不純物ポテンシャルのハミルトニアンは波数表示で

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = u \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \rho_{\text{imp}}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1.15)$$

$$\rho_{\text{imp}}(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{imp}}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (1.16)$$

と書ける．このハミルトニアンについての扱いは，後で議論する (または文献 [3] 等を参照)．ざっくり言うと，不純物の配置 \mathbf{R}_i , $i = 1, \dots, N_{\text{imp}}$ は具体的に考える系によって異なるものであるが，そのような配置の異なった系をたくさん考えて，不純物の配置を統計的に扱うことにする．つまり，系 (体積 V) の任意の位置に不純物が存在する確率は常に $1/V$ とするということである．

²⁾ 電流密度の定義 $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{A}(\mathbf{r})$ を両辺 \mathbf{A} で積分すると， \mathbf{j} が \mathbf{A} に依存しない場合は $\mathcal{H} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$ と表せるが， \mathbf{j} が \mathbf{A} に依存する場合 (反磁性電流はこれに当たる) は，当然ながら $\mathcal{H} \neq \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$ なので，常磁性電流密度を議論する場合のみ $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{A}(\mathbf{r})$ が有効である．同様のことはしばしば見られる．たとえば軌道磁化 ($\propto \mathcal{O}(B^2)$) を含むような \mathcal{H} では $\mathbf{M} = -\partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{B}$ が正しく得られない．(もちろん \mathbf{M} のうち $\mathcal{O}(B^0)$ の項については正しい)．

2 Green 関数

ハミルトニアン \mathcal{H}_0 に対する虚時間 Green 関数は $g_{\mathbf{k}}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} a_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle_{\mathcal{H}_0}$ で与えられ、その Matsubara 周波数 $\epsilon_n = (2n + 1)\pi k_B T / \hbar$ の成分 $g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n)$ は

$$g_{\mathbf{k}}(\tau) = k_B T \sum_n g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) e^{-i\epsilon_n \tau}, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau g_{\mathbf{k}}(\tau) e^{i\epsilon_n \tau} \\ &= \frac{1}{i\hbar\epsilon_n - \xi_{\mathbf{k}}}, \quad \xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu \end{aligned} \quad (2.2)$$

と計算される。ただし $\beta = 1/k_B T$ は逆温度である。(この式の定義や導出が分からない場合は文献 [1] 等でまず理解する必要がある。)

不純物ポテンシャルを含んだハミルトニアン $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}$ に対する Green 関数を

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} a_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle_{\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}} \quad (2.3)$$

と定義する。これに対する温度 Green 関数 $\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\epsilon_n)$ を $g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n)$ を用いて表すことを考える。 \mathcal{H}_{imp} を摂動展開することで、Dyson 方程式

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) = g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}''} g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) \Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}''}(i\epsilon_n) \mathcal{G}_{\mathbf{k}'',\mathbf{k}'}(i\epsilon_n), \quad (2.4a)$$

$$\Sigma_{\mathbf{k},\mathbf{k}''}(i\epsilon_n) = u \rho_{\text{imp}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.4b)$$

となる。

ここで、特定の不純物配置 $\{\mathbf{R}\} = (\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_{\text{imp}}})$ に対する何らかの量 $A(\{\mathbf{R}\})$ について、その不純物配置に対して統計操作（不純物平均と呼ぶ）が

$$\langle A(\{\mathbf{R}\}) \rangle_{\text{imp}} = \int \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{d\mathbf{R}_i}{V} \right) A(\{\mathbf{R}\}) \quad (2.5)$$

で定義されているとする。たとえば、 1 , $\rho_{\text{imp}}(\mathbf{q})$, あるいは $\rho_{\text{imp}}(\mathbf{q})\rho_{\text{imp}}(\mathbf{q}')$ に対する不純物平均は

$$\langle 1 \rangle_{\text{imp}} = \int \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{d\mathbf{R}_i}{V} \right) = 1, \quad (2.6a)$$

$$\langle \rho_{\text{imp}}(\mathbf{q}) \rangle_{\text{imp}} = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \int \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{d\mathbf{R}_i}{V} \right) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j} = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{q},0} = n_{\text{imp}} \delta_{\mathbf{q},0}, \quad (2.6b)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho_{\text{imp}}(\mathbf{q}) \rho_{\text{imp}}(\mathbf{q}') \rangle_{\text{imp}} &= \sum_{j,j'=1}^{N_{\text{imp}}} \int \prod_{i=1}^{N_{\text{imp}}} \left(\frac{d\mathbf{R}_i}{V} \right) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j - i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_{j'}} \\ &= \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}',0} + \sum_{\substack{j,j'=1 \\ j' \neq j}}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{V^2} \delta_{\mathbf{q},0} \delta_{\mathbf{q}',0} \\ &= n_{\text{imp}} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}',0} + n_{\text{imp}} \left(n_{\text{imp}} - \frac{1}{V} \right) \delta_{\mathbf{q},0} \delta_{\mathbf{q}',0}, \end{aligned} \quad (2.6c)$$

ただし $n_{\text{imp}} = N_{\text{imp}}/V$ は不純物濃度で、熱力学極限 ($V \rightarrow \infty$) を考えて、以下では $1/V$ の項は無視する。

温度 Green 関数に対する不純物平均を考える．このとき，併進対称性が擬似的に回復し，それを $\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n)\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ と表すとすると，式 (2.4) は，左辺を右辺に逐次代入しながら，各項に対して不純物平均をとると

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) = g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) + g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) \left(n_{\text{imp}} u \right) g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) + g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) \left(n_{\text{imp}} u^2 \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) \right) g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) + \dots \quad (2.7)$$

となり，これを整理して，

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) = g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) + g_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) \Sigma(i\epsilon_n) \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n), \quad (2.8a)$$

$$\Sigma(i\epsilon_n) = n_{\text{imp}} u + n_{\text{imp}} u^2 \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) + \dots, \quad (2.8b)$$

あるいは式 (2.8a) を書き直して，

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) = \frac{1}{i\hbar\epsilon_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\epsilon_n)}. \quad (2.9)$$

自己エネルギー $\Sigma(i\epsilon_n)$ は様々な項を含んでおり，どの項までを残すかで近似のレベルが決まる³⁾．(いま， δ -関数型の不純物ポテンシャルを仮定しているので， Σ に \mathbf{k} 依存性はなくなっているが，一般の不純物ポテンシャルでは波数依存性が残りうる．) ここで，第 1 項は系全体へのエネルギーシフトしか与えないので，化学ポテンシャルを $\mu \rightarrow \mu - n_{\text{imp}} u$ と取り直すことで消去することができる．よって，電子の減衰を与える自己エネルギー (の虚部) として， n_{imp} の最低次で，かつ u の最低次で考慮すべき項は式 (2.8b) の第 2 項であり，この項のみを残す近似は Born 近似に相当する．この虚部 (の Matsubara 振動数を実周波数に解析接続したも)； $i\epsilon_n \rightarrow \epsilon + i0$ が電子の減衰を与える：

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma^{\text{R}}(\epsilon) &= n_{\text{imp}} u^2 \sum_{\mathbf{k}'} \text{Im } g_{\mathbf{k}'}^{\text{R}}(\epsilon), & g_{\mathbf{k}'}^{\text{R}}(\epsilon) &= \frac{1}{\hbar\epsilon - \xi_{\mathbf{k}'} + i0} \\ &= n_{\text{imp}} u^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \nu(\xi + \mu) \text{Im} \frac{1}{\hbar\epsilon - \xi + i0} \\ &= -i\pi n_{\text{imp}} u^2 \nu(\hbar\epsilon + \mu) \\ &\equiv -\frac{i\hbar}{2\tau}, \end{aligned}$$

ただし， ν は電子の状態密度で，

$$\nu(x) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \delta(x - \epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{(2m)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{x}, \quad (2.10)$$

τ は電子の寿命を与え，以下のように表される⁴⁾．

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi n_{\text{imp}} u^2 \nu(\mu)}{\hbar}. \quad (2.11)$$

これから温度 Green 関数 (2.9) を $i\epsilon_n \rightarrow \epsilon + i0$ に解析接続した遅延 Green 関数は

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) = \frac{1}{\hbar\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\text{R}}(\epsilon) + i0} \simeq \frac{1}{\hbar\epsilon - \xi_{\mathbf{k}} + i\hbar/2\tau}, \quad (2.12)$$

となる．ただし自己エネルギーの実部はエネルギーをシフトさせるだけなので無視し， τ の ϵ 依存性は落とす．

³⁾ 系統的に扱う方法で，最も多くの種類の項を取り入れる近似として自己無撞着 T 行列近似があり，それは Feynman ダイアグラムのに言うと，不純物線が交差しない全てのダイアグラムを考慮することに相当する．他にも自己無撞着 Born 近似や，本稿で扱う Born 近似などが知られている．

⁴⁾ 厳密に言うと， ν や τ は ϵ に依存する量であるが，物理量には主に Fermi 面近傍 ($\epsilon = 0$) のみが寄与することを考慮して $\epsilon = 0$ としている．

3 外場に対する応答としての線形応答

まず以下の3つの小節では、電気伝導度 σ_{ij} の定義について触れ、それを求めるために積分核 $K_{\mu\nu}$ を導入し、一般の線形応答理論の応答係数 $\chi_{\mu\nu}$ と積分核の関係を導く。それから電気伝導度を計算する。

3.1 電気伝導度テンソル

系に電場 $E(\mathbf{r}', t')$ を印加し、電流 $j(\mathbf{r}, t)$ が生じたとする。電場の1次に対する、電流の応答係数が電気伝導度で与えられる。すなわち

$$\langle j_i(\mathbf{r}, t) \rangle = \int d\mathbf{r}' dt' \sigma_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') E_j(\mathbf{r}', t') \quad (i, j = x, y, z). \quad (3.1)$$

ここでは非平衡であるが定常となっている状態を考える。つまり特別な時刻は存在せず、時間併進対称性があるということである。このとき、電気伝導度は $t - t'$ にしか依存しない。また、いま考えている系には空間並進対称性があるので⁵⁾⁶⁾、 $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$ となる。これを Fourier 変換すると

$$\langle j_i(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega) E_j(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.2)$$

ただし $E(\mathbf{q}, \omega) = i\omega \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) - i\mathbf{q}\phi(\mathbf{q}, \omega)$ である。

3.2 積分核とゲージ不変性、電荷保存則

ここで、以下で定義された積分核 $K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')$ を導入する。

$$\langle j_\mu(\mathbf{r}, t) \rangle = \int d\mathbf{r}' dt' K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') A_\nu(\mathbf{r}', t') \quad (\mu, \nu = 0, x, y, z), \quad (3.3)$$

ただし $j_0(\mathbf{r}, t) = -e\rho(\mathbf{r}, t)$ 、 $A_0(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t)$ とおいて四元表示にした。これの Fourier 変換は (上記と同様に系に時間と空間について並進対称性を仮定して)

$$\langle j_\mu(\mathbf{q}, \omega) \rangle = K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) A_\nu(\mathbf{q}, \omega) \quad (\mu, \nu = 0, x, y, z). \quad (3.4)$$

いま考えている系では、式 (1.13) から分かるように常磁性電流と反磁性電流の二つの成分がある。反磁性電流は、すでに $j_d \propto \mathbf{A}$ なので線形な応答の範囲ではその応答係数は外場の0次 (外場のないときの熱平衡状態) で評価できる。すなわち外場 $\mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega)$ に対する $j_d(\mathbf{q}, \omega)$ の応答は

$$\langle j_d(\mathbf{q}, \omega) \rangle = -\frac{e^2}{m} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} = -\frac{e^2 \rho_0}{m} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t}, \quad (3.5)$$

ただし $\rho_0 = \langle \rho(0) \rangle$ は粒子数密度 (1.12) の外場のないハミルトニアンに対する熱平衡状態での期待値である。常磁性電流に対する応答は、次小節で述べる線形応答理論に基づいて議論する必要がある。

式 (3.4) から分かるように、 $K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega)$ は、 $A_\nu(\mathbf{q}, \omega)$ という外場に対する $j_\mu(\mathbf{q}, \omega)$ の線形応答係数であり、電場とスカラー/ベクトルポテンシャルの関係から、積分核を求めることができれば、電場に対する電荷や電流の線形応答が得られると予想される。ここで式 (3.4) においてゲージ変換

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla\chi(\mathbf{r}, t), \quad \phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t) \quad (3.6)$$

⁵⁾ 不純物ポテンシャルが存在しているので、特定の系については並進対称性は保たれないが、不純物平均 (2.5) を行い、擬似的に並進対称性を回復させたとして扱う。

⁶⁾ 空間並進対称性のない場合は非局所的な電気伝導となる。非局所電流については Chambers の公式があり、これもミクロな理論から導出することもできる。

に対する不変性を要請すると $\mu = 0, x, y, z$ に対してそれぞれ

$$q_j K_{\mu j}(\mathbf{q}, \omega) + \omega K_{\mu 0}(\mathbf{q}, \omega) = 0 \quad (3.7)$$

を $K_{\mu\nu}$ は満たす必要があり, これを満たすとき, $K_{\mu j}$ を用いると

$$\langle j_\mu(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \frac{K_{\mu j}(\mathbf{q}, \omega)}{i\omega} E_j(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.8)$$

と書ける.

また, 積分核 $K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega)$ が満たすべき関係式がもう一つあり, それは電荷保存則から導かれる. 電荷保存則

$$\frac{\partial \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0 \quad (3.9)$$

は U(1) ゲージ対称性に伴う Noether カレントとして導かれる. これを Fourier 変換して式 (3.4) を用いて書き換えると, $\nu = 0, x, y, z$ についてそれぞれ

$$-\omega K_{0\nu}(\mathbf{q}, \omega) + q_i K_{i\nu}(\mathbf{q}, \omega) = 0 \quad (3.10)$$

という関係式が成り立っている必要がある.

3.3 線形応答係数

ハミルトニアン \mathcal{H} で決められた熱平衡状態の系があるとする. 線形応答理論 [1-4] によれば, そのような系に $F_\nu(\mathbf{q}, \omega)e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$ という外場 (そのハミルトニアンが

$$\mathcal{H}_{\text{ext}} = - \int d\mathbf{r} B_\nu(\mathbf{r}) F_\nu(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = -B_\nu(-\mathbf{q}) F_\nu(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t}, \quad (3.11)$$

ただし外場と結合する物理量 B_ν は Schrödinger 表示の演算子) が加えられたとき, 物理量 M (M も Schrödinger 表示の演算子) の線形応答は以下のように表される.

$$\langle M_\mu(\mathbf{q}) \rangle_{\mathcal{H}+\mathcal{H}_{\text{ext}}} - \langle M_\mu(0) \rangle_{\mathcal{H}} = \chi_{\mu\nu}^{\text{R}, MB}(\mathbf{q}, \omega) F_\nu(\mathbf{q}, \omega) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (3.12)$$

$$\chi_{\mu\nu}^{\text{R}, MB}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i0)t} \langle [\widetilde{M}_\mu(\mathbf{q}, t), \widetilde{B}_\nu(-\mathbf{q}, 0)] \rangle_{\mathcal{H}}, \quad (3.13)$$

ここで $\chi_{\mu\nu}^{\text{R}, MB}(\mathbf{q}, \omega)$ は M_μ と B_ν の遅延相関関数で, それに対応する虚時間形式での相関関数

$$\chi_{\mu\nu}^{\text{MB}}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_\lambda\tau} \langle \text{T}_\tau \widetilde{M}_\mu(\mathbf{q}, \tau) \widetilde{B}_\nu(-\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (3.14)$$

を $i\omega_\lambda \rightarrow \omega + i0$ と解析接続することで得られる (Kubo 公式). ただしここで \widetilde{M}_μ などは \mathcal{H}_{ext} を含まないハミルトニアンに対する Heisenberg 表示の演算子であり, $\omega_\lambda = 2\lambda\pi/\hbar\beta$ (λ は整数) はボゾンの Matsubara 振動数である. また μ, ν は一般には時間や空間, スピン等の添字である. これはつまり「熱平衡状態を決めるハミルトニアンと微視的な (力学的な) 外場から系の巨視的線形応答を求めることができる」ということである.

3.4 積分核を求める

前二つの小節の対応関係を明記すると, いま考えている系 (1.14) では $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}$ が \mathcal{H} に相当し, 式 (3.11) の $F_\nu(\mathbf{q}, \omega)$ には電磁ポテンシャル $A_\nu(\mathbf{q}, \omega)$, また $B_\nu(-\mathbf{q})$ は $j_{\text{p},\nu}(-\mathbf{q})$ に対応し, 求めたい物理量 $M_\mu(\mathbf{q})$ は $j_{\text{p},\mu}(\mathbf{q})$ である. すなわち, 式 (3.4) で定義された積分核 $K_{\mu\nu}$ と $\chi_{\mu\nu}^{\text{R}}$ との関係は,

$$K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mu\nu}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) - \frac{e^2 \rho_0}{m} \delta_{\mu\nu} (1 - \delta_{\mu 0}) \quad (3.15)$$

(第2項は反磁性電流に対応)で与えられ, $\chi_{\mu\nu}^R(\mathbf{q}, \omega)$ は以下を $i\omega_\lambda \rightarrow \omega + i0$ に解析接続することで得られる.

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = \frac{1}{\hbar} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \tilde{j}_{\mathbf{p},\mu}(\mathbf{q}, \tau) \tilde{j}_{\mathbf{p},\nu}(-\mathbf{q}, 0) \rangle_{\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}}. \quad (3.16)$$

$\langle \dots \rangle_{\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}}$ を, Wick の定理で分解して⁷⁾, 不純物の効果を自己エネルギーとして取り入れた Green 関数 $\mathcal{G}_k(\tau)$ を用いて表すと (計算の詳細は付録 B に譲る)

$$\langle T_\tau \tilde{j}_{\mathbf{p},\mu}(\mathbf{q}, \tau) \tilde{j}_{\mathbf{p},\nu}(-\mathbf{q}, 0) \rangle_{\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}} = - \sum_{\mathbf{k}} e^2 v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}\nu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(\tau) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(-\tau) \quad (3.17)$$

となるので

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = -e^2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}\nu} k_B T \sum_n \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(i\epsilon_n). \quad (3.18)$$

ここで, $v_{\mathbf{k}0} = 1$ は粒子数密度パーテックス, $v_{\mathbf{k}i} = \hbar k_i / m$ ($i = x, y, z$) は速度パーテックスであり, また Green 関数は式 (2.9) で与えられている. 式 (3.18) を Feynman ダイアグラムで表せば図 1(a) のようになる.

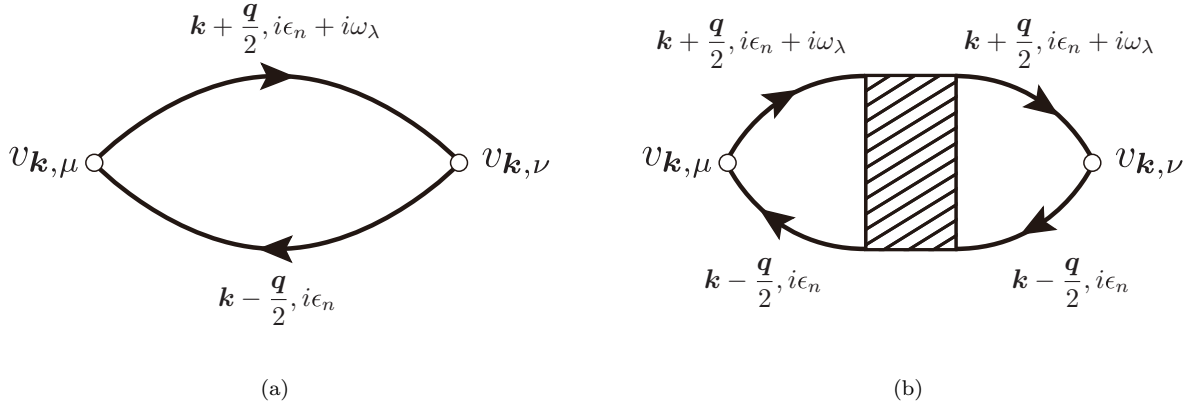


図1 current-current 相関関数の Feynman ダイアグラム. 矢印のある実線は, 不純物による自己エネルギーを含んだ電子の Green 関数を, 丸印は速度パーテックス (電荷を除いた) を表している. (a) はパーテックス補正を含まない寄与. (b) はパーテックス補正の効果で, 黒い四角形は4点パーテックスを表している. この4点パーテックスがどのようなものになるかは近似によるのでここでは明記しない.

3.4.1 留数定理と解析接続を用いて

ここで式 (3.18) のうち, Matsubara 振動数 ϵ_n に依存する部分

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) \equiv -k_B T \sum_n \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(i\epsilon_n) \quad (3.19)$$

を変形する. $\tanh(x)$ に対する留数定理⁸⁾を用いた以下の公式を用いる.

$$k_B T \sum_n \mathcal{F}(i\epsilon_n) = \hbar \int_C \frac{dz}{4\pi i} \mathcal{F}(z) \tanh\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right), \quad (3.20)$$

⁷⁾ 不純物平均を行う前の Green 関数 (2.3) を用いて Wick の定理で分解して, 不純物平均をとり, 不純物の効果を自己エネルギーとパーテックス補正の二つに分けて議論する. ただし U(1) ゲージ対称性を保つため, 自己エネルギーとパーテックス補正は Ward-Takahashi 恒等式を満たすように取り入れる必要がある.

⁸⁾ $\tanh(x)$ は $x = (2n + 1)\pi i$ に極を持つ.

ただし \mathcal{F} は $z = i\epsilon_n$ で極をもたない任意の複素関数であり，積分路 C は図 2(a) で示される． $\omega_\lambda > 0$ として，これから⁹⁾

$$\begin{aligned}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) &= -\hbar \int_C \frac{dz}{4\pi i} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(z + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(z) \tanh\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \\ &= -\hbar \int_{C_1+C_2+C_3} \frac{dz}{4\pi i} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(z + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(z) \tanh\left(\frac{\hbar z}{2k_B T}\right) \\ &= -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{4\pi i} \left\{ \left[\mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(\epsilon + i0) - \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(\epsilon - i0) \right] \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(\epsilon - i\omega_\lambda) \tanh\left(\frac{\hbar(\epsilon - i\omega_\lambda)}{2k_B T}\right) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(\epsilon + i\omega_\lambda) \left[\mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(\epsilon + i0) - \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(\epsilon - i0) \right] \tanh\left(\frac{\hbar\epsilon}{2k_B T}\right) \right\},\end{aligned}\quad (3.21)$$

ここで 3 つ目の等号では，無限遠での積分はゼロとなり，経路 C''_2, C'_3 について $z = \epsilon - i\omega_\lambda \pm i0$ ，経路 C'_1, C'_2 については $z = \epsilon \pm i0$ とした．また $\tanh(\hbar(\epsilon - i\omega_\lambda)/2k_B T) = \tanh(\hbar\epsilon/2k_B T)$ である (ボソンの Matsubara 振動数は $\omega_\lambda = 2\pi\lambda k_B T/\hbar$ だから)．

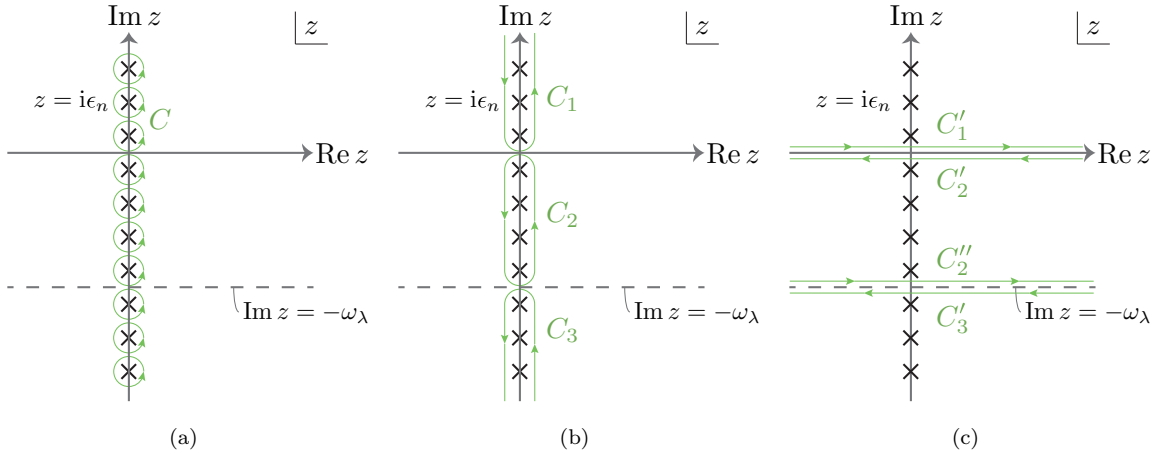


図 2 (a) 公式 (3.20) を用いて経路 C の複素積分に置き換える．(b) 経路 C を連続的に変形していき，経路 C_1, C_2, C_3 の積分を扱えばよいことが分かる．(c) それぞれの経路を“切り開いて”， $\text{Im } z = \pm 0, -\omega_\lambda \pm 0$ にそった経路の積分に帰着させる．(正則な領域では積分経路を連続変形できるため“切り開く”ことができる．)

次に， $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda)$ において，図 2(c) にて各 Green 関数の解析性を考慮しながら $i\omega_\lambda \rightarrow \omega + i0$ と解析接続して $G^{\text{R(A)}}$ で表すと

$$\begin{aligned}\varphi_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) &= -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{4\pi i} \tanh\left(\frac{\hbar\epsilon}{2k_B T}\right) \left\{ \left[G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon) - G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon) \right] G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon - \omega) \right. \\ &\quad \left. + G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon + \omega) \left[G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon) - G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon) \right] \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left\{ \left[\tanh\left(\frac{\hbar\epsilon_+}{2k_B T}\right) - \tanh\left(\frac{\hbar\epsilon_-}{2k_B T}\right) \right] G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon_-) \right. \\ &\quad \left. + \tanh\left(\frac{\hbar\epsilon_-}{2k_B T}\right) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon_-) - \tanh\left(\frac{\hbar\epsilon_+}{2k_B T}\right) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon_-) \right\},\end{aligned}\quad (3.22)$$

⁹⁾ 式 (3.20) を用いた時点で，離散的な点列 $i\epsilon_n$ でしか定義されていない 1 体の温度 Green 関数 $\mathcal{G}(i\epsilon_n)$ を複素平面上で定義される関数 $\mathcal{G}(z)$ に解析接続している．ただし $\mathcal{G}(z)$ は $\text{Im } z = 0$ に不連続点を持っているので，常にそれに注意を払う必要がある．

ただし，二つ目の等号で $\{\dots\}$ の中の第 1 項に対して $\epsilon_+ = \epsilon + \omega/2$ ，第 2 項に対して $\epsilon_- = \epsilon - \omega/2$ と変数変換した．さらに $\tanh(\hbar\epsilon/2k_B T) = 1 - 2f(\hbar\epsilon)$ ($f(x) = 1/(\exp(\beta x) + 1)$ はフェルミ分布関数) を用いると，

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) = & -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left\{ \left[f(\hbar\epsilon_+) - f(\hbar\epsilon_-) \right] G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon_-) \right. \\ & \left. + f(\hbar\epsilon_-) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{R}}(\epsilon_-) - f(\hbar\epsilon_+) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{A}}(\epsilon_-) \right\}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

ただし $f(x)$ を含まない G^{R} のみや G^{A} のみの項は，極を避けた閉経路を積分経路にできるのでゼロとなる．

ここで $\varphi_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\mathbf{0}, 0)$ の部分が反磁性電流の項に一致することを見る． $\partial G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon)/\partial\epsilon = -G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon)G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon)$ ，さらに $\tau \rightarrow \infty$ とみなして $G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) - G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(\epsilon) \simeq g_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) - g_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(\epsilon) = -2\pi i \delta(\hbar\epsilon - \xi_{\mathbf{k}})$ を用いると

$$\varphi_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\mathbf{0}, 0) = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\hbar\epsilon) \frac{\partial}{\partial\epsilon} \{G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) - G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(\epsilon)\} = -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left(\frac{\partial f}{\partial\epsilon} \right) \{G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon) - G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(\epsilon)\} = -\frac{\partial f(\xi_{\mathbf{k}})}{\partial\xi_{\mathbf{k}}}$$

であり，この式と $v_{\mathbf{k},i} = \partial\xi_{\mathbf{k}}/\hbar\partial k_i$ から

$$\chi_{ii}^{\text{R}}(\mathbf{0}, 0) = -\frac{e^2}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial\xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_i} \frac{\partial f(\xi_{\mathbf{k}})}{\partial k_i} = e^2 \sum_{\mathbf{k}} f(\xi_{\mathbf{k}}) \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_i^2} = \frac{e^2 \rho_0}{m}, \quad (3.24)$$

すなわち，反磁性項 (式 (3.15) の第 2 項) と一致する．(ただし最後の等号で $\xi_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m - \mu$ を用いた．)

以上をまとめると，電磁ポテンシャルに対する電荷と電流の線形応答は

$$\langle j_{\mu}(\mathbf{q}, \omega) \rangle - \langle j_{\mu}(\mathbf{q}, \omega) \rangle_0 = K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) A_{\nu}(\mathbf{q}, \omega) \quad ((\mu, \nu = 0, x, y, z)) \quad (3.25a)$$

と書いたとき， $\langle j_0(\mathbf{q}, \omega) \rangle_0 = \rho_0$ ， $\langle j_i(\mathbf{q}, \omega) \rangle_0 = 0$ であり¹⁰⁾， $K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mu\nu}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) - \chi_{\mu\nu}^{\text{R}}(\mathbf{0}, 0)\delta_{\mu\nu}(1 - \delta_{\mu 0})$ ，ただし

$$\begin{aligned} \chi_{\mu\nu}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{e^2 \hbar}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left\{ \left[f(\hbar\epsilon_+) - f(\hbar\epsilon_-) \right] \Psi_{\mu\nu}^{\text{RA}}(\mathbf{q}, \epsilon_+, \epsilon_-) \right. \\ & \left. + f(\hbar\epsilon_-) \Psi_{\mu\nu}^{\text{RR}}(\mathbf{q}, \epsilon_+, \epsilon_-) - f(\hbar\epsilon_+) \Psi_{\mu\nu}^{\text{AA}}(\mathbf{q}, \epsilon_+, \epsilon_-) \right\}, \end{aligned} \quad (3.25b)$$

$$\Psi_{\mu\nu}^{\text{XY}}(\mathbf{q}, \epsilon_+, \epsilon_-) = \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}\nu} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^{\text{X}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^{\text{Y}}(\epsilon_-). \quad (3.25c)$$

ここではゲージ不変性や電荷保存則という理論的要請 (3.7) を $K_{\mu\nu}$ にまだ課していない点に注意．というのも， $K_{\mu\nu}$ を実際に計算した結果，それが満たされていることを確かめたいという思惑がある．それに伴って重要となる $\chi_{\mu\nu}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)$ に対するパーテクス補正が式 (3.25b) に含まれておらず，その効果は 6 節で実際に議論する．

4 空間的に一様な外場に対する電流の応答：Drude の公式

まず手始めに $\mathbf{q} = 0$ の場合，すなわち空間的には一様な外場を考えよう．ただし，時間的には，Fermi エネルギーに比べて十分ゆっくり変化している ($\hbar\omega \ll \mu$) とする．Green 関数は k の偶関数であり， $v_{\mathbf{k}i}$ は k の奇関数であることから， $\chi_{0i}^{\text{R}}(\mathbf{0}, \omega) = \chi_{i0}^{\text{R}}(\mathbf{0}, \omega) = 0$ が帰着される． $K_{i0}(\mathbf{0}, \omega) = 0$ は式 (3.4) に対するゲージ不変性からも，式 (3.7) で $\mathbf{q} = 0$ とすることで見出される． $K_{0i}(\mathbf{0}, \omega) = 0$ は電荷保存則から見出される帰結 (式 (3.10) で $\mathbf{q} = 0$ とおく) ともとれる．ところで， $K_{00}(\mathbf{0}, \omega) \neq 0$ だとすると，それは $\langle \rho(\mathbf{0}, \omega) \rangle \propto \phi(\mathbf{0}, \omega)$

¹⁰⁾ ここで注意すべきは，Kubo 公式 (3.12) で求まるものは物理量そのものではなく外場が存在したことによるその変化分 $\langle M_{\mu}(\mathbf{q}) \rangle_{\mathcal{H}+\mathcal{H}_{\text{ext}}} - \langle M_{\mu}(\mathbf{0}) \rangle_{\mathcal{H}}$ だという点である．外場がなければ電流はないが，電荷については電子が存在する分だけ存在する．

を意味し，ゲージ不変性を満たさず，電場 ($E_i = q_i \phi$ の形でしか現れない) に対する応答をも与えないため， $K_{00}(\mathbf{0}, \omega) = 0$ となるべきだと予想される．

いま考えている系は等方的なので，計算すべき (μ, ν) の組みは $(0, 0)$ と (i, i) , $i = x, y, z$ のみだが，まず後者を議論し， K_{00} に対しては次節で議論する． K_{ii} ($i = x, y, z$) は式 (3.25b) にて $q = 0$ として，そこに含まれる式 (3.25c) は，系の等方性を用いて以下ようになる．

$$\Psi_{ii}^{XY}(\epsilon_+, \epsilon_-) = \sum_{\mathbf{k}} v_{k_i}^2 G_{\mathbf{k}}^X(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}}^Y(\epsilon_-) = \frac{1}{3} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 G_{\mathbf{k}}^X(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}}^Y(\epsilon_-), \quad (4.1)$$

ここで $\Psi_{ii}^{XY}(\epsilon_+, \epsilon_-) = \Psi_{ii}^{XY}(\mathbf{0}, \epsilon_+, \epsilon_-)$ とした．これらに対して，波数和をエネルギー積分に書き換えて，上半面に無限遠の円弧の経路を付け加えて¹¹⁾ (この経路からの寄与を c で表す)，上半面の極 (Ψ_{ii}^{RA} に対しては $\xi = \hbar\epsilon_+ + i\hbar/2\tau$ ， Ψ_{ii}^{RR} に対しては $\xi = \hbar\epsilon_{\pm} + i\hbar/2\tau$ ，また Ψ_{ii}^{AA} では上半面に極を持たない) を拾うと，それぞれ

$$\begin{aligned} \Psi_{ii}^{\text{RA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + c &= \frac{1}{3m} \oint_P d\xi \frac{\nu(\xi + \mu)(\xi + \mu)}{(\hbar\epsilon_+ - \xi + i\hbar/2\tau)(\hbar\epsilon_- - \xi - i\hbar/2\tau)} \\ &\simeq \frac{2\pi i}{3m\hbar\omega + i/\tau} \nu(\hbar\epsilon_+ + \mu)(\hbar\epsilon_+ + \mu), \end{aligned} \quad (4.2a)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{ii}^{\text{RR}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + c &= \frac{1}{3m} \oint_P d\xi \frac{\nu(\xi + \mu)(\xi + \mu)}{(\hbar\epsilon_+ - \xi + i\hbar/2\tau)(\hbar\epsilon_- - \xi + i\hbar/2\tau)} \\ &\simeq \frac{2\pi i}{3m\hbar\omega} [\nu(\hbar\epsilon_+ + \mu)(\hbar\epsilon_+ + \mu) - \nu(\hbar\epsilon_- + \mu)(\hbar\epsilon_- + \mu)], \end{aligned} \quad (4.2b)$$

$$\Psi_{ii}^{\text{AA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + c = 0, \quad (4.2c)$$

ただし経路 P は実軸上 $[-\infty : \infty]$ と $\xi = Re^{i\theta}$ として θ を $[0 : \pi]$ で R は十分大きいとしたものの和であり， $\nu(\hbar\epsilon_{\pm} + \mu + i\hbar/2\tau) \simeq \nu(\hbar\epsilon_{\pm} + \mu)$ と近似した¹²⁾．これからただちに，

$$\begin{aligned} \chi_{ii}^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{e^2}{3m} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left\{ [f(\hbar\epsilon_+) - f(\hbar\epsilon_-)] \frac{1}{\omega + i/\tau} \nu(\hbar\epsilon_+ + \mu)(\hbar\epsilon_+ + \mu) \right. \\ &\quad \left. + f(\hbar\epsilon_-) \frac{1}{\omega} [\nu(\hbar\epsilon_+ + \mu)(\hbar\epsilon_+ + \mu) - \nu(\hbar\epsilon_- + \mu)(\hbar\epsilon_- + \mu)] \right\} \\ &= \frac{e^2}{3m} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon [f(\hbar\epsilon_+ - \mu) - f(\hbar\epsilon_- - \mu)] \nu(\hbar\epsilon_+) \hbar\epsilon_+ \left(\frac{1}{\omega + i/\tau} - \frac{1}{\omega} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\simeq -\frac{e^2}{3m} \nu(\mu) \mu \left(\frac{\omega}{\omega + i/\tau} - 1 \right). \quad (4.4)$$

ただし，最後の行で，十分低温 ($\mu \gg k_{\text{B}}T$) かつ外場の振動数が小さい ($\mu \gg \hbar\omega$) として， $f(\hbar\epsilon_{\pm} - \mu) \simeq \pm(\omega/2)\partial f(\hbar\epsilon - \mu)/\partial\epsilon$ と展開し， $f(\hbar\epsilon - \mu)/\partial\epsilon = -\hbar\delta(\hbar\epsilon - \mu)$ と近似して ϵ 積分を実行した．ここで，式 (3.24) から分かっていることであるが， Ψ_{ii}^{RR} からの寄与が反磁性項 (符号は逆) に等しいことを示しておく．

$$\frac{e^2}{3m} \nu(\mu) \mu = \frac{e^2}{m} \frac{k_{\text{F}}^3}{3\pi^2} = \frac{e^2 \rho_0}{m}, \quad (4.5)$$

ただし状態密度 (2.10) に対して $x = \mu = \hbar^2 k_{\text{F}}^2 / 2m$ を代入し， $\rho_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \theta(k_{\text{F}} - k) = k_{\text{F}}^3 / 3\pi^2$ を用いた．

以上から，空間的に一様で時間的にゆっくり変化するベクトルポテンシャルに対する応答は

$$\langle j_i(\mathbf{0}, \omega) \rangle = \frac{1}{3m} \frac{e^2 \nu(\mu) \mu}{\tau^{-1} - i\omega} i\omega A_i(\mathbf{0}, \omega) \quad (4.6)$$

¹¹⁾ 無限遠では Green 関数の解析性の違いはなくなるため，この経路からの寄与はそれら単体では収束しないが $f(\epsilon_{\pm})$ の項同士それぞれで打ち消しあう．

¹²⁾ いま考えている範囲では τ は非常に大きいと見なしているため，この近似でよいが， τ の次数で展開した高次項を求めたい場合は注意が必要で，そもそもエネルギー積分の区間を $[-\infty, \infty]$ ではなく， $[-\mu, \infty]$ として扱わなければならない．

を得る．ここで $\langle j_i(\mathbf{0}, \omega) \rangle$ に対して $\omega \rightarrow 0$ とすると $K_{ii}(\mathbf{0}, 0) \propto \omega \rightarrow 0$ となり，(電場も磁場も生じさせない) 一様なベクトルポテンシャルに対して線形応答はないということが確かめられる．さらに $\nu(\mu)\mu/3 = \rho_0$ と $i\omega A_i(\mathbf{0}, \omega) = E_i(\mathbf{0}, \omega)$ を用いると，

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{0}, \omega) \rangle = \frac{e^2 \rho_0 \tau}{m} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \mathbf{E}(\mathbf{0}, \omega) \quad (4.7)$$

となり，Drude の公式が得られる¹³⁾．

5 空間的に一様な外場に対する電荷の応答

次に，空間的に一様な外場に対する電荷の応答を計算していく．前節冒頭で議論したように，この応答係数 K_{00} が有限に残ると理論的に正しくないので，ゼロになることを確かめることが目標である．ここでも前節で計算したように，波数和をエネルギー積分に書き換え，上半面無限遠の経路 (この経路からの寄与を c' で表す¹⁴⁾) を加えて Ψ_{00}^{XY} を求める．

$$\begin{aligned} \Psi_{00}^{\text{RA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + c' &= \oint_P d\xi \frac{\nu(\xi + \mu)}{(\hbar\epsilon_+ - \xi + i\hbar/2\tau)(\hbar\epsilon_- - \xi - i\hbar/2\tau)} \\ &\simeq \frac{2\pi i}{\hbar} \frac{1}{\omega + i/\tau} \nu(\hbar\epsilon_+ + \mu), \end{aligned} \quad (5.1a)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{00}^{\text{RR}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + c' &= \oint_P d\xi \frac{\nu(\xi + \mu)}{(\hbar\epsilon_+ - \xi + i\hbar/2\tau)(\hbar\epsilon_- - \xi + i\hbar/2\tau)} \\ &\simeq \frac{2\pi i}{\hbar\omega} [\nu(\hbar\epsilon_+ + \mu) - \nu(\hbar\epsilon_- + \mu)], \end{aligned} \quad (5.1b)$$

$$\Psi_{00}^{\text{AA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + c' = 0, \quad (5.1c)$$

ただし $\nu(\hbar\epsilon_{\pm} + \mu + i\hbar/2\tau) \simeq \nu(\hbar\epsilon_{\pm} + \mu)$ と近似した．(経路 P は前節の計算を参照．) よって十分低温 ($\mu \gg k_B T$) かつ外場の振動数が小さい ($\mu \gg \hbar\omega$) として，

$$\begin{aligned} \chi_{00}^{\text{R}}(\mathbf{0}, \omega) &= e^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left\{ [f(\hbar\epsilon_+) - f(\hbar\epsilon_-)] \frac{1}{\omega + i/\tau} \nu(\hbar\epsilon_+ + \mu) \right. \\ &\quad \left. + f(\hbar\epsilon_-) \frac{1}{\omega} [\nu(\hbar\epsilon_+ + \mu) - \nu(\hbar\epsilon_- + \mu)] \right\} \\ &= e^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon [f(\hbar\epsilon_+ - \mu) - f(\hbar\epsilon_- - \mu)] \nu(\hbar\epsilon_+) \left(\frac{1}{\omega + i/\tau} - \frac{1}{\omega} \right) \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\simeq -e^2 \nu(\mu) \left(\frac{\omega}{\omega + i/\tau} - 1 \right). \quad (5.3)$$

以上から，空間的に一様で時間的にゆっくり変化するスカラーポテンシャルに対する電荷の線形応答は

$$\Delta \langle \rho(\mathbf{0}, \omega) \rangle = e^2 \nu(\mu) \left(1 - \frac{\omega}{\omega + i/\tau} \right) \phi(\mathbf{0}, \omega) \quad (5.4)$$

を得る．しかし， $\Delta \langle \rho(\mathbf{0}, \omega) \rangle$ がスカラーポテンシャルそのものに比例し，連続の方程式 (3.9) あるいは式 (3.10) にて $q_i = 0$ としたものを満たさない．この問題はパーテクス補正を考慮することで解消されることを見ていこう．

¹³⁾ われわれはいま δ -関数型の不純物ポテンシャルを考えているため， $K_{ii}(\mathbf{0}, \omega)$ に対しては，4点パーテクスとして梯子型パーテクス補正を考慮しても寄与はないことが分かる．一般の不純物ポテンシャルにおいて，同様の梯子型パーテクス補正を計算すると，式 (4.7) において τ が電子の寿命ではなく，前方散乱の抑制された輸送緩和時間 τ_{tr} に置き換えられる [1]．

¹⁴⁾ 計算すると $c' = 0$ となるので，わざわざ明記する必要はないように思うが， Ψ_{00}^{RR} や Ψ_{00}^{AA} の極を避けるような経路を付け加えると積分値がゼロになってしまうので謎．それぞれの極を避けるような経路からの寄与はゼロでないということ...?

6 梯子型バーテクス補正とゲージ不変性

バーテクス補正は，図 1(b) における斜線の四角形のダイアグラムに相当する（正確には 4 点バーテクスに対するバーテクス補正に相当する）．あるいは，2 体 Green 関数の自己エネルギー部分とも言える（詳細は参考文献に譲る）．ここではバーテクス補正として梯子型（図 3）を考慮する．ここでは単に，このようなバーテクス補正を考慮することで電荷の線形応答係数 $K_{00}(\mathbf{0}, \omega)$ がゼロになることを示すのみに留める¹⁵⁾．それはつまり梯子型のバーテクス補正の寄与が，すべての $n_{\text{imp}}u^2$ の次数で同じオーダーで寄与するというでもある．（ $n_{\text{imp}}u^2$ が小さいとして摂動展開したとしても，その高次項が無視できない）

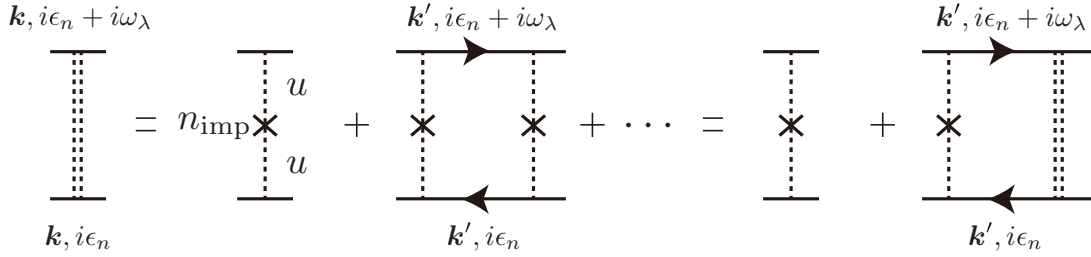


図 3 4 点バーテクスに対する梯子型のバーテクス補正（二重点線で表す）の Feynman ダイアグラム．矢印を持つ実線は（不純物による自己エネルギーを含んだ）電子の Green 関数を表し，点線は不純物ポテンシャル，クロス印は不純物濃度を表している．矢印のない実線は外線として示している．

図 3 を式に書き下すと

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, i\omega_\lambda) &= n_{\text{imp}}u^2 + (n_{\text{imp}}u^2)^2 \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) \\ &\quad + (n_{\text{imp}}u^2)^3 \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}''}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}''}(i\epsilon_n) \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) + \dots \\ &= n_{\text{imp}}u^2 + n_{\text{imp}}u^2 \sum_{\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) \mathcal{D}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, i\omega_\lambda) \end{aligned} \quad (6.1)$$

となるが，これを整理すると

$$\mathcal{D}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, i\omega_\lambda) = \frac{n_{\text{imp}}u^2}{1 - \Gamma(\mathbf{0}, i\omega_\lambda)}, \quad (6.2)$$

ただし $\Gamma(\mathbf{q}, i\omega_\lambda)$ は以下で定義される．

$$\Gamma(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = n_{\text{imp}}u^2 \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(i\epsilon_n). \quad (6.3)$$

$\Gamma(\mathbf{0}, i\omega_\lambda)$ に対して $i\epsilon_n + i\omega_\lambda \rightarrow \epsilon + \omega + i0$, $i\epsilon_n \rightarrow \epsilon - i0$ と解析接続して， ϵ を $\epsilon - \omega/2$ にとり直した $\Gamma^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega)$ を計算すると

$$\Gamma^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega) = n_{\text{imp}}u^2 \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^{\text{R}}(\epsilon_+) G_{\mathbf{k}}^{\text{A}}(\epsilon_-) = n_{\text{imp}}u^2 \Psi_{00}^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega) \simeq \frac{i/\tau}{\omega + i/\tau}, \quad (6.4)$$

ただし最後の等号で $\mu \gg \hbar\omega$ を用いて， $\epsilon = 0$ と評価した⁴⁾．これから分かるように $\Gamma^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega)$ は $\mathcal{O}(n_{\text{imp}}^0)$ の寄与となる．ところで， $\Gamma(\mathbf{0}, i\omega_\lambda)$ に対して $i\epsilon_n + i\omega_\lambda \rightarrow \epsilon + \omega \pm i0$, $i\epsilon_n \rightarrow \epsilon \pm i0$ と解析接続したもの

¹⁵⁾ そもそも「なぜ梯子型のバーテクス補正を考えるのか」は，本質的には Ward-Takahashi 恒等式について議論する必要があり，それについては詳しくは，たとえば文献 [6] の §8-5 を参照．

($\Gamma^\pm(\mathbf{0}, \omega)$ と表す) は $n_{\text{imp}}u^2\Psi_{00}^{\text{RR}}$ と $n_{\text{imp}}u^2\Psi_{00}^{\text{AA}}$ から $\mathcal{O}(n_{\text{imp}}u^2)$ の寄与となるので無視する．よって，

$$D^{\text{R}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega) \equiv \frac{n_{\text{imp}}u^2}{1 - \Gamma^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega)} = -n_{\text{imp}}u^2 \frac{1 - i\omega\tau}{i\omega\tau}. \quad (6.5)$$

ここで導入した $D^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)$ は Diffuson の遅延 Green 関数で，その意味は次節以降ではっきりするが，ここでは $D^{\text{R}}(\mathbf{0}, \omega) = \mathcal{D}(\mathbf{0}, \omega + i0)$ として得られる関数としてのみ扱うこととする．

以上で梯子型パーテクス補正が計算できたので，積分核に対するパーテクス補正 $\chi_{00}^{\text{R,VC}}(\mathbf{0}, \omega)$ を求める．それに対応する Matsubara 表示の相関関数は

$$\chi_{00}^{\text{VC}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, i\omega_\lambda) = -e^2 k_{\text{B}}T \sum_n \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{D}(\mathbf{0}, i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n + i\omega_\lambda) \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(i\epsilon_n) \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\epsilon_n) \quad (6.6)$$

である．3.4.1 節にて式 (3.19) を計算したときのように，Matsubara 和を複素積分に変え，解析接続 $i\omega_\lambda \rightarrow \omega + i0$ を行うと，以下を得ることが分かる．

$$\begin{aligned} \chi_{00}^{\text{R,VC}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega) &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left\{ [f(\hbar\epsilon_+) - f(\hbar\epsilon_-)] D^{\text{R}}(\mathbf{0}, \omega) \{\Psi_{00}^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \epsilon_+, \epsilon_-)\}^2 \right. \\ &\quad \left. + f(\hbar\epsilon_-) \frac{n_{\text{imp}}u^2}{1 - \Gamma^+(\mathbf{0}, \omega)} \{\Psi_{00}^{\text{RR}}(\mathbf{0}, \epsilon_+, \epsilon_-)\}^2 - f(\hbar\epsilon_+) \frac{n_{\text{imp}}u^2}{1 - \Gamma^-(\mathbf{0}, \omega)} \{\Psi_{00}^{\text{AA}}(\mathbf{0}, \epsilon_+, \epsilon_-)\}^2 \right\}, \quad (6.7) \end{aligned}$$

ただし， G^{R} のみと G^{A} のみを含む項は，やはり $\mathcal{O}(n_{\text{imp}}u^2)$ の寄与しかしないので無視する．さらに，式 (6.4) と (6.5) を用いると， $\chi_{00}^{\text{R,VC}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega)$ は簡単に

$$\begin{aligned} \chi_{00}^{\text{R,VC}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega) &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi i} \frac{\Gamma^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega)}{1 - \Gamma^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \omega)} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon [f(\hbar\epsilon_+) - f(\hbar\epsilon_-)] \Psi_{00}^{\text{RA}}(\mathbf{0}, \epsilon_+, \epsilon_-) \\ &\simeq e^2 \nu(\mu) \left(\frac{\omega}{\omega + i/\tau} - 1 \right), \quad (6.8) \end{aligned}$$

ただしここでも低温かつ低周波数であることを用いた．よって，

$$\chi_{00}^{\text{R}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega) + \chi_{00}^{\text{R,VC}}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega) = 0 \quad (6.9)$$

となり， $K_{00}(\mathbf{0}, \omega) = 0$ が示された．このようにパーテクス補正が物理量に重要な寄与をする場合がある．(たとえば輸送現象については，異常 Hall 効果に重要な寄与をしよう side-jump や skew 散乱の項も，Kubo 公式ではパーテクス補正として計算される．熱力学量としては，電荷ゆらぎやスピンゆらぎなどもパーテクス補正として取り入れられる．) 大雑把に言って，遅延 Green 関数と先進 Green 関数の積を含み，それらの極が非常に近づきうる場合は特異性が生じるので，パーテクス補正を含め，取り扱いに注意が必要となる．

参考文献

- [1] 阿部龍蔵 『統計力学』 (東京大学出版会; 第2版, 東京) 1992.
- [2] 高橋康 『物性研究者のための場の量子論』 (培風館, 東京) 1976.
- [3] 西川恭治, 森弘之 『統計物理学』 (朝倉書店, 東京) 2000.
- [4] G. D. Mahan, “*Many Particle Physics*” (Kluwer Academic Publishers; 3rd ed., New York) 2000.
- [5] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov and I.E. Dzyaloshinski, “*Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*” (Dover, New York) 1975.
- [6] J. R. Schrieffer, “*Theory of Superconductivity*” (Advanced Book Program, Westview Press; Revised, Oxford) 1983.

A 電流密度演算子

電流密度は, $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -e \sum_i \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ で与えられるが¹⁶⁾, このままではエルミートでないので¹⁷⁾, エルミート共役を足して $1/2$ したものを電流密度演算子と定義する.

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{-e}{2} \sum_i \{ \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{v}_i \}, \quad (\text{A.1})$$

ここで, 位置 \mathbf{r} にある電子の速度を \mathbf{v} とし, それは Heisenberg の運動方程式に従って以下で与えられる.

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \\ &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_{i,1\text{st}}, \mathbf{r}_i] \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} [(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2, \mathbf{r}_i] \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} + e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}, \mathbf{r}_i] \\ &= \frac{\mathbf{p}_i + e\mathbf{A}_i(\mathbf{r})}{m}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

ただし $\mathcal{H}_{i,1\text{st}}$ は \mathbf{r}_i にある電子のハミルトニアン (1.1) であり, 交換関係 $[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ を用いた. これから, 電流密度演算子は

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{e}{2m} \sum_i \{ \mathbf{p}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p}_i + 2e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \} \quad (\text{A.3})$$

となり, 第2量子化の方法で表すと ($\mathbf{j}_{2\text{nd}}(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{j}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$ として $\sum_i \rightarrow \int d\mathbf{r}'$ と置き換える)

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{2\text{nd}}(\mathbf{r}) &= -\frac{e\hbar}{2mi} \int d\mathbf{r}' \psi^\dagger(\mathbf{r}) \{ \nabla_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} \} \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{e\hbar}{2mi} \{ -(\nabla \psi^\dagger(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) + \psi^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) \} - \frac{e^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

¹⁶⁾ 簡単のため, ここではスピンの添字は省略した.

¹⁷⁾ 物理量を返す演算子は, 必ず固有値が実数になるエルミート行列でなければならない.

ここで $\{\dots\}$ の第 1 項については部分積分して表面項はゼロであることを用いた． $j_{2\text{nd}}$ を簡単に j と表す．

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_p(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_d(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = -\frac{e\hbar}{2mi}\{\psi^\dagger(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - (\nabla\psi^\dagger(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r})\}, \quad (\text{A.5a})$$

$$\mathbf{j}_d(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{m}\mathbf{A}(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.5b})$$

はそれぞれ常磁性電流，反磁性電流を表す電流密度演算子である．これらを式 (1.3) にそって Fourier 変換して $\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ すると

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{q}) = -e \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} a_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}, \quad (\text{A.6a})$$

$$\mathbf{j}_d(\mathbf{q}) = -\frac{e^2}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}'} \mathbf{A}(\mathbf{q}') a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'+\mathbf{q}\sigma} \quad (\text{A.6b})$$

ところで常磁性電流密度演算子の定義は

$$\mathbf{j}_p(\mathbf{r}) = \frac{\partial \mathcal{H}_{2\text{nd}}}{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r})} \quad (\text{A.7})$$

としても表される．ベクトルポテンシャルが時間に依存する場合，反磁性電流の項は以下のように書き表されるだろう．

$$\mathbf{j}_d(\mathbf{q}, t) = -\frac{e^2}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}'} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \mathbf{A}(\mathbf{q}', \omega') e^{-i\omega' t} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'+\mathbf{q}\sigma} \quad (\text{A.8})$$

B 式 (3.16) から式 (3.17) への計算の詳細

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda) = \frac{1}{\hbar} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_\lambda \tau} \langle T_\tau \tilde{j}_{p,\mu}(\mathbf{q}, \tau) \tilde{j}_{p,\nu}(-\mathbf{q}, 0) \rangle_{\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}} \quad (\text{3.16})$$

において， $\langle \dots \rangle_{\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}}$ について式 (A.6a) の Heisenberg 表示を用いて表し，Wick の定理で分解していくと ($\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}}$ は見易さのため省略する)

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle &= e^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}'\nu} \langle T_\tau \tilde{a}_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger(\tau) \tilde{a}_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\frac{q}{2}\sigma} \rangle \\ &= e^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}'\nu} \left(\langle \tilde{a}_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger(\tau) \tilde{a}_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}(\tau) \rangle \langle a_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\frac{q}{2}\sigma} \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle T_\tau a_{\mathbf{k}'-\frac{q}{2}\sigma} \tilde{a}_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau \tilde{a}_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}\sigma}^\dagger \rangle \right) \\ &= e^2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\mu} \langle \tilde{a}_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger(\tau) \tilde{a}_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}(\tau) \rangle \sum_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'\nu} \langle a_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\frac{q}{2}\sigma} \rangle \\ &\quad - e^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}'\nu} \langle T_\tau a_{\mathbf{k}'-\frac{q}{2}\sigma} \tilde{a}_{\mathbf{k}-\frac{q}{2}\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau \tilde{a}_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}\sigma}^\dagger \rangle \\ &= e^2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\mu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(0) \sum_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'\nu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}/2, \mathbf{k}'+\mathbf{q}/2}(0) \\ &\quad - e^2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}'\nu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}/2, \mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(-\tau) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \mathbf{k}'+\mathbf{q}/2}(\tau), \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

ただし $v_{\mathbf{k}0} = 1$, $v_{\mathbf{k},i} = \hbar k_i / m$ ($i = x, y, z$) である．ここで不純物平均をとり，式 (2.9) を用いると， $\mu \neq 0$ あるいは $\nu \neq 0$ では

$$\langle \dots \rangle = \delta_{\mathbf{q},0} e^2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\mu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(0) \sum_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'\nu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}(0) - e^2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}\nu} \mathcal{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}(-\tau) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}(\tau) \quad (\text{B.2})$$

となり， k あるいは k' の奇関数となりゼロとなる． $\mu = \nu = 0$ の場合，

$$\langle \dots \rangle \Big|_{\mu=\nu=0} = e^2 \rho(\mathbf{q}) \rho(-\mathbf{q}) - e^2 \sum_k \mathcal{G}_{k-\mathbf{q}/2}(-\tau) \mathcal{G}_{k+\mathbf{q}/2}(\tau) \quad (\text{B.3})$$

式 (B.1) は厳密であるが，式 (B.2) と (B.3) は正確ではなく，パーテクス補正が落ちている．つまり式 (B.1) に対して式 (2.4) を用いて $\mathcal{G}_{k,k'}$ を展開して，各項に対して不純物平均をとると，式 (B.2) や式 (B.3) の他にも項が現れるということである．それらの項はパーテクス補正と呼ばれている (図 4)．

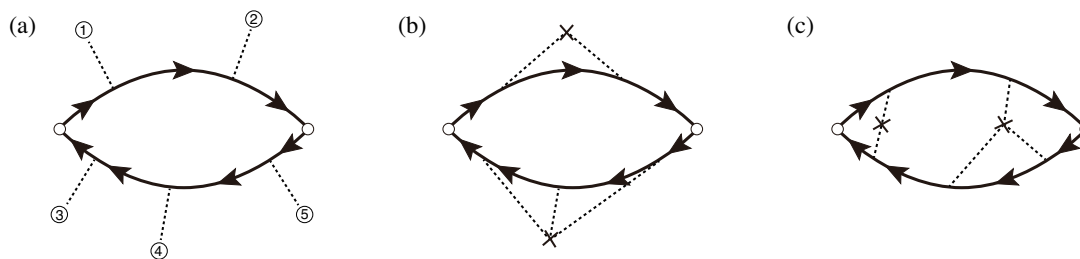


図 4 (a) 不純物ポテンシャル u を 5 つ含む $\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, i\omega_\lambda)$ の Feynman ダイアグラムの 1 例 (不純物平均をとる前)．(b) と (c) はそれに対する不純物平均をとったときの Feynman ダイアグラムの例で，(b) は不純物線 1 と 2，3-5 を結んだもので，(c) は不純物線 1 と 3，2 と 4 と 5 を結んだもの．(b) は自己エネルギーとして Green 関数に取り込まれるが，(c) のようなダイアグラムは自己エネルギーでは取り入れられない項である (パーテクス補正)．