

線形応答理論に関するノート

山影 相

2017年7月3日

概要

一般論と電気伝導度.

目次

1	線形応答の一般論	2
2	松原グリーン関数	4
3	相関関数のスペクトル表示	5
4	和の公式	6
5	電気伝導率	6
5.1	電流密度演算子	7
5.2	線形応答	7
5.3	一体問題の場合	9
5.4	ゲージ対称性	10
5.5	直流縦伝導率	12
5.6	交流縦伝導率	13
5.7	直流横伝導率	13
6	電流と線形応答	14
6.1	マクスウェル方程式	14
6.2	保存則	15
6.3	電気伝導率	16

6.4	誘電率	17
6.5	エネルギーバンド理論と電磁応答	17

1 線形応答の一般論

まずは一般的な線形応答を与える公式を導出しておく*¹. 求めたい物理量を $B(t)$ とする. これは一般に時間に依存すると考えておくことにする. その量子力学的な平均値は $\langle B(t) \rangle = \text{tr}(\rho(t)B(t))$ で与えられる. ここで $\rho(t)$ は状態の分布であり, 熱平衡においては

$$\rho(t) = \frac{e^{-H/T}}{Z} \quad (1)$$

である. H はハミルトニアンであり, T は温度. 規格化定数 Z は (大) 分配関数と呼ばれ上式から明らかに $Z = \text{tr}(e^{-H/T})$ となる.

さて, ハミルトニアンが $H_{\text{tot}}(t) = H + H_{\text{ext}}(t)$ と表されるような非平衡系における時刻 t での分布 $\rho(t)$ を知りたい. そのために以下の条件をおく.

1. $t = -\infty$ では系は熱平衡状態に達していた. $\rho(-\infty) = e^{-H/T}/Z$.
2. 時間発展はシュレディンガー方程式により一意に決まる.

これらの条件により $\rho(t)$ が次のように表される.

$$\rho(t) = \sum_n \frac{e^{-H/T}}{Z} |n(t)\rangle \langle n(t)| \quad (2)$$

ここで $|n(t)\rangle$ は時刻 t でのシュレディンガー方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle = H_{\text{tot}}(t) |n(t)\rangle \quad (3)$$

の解である. また, ハミルトニアンがエルミート共役なら上式から

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle n(t)| = -\langle n(t)| H_{\text{tot}}(t) \quad (4)$$

*¹ 線形応答理論は様々なテキストで解説されている. 例えば,
 倉本義夫「量子多体物理学」朝倉書店
 西川恭治・森弘之「統計物理学」朝倉書店
 など.

も得られる。ゆえに、 $\rho(t)$ の時間発展方程式として

$$\partial_t \rho(t) = i [\rho(t), H_{\text{tot}}(t)] \quad (5)$$

を得る。これはノイマン方程式と呼ばれる。ハイゼンベルグ方程式と見比べると、符号が異なっていることに注意する。すなわち、 ρ は物理量とは見なせない。

ノイマン方程式は厳密だが、線形応答に興味があったのだから、この H_{ext} に関する線形項だけ求める。まず $\rho(t) = \rho(-\infty) + \delta\rho(t)$ と分解すると、最低次までで

$$\partial_t \delta\rho(t) = i[\delta\rho(t), H] + i[\rho(-\infty), H_{\text{ext}}] \quad (6)$$

である。この微分方程式は定数変化法により解ける。斉次解は $\delta\rho(t) = e^{-iHt} C e^{iHt}$ である。定数 C を時間の関数と考え直すと $e^{-iHt} [\partial_t C(t)] e^{iHt} = i[\rho(-\infty), H_{\text{ext}}(t)]$ より

$$C(t) = \rho(-\infty) + i \int_{-\infty}^t dt' e^{iHt'} [\rho(-\infty), H_{\text{ext}}(t')] e^{-iHt'} \quad (7)$$

となる。以上より、

$$\rho(t) = \rho(-\infty) + i \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH(t-t')} [\rho(-\infty), H_{\text{ext}}(t')] e^{iH(t-t')} \quad (8)$$

が解となる。これを用いると時刻 t での物理量の平均 $\langle B(t) \rangle_{\text{tot}} = \text{tr}(\rho(t) B(t))$ は

$$\langle B(t) \rangle_{\text{tot}} = \langle B(t) \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \langle [H_{\text{ext}}(t'), B^H(t-t')] \rangle \quad (9)$$

と与えられる。ここで $\langle \dots \rangle = \text{tr}[\rho(-\infty) \dots]$ は外場が無いときの平均値を表す。また、 $B^H(t) = e^{iHt} B(t) e^{-iHt}$ はハイゼンベルグ表示である。

ところで、外場を $\mathbf{F}(t)$ とするとその共役な物理量 \mathbf{A} を用いて

$$H_{\text{ext}}(t) = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{F}(t) \quad (10)$$

であるから、

$$\langle B(t) \rangle_{\text{tot}} = \langle B(t) \rangle + \int_{-\infty}^t dt' \phi_{BA}(t-t') F(t') \quad (11)$$

$$\phi_{BA}(t) = i \langle [B^H(t), \mathbf{A}] \rangle \quad (12)$$

と書ける． $\phi_{BA}(t)$ は応答関数と呼ばれている．上式は時間表示であるが，振動数表示もよく用いられる．

$$\begin{aligned}\langle B(\omega) \rangle_{\text{tot}} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle B(t) \rangle_{\text{tot}} \\ &= \langle B(\omega) \rangle + \chi_{BA}(\omega) F(\omega)\end{aligned}\quad (13)$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \theta(t) \phi_{BA}(t)\quad (14)$$

ここで， $\chi_{BA}(\omega)$ は (複素) 感受率と呼ばれる．また， $B(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} B(t)$ である．

2 松原グリーン関数

線形応答を求めるには外場が無いときの遅延相関関数を求めればよいことが分かった．しかし，普通，これを容易に求めることはできないので，種々の近似法や対称性に由来する関係式などを整備しておくのが必要となる．本節では摂動論を系統的に展開するのに便利な松原グリーン関数を導入する．なお，松原グリーン関数と遅延相関関数の関係は次節で明らかになる．

松原グリーン関数を以下で定義する．

$$G_{AB}(\tau) = -\langle T_{\tau} A^{\text{H}}(-i\tau) B \rangle\quad (15)$$

ここで T_{τ} は虚時間順序積を意味し，顕わには

$$G_{AB}(\tau) = -\theta(\tau) \langle A^{\text{H}}(-i\tau) B \rangle - \eta \theta(-\tau) \langle B A^{\text{H}}(-i\tau) \rangle\quad (16)$$

と書ける．ここで $\eta = \pm 1$ は A に B 依存して決まる．例えば A, B が物理量やボーズ粒子の生成消滅演算子の場合には $\eta = 1$ であり，一方，フェルミ粒子の生成消滅演算子の場合には $\eta = -1$ が用いられる．

松原グリーン関数は $|\tau| < \beta$ の範囲で以下の周期性を満たす．

$$G_{AB}(\tau + \beta) = \eta G_{AB}(\tau)\quad (17)$$

これより， $|\tau| > \beta$ の範囲へは $|\tau| < \beta$ の関数形を周期的に拡張したものに置き換える．実際， $|\tau| > \beta$ の値が物理量と関係することはない．(反)周期 β の関数になったので，フーリエ級数展開が可能である．

$$G_{AB}(\tau) = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_{AB}(i\omega_n)\quad (18)$$

$$G_{AB}(i\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{AB}(\tau)\quad (19)$$

周期性を反映するには

$$\omega_n = \begin{cases} \nu_n = 2n\pi T, & \eta = 1 \\ \epsilon_n = (2n+1)\pi T, & \eta = -1 \end{cases} \quad (20)$$

とすればよい。 ω_n はしばしば松原振動数と呼ばれる。

3 相関関数のスペクトル表示

ここでは遅延・先進相関関数と対応する温度関数の関係をスペクトル表示を通して導出する。まず、遅延・先進グリーン関数は

$$G_{AB}^\alpha(t) = -i\alpha\theta(\alpha\tau) \langle A^H(t)B - \eta BA^H(t) \rangle \quad (21)$$

と定義される。 $\alpha = 1$ が遅延、 $\alpha = -1$ が先進グリーン関数に対応する。そのスペクトル表示は

$$G_{AB}^\alpha(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_{AB}^\alpha(t) dt = \sum_{nm} \frac{e^{-E_n/T} - \eta e^{-E_m/T}}{Z} \frac{\langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle}{\omega + E_n - E_m + i\alpha 0} \quad (22)$$

と与えられる。ここで $|n\rangle$ はエネルギーが E_n の固有状態。直ちに

$$G_{AB}^\pm(\omega) = G_{B^\dagger A^\dagger}^{\mp*} \quad (23)$$

が分かる。特に、 $A = B^\dagger$ の場合には $G_{AA^\dagger}^+ = G_{AA^\dagger}^{-*}$ である。

一方、松原グリーン関数のスペクトル表示は

$$G_{AB}(i\omega_l) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} G_{AB}(\tau) = \sum_{nm} \frac{e^{-E_n/T} - \eta e^{-E_m/T}}{Z} \frac{\langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle}{i\omega_l + E_n - E_m} \quad (24)$$

となるので両者を比較すると

$$G_{AB}^\alpha(\omega) = G_{AB}(i\omega_l \rightarrow \omega + i\alpha 0) \quad (25)$$

の解析接続により、松原グリーン関数から遅延・先進グリーン関数が求められる。

ここで、散逸を議論する際に必要になる対称相関関数

$$S_{AB}(t) = \frac{1}{2} \langle A(t)B + BA(t) \rangle \quad (26)$$

についても述べておく．そのスペクトル表示は

$$\begin{aligned}
S_{AB}(\omega) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle A(t)B + BA(t) \rangle \\
&= \frac{\pi}{Z} \sum_{nm} \left(e^{-E_n/T} + e^{-E_m/T} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(\omega + E_n - E_m) \\
&= \pi \frac{1 + e^{-\omega/T}}{Z} \sum_{nm} e^{-E_n/T} A_{nm} B_{mn} \delta(\omega + E_n - E_m)
\end{aligned} \tag{27}$$

である．

以下， $B = A^\dagger$ の場合を考える． $\eta = 1$ の遅延相関関数のスペクトル表示と比較すると

$$S_{AA^\dagger}(\omega) = -\coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \text{Im} G_{AA^\dagger}(\omega + i0) \tag{28}$$

であり， $\omega \rightarrow 0$ の極限では

$$S_{AA^\dagger}(\omega) \sim -\frac{2T}{\omega} \text{Im} G_{AA^\dagger}(+i0) \tag{29}$$

と与えられる．

4 和の公式

ω_n に関する和は松原和などと呼ばれる．これについての公式を以下に示す．

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \alpha} \frac{1}{i\omega_n - \beta} = -\eta \frac{f_\eta(\alpha) - f_\eta(\beta)}{\alpha - \beta} \tag{30}$$

$$\begin{aligned}
T \sum_n G(i\omega_n) G(i\omega_n + \omega + i0) &= \eta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi i} f_\eta(\epsilon) \{ G^-(\epsilon - \omega) [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] \\
&\quad + [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] G^+(\epsilon + \omega) \}
\end{aligned} \tag{31}$$

ここで $f_\eta(x) = (e^{x/T} - \eta)^{-1}$ はボーズ ($\eta = 1$) およびフェルミ ($\eta = -1$) 分布関数．

5 電気伝導率

以上の公式を用いて電気伝導率の表式を求める．ハミルトニアンを

$$H = \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A}) \psi(\mathbf{x}), \tag{32}$$

と表す．ベクトルポテンシャル \mathbf{A} は外場に対応する．

5.1 電流密度演算子

系に外部電場 \mathbf{E}_{bias} を印可する．これを時間依存するベクトルポテンシャル \mathbf{A}_{bias} により， $\mathbf{E}_{\text{bias}} = -\partial_t \mathbf{A}_{\text{bias}}$ と表す．このとき，電場を含む全系のハミルトニアンは

$$H_{\text{tot}} = \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A}_{\text{tot}}) \psi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{A}_{\text{tot}} = \mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{bias}}, \quad (33)$$

と書ける．系の電流密度演算子 $\hat{\mathbf{j}}_{\text{tot}}(\mathbf{x}, t)$ は

$$\hat{\mathbf{j}}_{\text{tot}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\delta H}{\delta \mathbf{A}_{\text{tot}}} = -e\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{v}}_{\text{tot}} \psi(\mathbf{x}, t), \quad \hat{\mathbf{v}}_{\text{tot}} = \frac{\partial H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A}_{\text{tot}})}{\partial(-i\nabla)}, \quad (34)$$

であるが，これを外部電場がないときの電流密度 $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}, t)$ と外部電場による変化分 $\hat{\mathbf{j}}_1(\mathbf{x}, t)$ の2つに分解 ($\hat{\mathbf{j}}_{\text{tot}} = \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{j}}_1$) する；

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}, t) = -e\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{v}} \psi(\mathbf{x}, t), \quad \hat{\mathbf{j}}_1(\mathbf{x}, t) = -e\psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\mathbf{v}}_1 \psi(\mathbf{x}, t), \quad (35)$$

ここで，

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\partial H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A})}{\partial(-i\nabla)}, \quad \hat{\mathbf{v}}_1 = R\mathbf{A}_{\text{bias}} + \mathcal{O}(A_{\text{bias}}^2), \quad (36)$$

は速度演算子であり，対称テンソル

$$R_{ij} = e \frac{\partial^2 H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A})}{\partial(-i\partial_i)\partial(-i\partial_j)}, \quad R_{ij} = R_{ji}, \quad (37)$$

は有効質量テンソルの逆に相当するものである．

また，座標と運動量の正準交換関係 $[x_i, -i\partial_j] = i\delta_{ij}$ より，速度演算子は

$$\hat{\mathbf{v}} = -i[\mathbf{x}, H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A})], \quad (38)$$

とも表せる．これはハイゼンベルグの運動方程式でもある．

5.2 線形応答

最低次では， \mathbf{j}_1 は $\mathbf{A}_{\text{bias}} = 0$ での期待値だけ考えれば良い． \mathbf{j} の線形応答は以下のように求める．ハミルトニアンは，電場の最低次までで

$$H = \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A}) \psi(\mathbf{x}) - \int d^3x \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{A}_{\text{bias}} + \mathcal{O}(A^2). \quad (39)$$

と書ける．ここまではベクトルポテンシャル \mathbf{A}_{bias} で表していたが，電場 \mathbf{E} とはフーリエ変換

$$\mathbf{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} (-\partial_t \mathbf{A}) = i\omega \mathbf{A}(\omega), \quad (40)$$

により結びつけることができる．また，電場は空間的に一様なので，応答する電流も一様ならずである．そこで， \mathbf{j} のフーリエ成分

$$\hat{\mathbf{j}}(\omega) = \int \frac{d^3x}{V} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}, t), \quad (41)$$

を考えると，(13) 式より $\mathbf{j}(\omega)$ の応答 $\mathbf{j}(\omega) = K(\omega) \mathbf{A}(\omega)$ は

$$K_{ij}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) e^{i\omega t} \left\langle \left[\int \frac{d^3x}{V} \hat{j}_i(\mathbf{x}, t), \int d^3y \hat{j}_j(\mathbf{y}, 0) \right] \right\rangle, \quad (42)$$

で与えられる．また， \mathbf{j}_1 は

$$\mathbf{j}_1(\omega) = -e \int \frac{d^3x}{V} \langle \psi^\dagger(\mathbf{x}) R \psi(\mathbf{x}) \rangle \mathbf{A}_{\text{bias}}(\omega), \quad (43)$$

である．

以下，簡単化のため，場の演算子を適当な基底関数 $\phi_\alpha(\mathbf{x})$ を用いて

$$\psi_a(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{x}) c_{\alpha a}, \quad \int d^3x \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) \phi_\beta(\mathbf{x}) = \delta_{\alpha\beta}, \quad (44)$$

と展開する．並進対称性があるなら，平面波展開

$$\psi_a(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\sqrt{V}} c_{\mathbf{k}a}, \quad (45)$$

が便利である．

電流演算子は

$$\hat{\mathbf{j}}(t) := \int \frac{d^3x}{V} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{e}{V} c_\alpha^\dagger(t) \mathbf{v}_{\alpha\beta} c_\beta(t), \quad \mathbf{v}_{\alpha\beta} = \int d^3x \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{v}} \phi_\beta(\mathbf{x}), \quad (46)$$

と表示できる．ここで，2つの添字 αa を1つにまとめて α と略記している．核 K は

$$K_{ij}(\omega) = \frac{i}{V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) e^{i\omega t} \left\langle \left[\hat{j}_i(t), \hat{j}_j(0) \right] \right\rangle, \quad (47)$$

と表せる。これは対応する温度関数

$$Q_{ij}(\tau) = \frac{1}{V} \left\langle T_\tau \hat{j}_i(-i\tau) \hat{j}_j(0) \right\rangle, \quad (48)$$

を用いて、 $K(\omega) = Q(\omega + i0)$ と求めるのが便利である。

σ_{ij} が求めたい伝導率である。顕に書くと

$$\sigma_{ij}(\omega) = -\frac{e}{i\omega} \int \frac{d^3x}{V} \langle \psi^\dagger(\mathbf{x}) R_{ij} \psi(\mathbf{x}) \rangle + \frac{K_{ij}(\omega)}{i\omega}, \quad (49)$$

である。この式は $\omega \rightarrow 0$ で発散するように見えるが、実は第一項と第二項が相殺して有限値になる (5.4 節で説明する)。

(49) 式の第一項は

$$-\frac{e}{i\omega V} \left\langle c_{\alpha a}^\dagger [R_{ij}]_{ab}^{\alpha\beta} c_{\beta b} \right\rangle = -\frac{e}{i\omega V} [R_{ij}]_{ab}^{\alpha\beta} G_{\beta b; \alpha a}(-0), \quad (50)$$

となる。ここで、

$$[R_{ij}]_{ab}^{\alpha\beta} = \int d^3x \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) [R_{ij}]_{ab} \phi_\beta(\mathbf{x}). \quad (51)$$

$v_{\alpha\beta}$ と同様に、これを行列と見て

$$-\frac{e}{i\omega V} \text{tr}[R_{ij} G(\tau = -0)] = -\frac{e}{\omega V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} f(\epsilon) \text{tr} \{ R_{ij} [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] \}, \quad (52)$$

と表すことにする。

5.3 一体問題の場合

ここまでは線形応答による電気伝導率の一般的な表式であり、電子間相互作用がある場合にも適用できる形式であったが、ここからは一体問題の範囲で議論する。^{*2} ウィックの定理を用いて簡単化すると、温度関数は

$$Q_{ij}(\tau) = -\frac{e^2}{V} \text{tr} [v_i G(\tau) v_j G(-\tau)], \quad (53)$$

$$\begin{aligned} Q_{ij}(i\nu_n) &= \int_0^{T^{-1}} d\tau e^{i\nu_n \tau} Q_{ij}(\tau) \\ &= -\frac{e^2}{V} T \sum_m \text{tr} [v_i G(i\epsilon_m + i\nu_n) v_j G(i\epsilon_m)], \end{aligned} \quad (54)$$

^{*2} A. Bastin, C. Lewiner, O. Betbeder-matibet, and P. Nozieres, J. Phys. Chem. Sol. **32**, 1811 (1971).

と与えられる。ここで一体の松原グリーン関数

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = -\left\langle T_{\tau} c_{\alpha}(-i\tau) c_{\beta}^{\dagger} \right\rangle, \quad G_{\alpha\beta}(i\epsilon_n) = \int_0^{T^{-1}} d\tau e^{i\epsilon_n \tau} G_{\alpha\beta}(\tau), \quad (55)$$

を導入した。一体問題の場合には逆行列を用いて

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \quad (56)$$

と表示できる。これはシュレディンガー方程式のグリーン関数 \hat{G} ;

$$[z - H(\mathbf{x}, -i\nabla + e\mathbf{A}/c)]\hat{G}(\mathbf{x} - \mathbf{y}, z) = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (57)$$

の行列要素にもなっている*³;

$$[G(z)]_{\alpha\beta} = \int d^3x \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}) \hat{G}(\mathbf{x}, z) \phi_{\beta}(\mathbf{x}). \quad (58)$$

$i\nu_n \rightarrow \omega + i0$ と解析接続すると

$$\begin{aligned} K_{ij}(\omega) &= Q_{ij}(\omega + i0) \\ &= -\frac{e^2}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) \text{tr} [v_i G^+(\epsilon + \omega) v_j A(\epsilon) + v_i A(\epsilon) v_j G^-(\epsilon - \omega)], \end{aligned} \quad (59)$$

が得られる。ここで

$$A(\epsilon) = i \frac{G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)}{2\pi}, \quad (60)$$

を定義した。 $G^{++} = G^-$ より、 $A(\epsilon)$ の対角成分はスペクトル関数である。

$$A_{\alpha\alpha}(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha\alpha}^+(\epsilon). \quad (61)$$

慣例に従い $A(\epsilon)$ と記したが、ベクトルポテンシャルと混同しないように注意。

5.4 ゲージ対称性

ここで $\omega = 0$ を考える。

$$K_{ij}(0) = \frac{e^2}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi i} f(\epsilon) \text{tr} [v_i G^+(\epsilon) v_j G^+(\epsilon) - v_i G^-(\epsilon) v_j G^-(\epsilon)]. \quad (62)$$

*³ 多体問題におけるグリーン関数の名前の由来と思われる。

定数のベクトルポテンシャル \mathbf{A} をハミルトニアンに加えたとする．このとき，行列の関係式として

$$\frac{\partial G^\pm(\epsilon)}{\partial \mathbf{A}} = G^\pm(\epsilon) \frac{\partial H}{\partial \mathbf{A}} G^\pm(\epsilon) = e G^\pm(\epsilon) \mathbf{v} G^\pm(\epsilon), \quad (63)$$

が成立するので，

$$K_{ij}(0) = \frac{e}{V} \int \frac{d\epsilon}{2\pi i} f(\epsilon) \text{tr} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial A_i} [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] \right)_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} v_j \right\}, \quad (64)$$

である．一方，

$$R_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial A_j} = \frac{\partial v_j}{\partial A_i}, \quad (65)$$

であるから，

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \sigma_{ij}(\omega) &= -\frac{e}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} f(\epsilon) \text{tr} \left\{ [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] R_{ij} \right\} + \frac{K_{ij}(0)}{i} \\ &= -\frac{e}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} f(\epsilon) \text{tr} \left\{ [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] \left(\frac{\partial v_j}{\partial A_i} \right)_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial}{\partial A_i} [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] \right)_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} v_j \right\} \\ &= -\frac{e}{V} \frac{\partial}{\partial A_i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} f(\epsilon) \text{tr} \left\{ [G^+(\epsilon) - G^-(\epsilon)] v_j \right\} \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} \\ &= -i \frac{\partial}{\partial A_i} \langle \hat{j}_j \rangle \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}}, \end{aligned} \quad (66)$$

とまとめられる．

$$\langle \hat{j}_j \rangle = - \int \frac{d^3x}{V} \langle \psi^\dagger(x) e v_j \psi(x) \rangle = -\frac{i}{V} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} f \text{tr} [(G^+ - G^-) e v_j], \quad (67)$$

は外場がない状態での電流の期待値である．ここで，人為的に加えていたベクトルポテンシャル \mathbf{A} は定数であった．これにより物理量はベクトルポテンシャルを印加する前のものと同じはずなので，結局， $\langle \hat{j}_j \rangle = 0$,^{*4} 上式は零ということになる．導出を振り返ると，ベクトルポテンシャルが $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ と取り込まれること，すなわち， \mathbf{A} がゲージ場であること，また，系はゲージ対称性をもっていることに起因していることが分かる．

*4 平衡状態では電流が流れていない．

以上から、 $\sigma_{ij}(\omega)$ において $1/\omega$ の項は零になることが分かった。したがって、

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{K_{ij}(\omega) - K_{ij}(0)}{i\omega}, \quad (68)$$

と求められる。

5.5 直流縦伝導率

直流縦伝導率 $\sigma_i = \sigma_{ii}(0)$ は

$$\sigma_i = -i \left. \frac{\partial K_{ii}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} = \frac{2\pi e^2}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) \text{tr} \left[v_i A(\epsilon) v_i \frac{\partial A(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right], \quad (69)$$

と表せる。さらに、部分積分すれば

$$\sigma_i = \frac{\pi e^2}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left[-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right] \text{tr} [v_i A(\epsilon) v_i A(\epsilon)] \quad (70)$$

であり、 $T = 0$ では

$$\sigma_i = \frac{\pi e^2}{V} \text{tr} [v_i A(0) v_i A(0)] \quad (71)$$

となる。これが Bastin 公式である。

ドルーデ伝導率

ここで最も簡単な例として、自由電子系 $H = p^2/2m$ を考える。ただし、不純物ポテンシャルにより緩和時間 $\tau < \infty$ が生じると仮定する。すなわち、電子のグリーン関数を現象論的に

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\tau^{-1}} \quad (72)$$

とおく。Bastin 公式に代入すると三次元系では

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_x^2 \frac{\tau}{\pi} \delta(\epsilon_F - \epsilon_k) = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (73)$$

を得る。これはドルーデによって導かれた伝導率である。計算の途中でローレンツ関数の二乗が現れるが、 τ が大きいとして片方をデルタ関数に置き換えている。また $v_x^2 \rightarrow v_F^2/3$ としている。単位体積当りの状態密度は

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon_F - \epsilon_k) = \frac{3n}{2mv_F^2} \quad (74)$$

である。 n は粒子密度。

5.6 交流縦伝導率

次に $\omega \neq 0$ の交流縦伝導率（光学縦伝導率） $\sigma_{ii}(\omega)$ を導出する．これは一般に複素数であるが，その実部 $\text{Re}\sigma_{ii}(\omega) = [\text{Im}K_{ii}(\omega) - \text{Im}K_{ii}(0)]/\omega$ に着目する． $G^{\pm\dagger} = G^{\mp}$ と $v_i^{\dagger} = v_i$ より，

$$\text{Im}K_{ii}(\omega) = \frac{\pi e^2}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left[f\left(\epsilon - \frac{\omega}{2}\right) - f\left(\epsilon + \frac{\omega}{2}\right) \right] \text{tr} \left[v_i A\left(\epsilon - \frac{\omega}{2}\right) v_i A\left(\epsilon + \frac{\omega}{2}\right) \right], \quad (75)$$

と求められる． $T = 0$ では，

$$\text{Im}K_{ii}(\omega) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{\pi e^2}{V} \int_{-\omega/2}^{\omega/2} d\epsilon \text{tr} \left[v_i A\left(\epsilon - \frac{\omega}{2}\right) v_i A\left(\epsilon + \frac{\omega}{2}\right) \right]. \quad (76)$$

再び，例としてドルーデ伝導率を考えよう．同様に，フェルミ面での速度の平均は $v_i^2 \sim v_F^2/3$ とし，緩和時間は十分に長いとすると，

$$\text{Re}\sigma_{ii}(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\tau^{-1}}{\omega^2 + \tau^{-2}}, \quad (77)$$

である．

5.7 直流横伝導率

直流 $\omega = 0$ のホール伝導率 $\sigma_{ij}(0)$ は

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(0) &= -i \left. \frac{\partial K_{ij}}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \\ &= -i \frac{e^2}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\epsilon) \text{tr} \left[v_i \frac{G^+(\epsilon)}{\partial \epsilon} v_j A(\epsilon) - v_i A(\epsilon) v_j \frac{G^-(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right]. \end{aligned} \quad (78)$$

一休問題の場合には，ハミルトニアンを対角化する基底で簡単になる：

$$\sigma_{ij}(0) = -i \frac{e^2}{V} \frac{f(E_\alpha) - f(E_\beta)}{(E_\alpha - E_\beta + i0)^2} (v_i)_{\alpha\beta} (v_j)_{\beta\alpha}. \quad (79)$$

5.7.1 $j \perp B$ のとき

5.7.2 トポロジカル不変量

6 電流と線形応答

この節では、スカラー、およびベクトルポテンシャルに対する電流の線形応答を一般的な見地から議論し、その対称性についてまとめておく。記号の簡単化、そして対称性を見易くするために四元電流密度 j_μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$ を

$$(j_0, j_1, j_2, j_3) = (-ec\rho, j_x, j_y, j_z), \quad (80)$$

と導入する。ここで ρ は粒子密度、 $-e\rho$, $e > 0$ は電子の電荷密度、 c は光速である。以下では自然単位系を採り、 $c = 1$ とする。ベクトルポテンシャルも四元ベクトルとして

$$(A_0, A_1, A_2, A_3) = (c\phi, A_x, A_y, A_z), \quad (81)$$

と定義する。座標 x_μ とその微分 ∂_μ は

$$(x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, x, y, z), \quad (\partial_0, \partial_1, \partial_2, \partial_3) = (-\partial_t/c, \partial_x, \partial_y, \partial_z), \quad (82)$$

とし、四元ベクトル A_μ と B_μ の内積は

$$A_\mu B_\mu = -A_0 B_0 + A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3, \quad (83)$$

と定める。

6.1 マクスウェル方程式

まず、マクスウェル方程式を振り返っておこう。ガウス単位系で、

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi(\rho_{\text{ex}} + \rho_{\text{in}}) \quad (84)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (85)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (86)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} (\mathbf{j}_{\text{ex}} + \mathbf{j}_{\text{in}}) \quad (87)$$

である。 ρ_{ex} , \mathbf{j}_{ex} と ρ_{in} , \mathbf{j}_{in} はそれぞれ外から与えた、そして誘起された電荷密度と電流密度である。電束密度 \mathbf{D} と電場 \mathbf{E} は

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} \quad (88)$$

で結びつけられている。 \mathbf{D} は外から与えた電荷から決まり、 \mathbf{P} はそれによって誘起される電気分極である。これらは以下の関係式に従う。

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho_{\text{ex}}, \quad \dot{\mathbf{j}}_{\text{ex}} = -\frac{1}{4\pi} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \frac{\partial \rho_{\text{ex}}}{\partial t} + \nabla \cdot \dot{\mathbf{j}}_{\text{ex}} = 0 \quad (89)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_{\text{in}}, \quad \dot{\mathbf{j}}_{\text{in}} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}, \quad \frac{\partial \rho_{\text{in}}}{\partial t} + \nabla \cdot \dot{\mathbf{j}}_{\text{in}} = 0 \quad (90)$$

$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ から、ベクトルポテンシャルが $\mathbf{B} = \nabla \times (\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{in}})$ と導入される。 \mathbf{A} が外から与えた電流分布から生じ、 \mathbf{A}_{in} が誘起された分である。さらに、マクスウェル方程式の第三式 (電磁誘導),

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial (\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{in}})}{\partial t} \right) = 0 \quad (91)$$

より、スカラーポテンシャルが

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial (\mathbf{A} + \mathbf{A}_{\text{in}})}{\partial t} - \nabla (\phi + \phi_{\text{in}}) \quad (92)$$

と導入される。やはり、 ϕ が外から与えた電荷分布により生じ、 ϕ_{in} が誘起されるスカラーポテンシャルである。これらを分割して

$$\mathbf{D} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi \quad (93)$$

$$-4\pi \mathbf{P} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_{\text{in}}}{\partial t} - \nabla \phi_{\text{in}} \quad (94)$$

と表すことができる。再び、 \mathbf{D} は外から与えた分布だけで決まっていることに注意しよう。

6.2 保存則

さて、線形応答理論によれば電流の応答 $j_{\text{in},\mu}(\mathbf{r}, t)$ は

$$j_{\text{in},\mu}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' dt' K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') A_\nu(\mathbf{r}', t'), \quad (95)$$

と書けた。繰り返して現れている添え字については和をとるものとする。以降では記号の簡単のため、 $j_{\text{in},\mu} = j_\mu$ と書く。

まず、ゲージ対称性を確認する。ゲージ変換は適当なスカラー関数 χ を用いて

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \chi, \quad (96)$$

と表せる．この変換に対して電流が不変であるためには

$$\int d\mathbf{r}' dt' K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \partial'_\nu \chi(\mathbf{r}', t') = 0, \quad (97)$$

でなければならない．これが任意の χ に対して成り立つためには

$$\partial'_\nu K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0, \quad (98)$$

が要請される．また，一様系では $K_{\mu\nu}$ は $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ および $t - t'$ だけの関数であるから

$$\partial_\nu K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0, \quad (99)$$

という条件も要請される．一方，電荷は保存量であるから， $\partial_\mu j_\mu = 0$ ，すなわち，

$$\partial_\mu K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0, \quad (100)$$

が成立する．

以上は実時空で表示した場合の関係式であるが，一様系では逆空間で議論するのが便利である．フーリエ展開を

$$K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = c \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} e^{iq_\mu(x_\mu - x'_\mu)} K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega), \quad (101)$$

$(q_0, q_1, q_2, q_3) = (\omega/c, q_x, q_y, q_z)$ とすると，線形応答の関係式は逆空間で簡単になる．

$$j_\mu(\mathbf{q}, \omega) = K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) A_\nu(\mathbf{q}, \omega). \quad (102)$$

また，ゲージ対称性および電荷保存則は

$$q_\mu K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) = K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) q_\nu = 0, \quad (103)$$

とまとめられる．

6.3 電気伝導率

ここまではベクトルポテンシャルに対する応答として見てきたが，物理量としては，電場に対する応答と見直した便利である．そこで，式 (93) の逆空間での表現

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) = i \frac{\omega}{c} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) - i \mathbf{q} \phi(\mathbf{q}, \omega) \quad (104)$$

と電荷保存則 (103) を代入することで，

$$j_i(\mathbf{q}, \omega) = -i \frac{c}{\omega} K_{ij}(\mathbf{q}, \omega) D_j(\mathbf{q}, \omega) \quad (105)$$

となる。以降、ギリシャ文字は 0,1,2,3, ローマ文字は空間成分 1,2,3 を指定するものと決める。 D を E で表すために、 $D_i(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_{ij}(\mathbf{q}, \omega) E_j(\mathbf{q}, \omega)$ として誘電率テンソル ϵ_{ij} を導入しておくことと便利である：

$$j_i(\mathbf{q}, \omega) = -i \frac{c}{\omega} K_{ij}(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_{jk}(\mathbf{q}, \omega) E_k(\mathbf{q}, \omega) \quad (106)$$

電気伝導率は電流と電場の係数として

$$\sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = -i \frac{c}{\omega} K_{ik}(\mathbf{q}, \omega) \epsilon_{kj}(\mathbf{q}, \omega) \quad (107)$$

と定義される。

6.4 誘電率

上で電気伝導率を導出できたが、これを求めるには誘電率を知らなければならない。そのために、 $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$ より、 $-4\pi\mathbf{P} = (\epsilon^{-1} - 1)\mathbf{D}$ として、この時間微分から、 $4\pi\mathbf{j}_{\text{in}} = -i\omega(\epsilon^{-1} - 1)\mathbf{D}$ を得る。 $\mathbf{j}_{\text{in}} = \partial_t\mathbf{P}$ であるが、この誘起された電流 \mathbf{j}_{in} は式 (105) の \mathbf{j} に他ならない ($\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{in}}$)。したがって、

$$\epsilon^{-1} = 1 + \frac{4\pi c}{\omega^2} K \quad (108)$$

と、空間成分 K_{ij} から誘電率が求められる。さらに、時間成分と結びつけることもできる。式 (90) から、 $\rho_{\text{in}} = -i\mathbf{q} \cdot \mathbf{P} = -i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{D} - \mathbf{E})/4\pi = -i\mathbf{q} \cdot (1 - \epsilon^{-1})\mathbf{D}/4\pi$ であり、さらに、式 (93) を代入すると、 $\rho_{\text{in}} = -i\mathbf{q} \cdot (1 - \epsilon^{-1})(i\omega\mathbf{A} - i\mathbf{q}A_0)/4\pi c$ である。これを電荷密度の線形応答 $c\rho_{\text{in}} = -K_{00}A_0 + K_{0i}A_i$ と比較すると、

$$\epsilon_{ij}^{-1} = \delta_{ij} - 4\pi \frac{q_i q_j}{q^4} K_{00} \quad (109)$$

$$\epsilon_{ij}^{-1} = \delta_{ij} - \frac{4\pi q_j}{\omega q^2} K_{0i} \quad (110)$$

と表せる。

6.5 エネルギーバンド理論と電磁応答

ここからは固体中電子のエネルギーバンドを想定し、線形応答の更なる関係式を導出する。

6.5.1 格子模型と電流

線形応答を考える前に，バンド理論と有効質量理論^{*5}を振り返っておくのが有用である．まず，基本的な模型として格子模型を与える．ハミルトニアンは

$$H = \sum_{mn} c_m^\dagger t_{mn} c_n, \quad t_{mn} = t_{nm}^* \quad (111)$$

とする． \mathbf{m}, \mathbf{n} は格子点の座標を表すベクトル．並進対称性から，跳び移り行列は $t_{mn} = t_{\mathbf{m}-\mathbf{n}}$ と書いても良い．フーリエ展開を

$$c_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} c(\mathbf{k}), \quad t_{\mathbf{m}-\mathbf{n}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{m}-\mathbf{n})} H(\mathbf{k}), \quad (112)$$

とすると，ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\mathbf{k}} c^\dagger(\mathbf{k}) H(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \quad (113)$$

と変形される．行列 $H(\mathbf{k})$ を対角化するとエネルギーバンドが求められる．

この系にベクトルポテンシャルを印可する．格子模型においてはベクトルポテンシャルはパイエルス位相として表現される．

$$H = \sum_{mn} c_m^\dagger \exp \left[-ie\mathbf{A} \left(\frac{\mathbf{m} + \mathbf{n}}{2} \right) \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n}) \right] t_{mn} c_n \quad (114)$$

このとき，リンク \mathbf{l} における電流密度演算子は

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_l &= -\frac{\delta H}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{l})} \\ &= i\frac{e}{V} \sum_{mn} (\mathbf{m} - \mathbf{n}) \delta_{\mathbf{l}, (\mathbf{m}+\mathbf{n})/2} c_m^\dagger e^{-ie\mathbf{A}(\mathbf{l})\cdot(\mathbf{m}-\mathbf{n})} t_{mn} c_n \end{aligned} \quad (115)$$

である．常磁性電流密度 \mathbf{j}_p と反磁性電流密度 \mathbf{j}_d に分けると，

$$\mathbf{j}_{pl} = i\frac{e}{V} \sum_{mn} (\mathbf{m} - \mathbf{n}) \delta_{\mathbf{l}, (\mathbf{m}+\mathbf{n})/2} c_m^\dagger t_{mn} c_n \quad (116)$$

$$\mathbf{j}_{dl} = \frac{e^2}{V} \sum_{mn} (\mathbf{m} - \mathbf{n}) \mathbf{A}(\mathbf{l}) \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n}) \delta_{\mathbf{l}, (\mathbf{m}+\mathbf{n})/2} c_m^\dagger t_{mn} c_n + O(A^2) \quad (117)$$

^{*5} J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).

となる．そのフーリエ成分は

$$\begin{aligned} j_p(\mathbf{q}) &= \sum_l e^{-i\mathbf{q}\cdot l} j_{pl} \\ &= -\frac{e}{V} \sum_{\mathbf{k}} c^\dagger \left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} c \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \end{aligned} \quad (118)$$

$$\begin{aligned} j_d(\mathbf{q}) &= \sum_l e^{-i\mathbf{q}\cdot l} j_{dl} \\ &= -\frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c^\dagger \left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \frac{\partial^2 H(\mathbf{q}')}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}'} \Big|_{\mathbf{q}'=(\mathbf{k}+\mathbf{k}')/2} \cdot \mathbf{A} \left(\frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}{2} \right) c \left(\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \end{aligned} \quad (119)$$

と与えられる．

6.5.2 パイエルス位相

ここでパイエルス位相の導出に触れておく．シュレディンガー方程式においては，ベクトルポテンシャルは運動量 $\mathbf{k} = -i\nabla$ を $\mathbf{k} \rightarrow \pi = -i\nabla - q\mathbf{A}$ と置き換えるようにして入る．しかし格子模型においては空間微分が定義されないので，ベクトルポテンシャルの入り方は自明ではない．ここでは格子模型の連続極限を考え，そこで現れる微分を置き換えることでベクトルポテンシャルの導入を試みる．まず，

$$\begin{aligned} H &= \sum_{mn} c_m^\dagger t_{mn} c_n \\ &= \int d^3x \psi^\dagger(\mathbf{x}) \\ &\quad \times \sum_{mn} \exp \left(\overleftarrow{\nabla} \cdot \frac{\mathbf{m} - \mathbf{n}}{2} \right) t_{mn} \delta \left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{m} + \mathbf{n}}{2} \right) \exp \left(\frac{\mathbf{n} - \mathbf{m}}{2} \cdot \overrightarrow{\nabla} \right) \psi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (120)$$

と，連続場 $\psi(\mathbf{x})$; $\psi(\mathbf{n}) = c_n$ を用いて表示する．この表示は $H = H^\dagger$ となっていることに注意．ここで微分を $\nabla \rightarrow \nabla - iq\mathbf{A}$ と置き換えることでベクトルポテンシャルが導入される．すなわち，格子模型においてはベクトルポテンシャルは

$$t_{mn} \rightarrow t_{mn} \exp \left[iq(\mathbf{m} - \mathbf{n}) \cdot \mathbf{A} \left(\frac{\mathbf{m} + \mathbf{n}}{2} \right) \right] \quad (121)$$

のように，位相の形で現れる．これがパイエルス位相である．なお，しばしばパイエルス位相は

$$\exp \left[iq \int_n^m d\mathbf{x} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) \right] \quad (122)$$

とも書かれる。両者の違いは格子定数程度であり、格子間隔より短いスケールを議論しない格子模型では、その違いは顕著にならない。後者の方がコンパクトな形であり、対称性を見るのにも都合がよい。一方で、実際の計算では前者が用いられる。

6.5.3 磁場効果についてのコメント

パイエルス位相の形でベクトルポテンシャルの効果を記述できることが分かったので、ハミルトニアン

$$H = \sum_{mn} c_m^\dagger t_{mn} \exp \left[iq(\mathbf{m} - \mathbf{n}) \cdot \mathbf{A} \left(\frac{\mathbf{m} + \mathbf{n}}{2} \right) \right] c_n$$

が対角化できれば、電磁場中の全ての現象を記述できる。だが、実際にそのようなことは困難であるし、そもそも興味が無い。最も重要なのは外場に対する低次の応答であり、特に線形応答である。式 (118), (119) によって電流演算子を定義できたので、ベクトルポテンシャルに対する線形応答理論に従い、相関関数を計算すれば電荷、電流の線形応答を知ることができる。

一方、系に磁場を印可したとき、これに応じて磁化が誘起される、という見方も出来るはずである。実際、磁場に対して、電子はスピンによる磁気モーメントも応答するから、磁場とその共役な物理量としての磁気モーメントが応答を示すという見方は自然である。そこで、以降の節では磁気モーメント \mathbf{M} の表式を導く。

6.5.4 磁気モーメント

磁気モーメントは原子のスピン／軌道角運動量から生じるもの（運動量に依存しない）と、格子上の運動（～円電流）によって生じるもの（運動量に依存する）の二つの寄与からなる。以下ではこれらを順に導出する。

ランダウの g 因子

まず原子軌道がもつ磁気モーメントを説明する。軌道角運動量を \mathbf{L}_{atom} 、スピンを \mathbf{S} とする。これらがつくる磁気モーメント \mathbf{M}_{atom} は

$$\mathbf{M}_{\text{atom}} = -\mu_B(\mathbf{L}_{\text{atom}} + g\mathbf{S}) \quad (123)$$

となる。負符号は電子の電荷が負であることに依る。 $\mu_B = e\hbar/(2m_e c) > 0$ はボーア磁子、 g は磁気回転比であり、真空偏極を考えなければ $g = 2$ である。一方、スピン軌道相

表1 立方晶における p 電子のランデ g 因子. 一列目は立方晶の既約表現.

Γ	J	L	S	g_L
Γ_6	1/2	0	1/2	2
Γ_7	1/2	1	1/2	2/3
Γ_8	3/2	1	1/2	4/3

相互作用があれば全角運動量 $\mathbf{J}_{\text{atom}} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ を導入して

$$\mathbf{M}_{\text{atom}} = -g_L \mu_B \mathbf{J} \quad (124)$$

と表すのが自然である. 係数 g_L は以下のように求める. 上二式を比較して, $\mathbf{L} + g\mathbf{S} = g_L \mathbf{J}$. この両辺に \mathbf{J} を乗じて, $\mathbf{L}^2 = L(L+1)$, $\mathbf{S}^2 = S(S+1)$, $\mathbf{J}^2 = J(J+1)$, $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]/2$ を代入すればよい. $g = 2$ とすると,

$$g_L = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (125)$$

である. この g_L はランデの g 因子と呼ばれる. 典型的な場合の値を表1にまとめた.

結晶中では, 各格子点においてゼーマンエネルギー $-\mathbf{M}_{\text{atom}} \cdot \mathbf{B}$ が生じることになる. 結晶全体では, そのエネルギーは

$$H_{Z,\text{atom}} = \sum_m c_m^\dagger (-\mathbf{M}_{\text{atom}} \cdot \mathbf{B}) c_m = \sum_{\mathbf{k}} c^\dagger(\mathbf{k}) (-\mathbf{M}_{\text{atom}} \cdot \mathbf{B}) c(\mathbf{k}) \quad (126)$$

となる. \mathbf{M}_{atom} は m に依存しないことに注意.

バンド効果

次に格子上の運動, すなわちバンド効果による磁気モーメントの寄与を求める. これは多バンド系, あるいは狭ギャップ半導体では主要な寄与を果たす. ここではバンド効果による磁気モーメントを有効質量の考え方に従って導出する. まず有効質量理論^{*6} を述べる. ここまではブリルアン域全体で模型を議論してきたが, 別な考え方として, ブリルアン域のある点 \mathbf{k}_0 近傍を局所的に扱うことを考えよう. 例えば半導体ではバンド端近傍の電子状態を考えれば十分である. 線形応答の範囲で議論するので, ハミルトニアンを

^{*6} J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955); M. Graf and P. Vogl, Phys. Rev. B **51**, 4940 (1995).

$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ の周りで 2 次まで展開する.

$$H(\mathbf{k}) = H(\mathbf{k}_0) + \frac{\partial H(\mathbf{k}_0)}{\partial \mathbf{k}_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \frac{\partial^2 H(\mathbf{k}_0)}{\partial \mathbf{k}_0 \partial \mathbf{k}_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad (127)$$

ハミルトニアン固有状態を $|n(\mathbf{k})\rangle$, $H(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle = E_n(\mathbf{k})|n(\mathbf{k})\rangle$ とすると, このバンド基底で, バンド m とバンド n だけに着目し, kp 摂動論によって他のバンドの効果をくりこむことで

$$H_{mn}(\mathbf{k}) = E_m(\mathbf{k}_0)\delta_{mn} + \mathbf{v}_{mn}(\mathbf{k}_0)(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad (128)$$

であるから, バンド m, n の有効質量テンソル $[m_{mn}(\mathbf{k}_0)]_{ij}$ は

$$m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0) = \sum_{m' \neq m} \left[\frac{\mathbf{v}_{mm'}(\mathbf{k}_0)\mathbf{v}_{m'n}(\mathbf{k}_0)}{E_m(\mathbf{k}_0) - E_{m'}(\mathbf{k}_0)} + \frac{\mathbf{v}_{mm'}(\mathbf{k}_0)\mathbf{v}_{m'n}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{m'}(\mathbf{k}_0)} \right] + \frac{\partial^2 H_{mn}(\mathbf{k}_0)}{\partial \mathbf{k}_0 \partial \mathbf{k}_0} \quad (129)$$

と与えられる. 実際のバンド m の有効質量は対角成分 $m_{mm}(\mathbf{k}_0)$ である. なお, これらの結果は格子模型 (111) から直接得られるエネルギーバンドと整合する.

Roth の公式

さて, 本題であるバンド効果による磁気モーメントの導出に移る. 有効質量理論においてはパイエルスの置き換え (Peierls substitution^{*7}), $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \rightarrow \boldsymbol{\pi} = -i\nabla + e\mathbf{A}$ によりベクトルポテンシャルを取り込める^{*8}. $\boldsymbol{\pi}$ の非可換性は磁場 \mathbf{B} を導く;

$$\pi_i \pi_j = \frac{1}{2} \{\pi_i, \pi_j\} + \frac{1}{2} [\pi_i, \pi_j] = \frac{1}{2} \{\pi_i, \pi_j\} - i\epsilon_{ijk} \frac{eB_k}{2} \quad (130)$$

この置き換えによって \mathbf{k}_0 近傍のハミルトニアンは, バンド m と n だけに着目し, 他のバンドを消去すると

$$\begin{aligned} H_{mn}(\boldsymbol{\pi}) &= E_m(\mathbf{k}_0)\delta_{mn} + \mathbf{v}(\mathbf{k}_0)\boldsymbol{\pi} + \frac{1}{2}[m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)]_{ij}\pi_i\pi_j \\ &= E_m(\mathbf{k}_0)\delta_{mn} + \mathbf{v}(\mathbf{k}_0)\boldsymbol{\pi} + \frac{1}{2} \frac{[m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)]_{ij} + [m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)]_{ji}}{2} \frac{\{\pi_i, \pi_j\}}{2} \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{[m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)]_{ij} - [m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)]_{ji}}{2} \frac{[\pi_i, \pi_j]}{2} \end{aligned} \quad (131)$$

$$\begin{aligned} H_{mn}(\boldsymbol{\pi}) &= E_m(\mathbf{k}_0)\delta_{mn} + \mathbf{v}_{mn}(\mathbf{k}_0) \cdot (-i\nabla) + \frac{1}{2}(-i\nabla) \cdot m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0) \cdot (-i\nabla) \\ &\quad - \mathbf{J}_{mn} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{M}_{mn} \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (132)$$

^{*7} R. Peierls, Z. Phys., **80**, 763 (1933).

^{*8} $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ 近傍を再現する連続体模型を設定したことに対応する.

の形にまとめられる。電流密度は

$$\mathbf{J}_{\text{pmn}}(\mathbf{k}_0) = \frac{-e}{V} \mathbf{v}_{mn}(\mathbf{k}_0) + \frac{-e}{V} \frac{m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0) + m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)^{\text{T}}}{2} \mathbf{k} \quad (133)$$

$$\mathbf{J}_{\text{dmn}}(\mathbf{k}_0) = \frac{-e^2}{V} \frac{m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0) + m_{mn}^{-1}(\mathbf{k}_0)^{\text{T}}}{2} \mathbf{A} \quad (134)$$

である。最後に、バンド効果による磁気モーメントは

$$\mathbf{M}_{mn}(\mathbf{k}_0) = im_e \mu_{\text{B}} \sum_{m' \neq m} \frac{1}{2} \left[\frac{\mathbf{v}_{mm'}(\mathbf{k}_0) \times \mathbf{v}_{m'n}(\mathbf{k}_0)}{E_m(\mathbf{k}_0) - E_{m'}(\mathbf{k}_0)} + \frac{\mathbf{v}_{mm'}(\mathbf{k}_0) \times \mathbf{v}_{m'n}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{m'}(\mathbf{k}_0)} \right] \quad (135)$$

である。 $\partial^2 H(\mathbf{k}_0) / \partial k_{0i} \partial k_{0j}$ は ij に関して対称テンソルであることに注意。この結果は Roth の公式^{*9}と呼ばれている。

バンド理論におけるゼーマン効果

これらを踏まえて、ゼーマン効果のハミルトニアンについて整理する。今、 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ におけるハミルトニアンがバンド基底で

$$H_{\text{band}}(\mathbf{k}_0) = \text{diag}(H_1(\mathbf{k}_0), \dots, H_M(\mathbf{k}_0)) \quad (136)$$

と書けたとする。 $H_i(\mathbf{k}_0) = E_i(\mathbf{k}_0)1$ は $g_i(\mathbf{k}_0) \times g_i(\mathbf{k}_0)$ 行列とする。 $g_i(\mathbf{k}_0)$ は固有値 $E_i(\mathbf{k}_0)$ の縮退度である。式 (123) 及び (135) の効果によりこれらの縮退はとける。各々のブロック内で $\mathbf{M}(\mathbf{k}_0) = \mathbf{M}_{\text{atom}} + \mathbf{M}_{\text{band}}(\mathbf{k}_0)$ を制限 ($M_i(\mathbf{k}_0) = P_i(\mathbf{k}_0)\mathbf{M}(\mathbf{k}_0)P_i(\mathbf{k}_0)$, $P_i(\mathbf{k}_0) = \sum_{m=1}^{g_i(\mathbf{k}_0)} |m; E_i(\mathbf{k}_0)\rangle \langle m; E_i(\mathbf{k}_0)|$) し、 $H_i(\mathbf{k}_0) \rightarrow H_i(\mathbf{k}_0) - \mathbf{M}_i(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B}$ と置き換えたものが磁場中のハミルトニアンである。例えば、 \mathbf{k}_0 が時間反転対称点であり、かつ、クラマース縮退以外の縮退が無いとすると、

$$H_1(\mathbf{k}_0) = \begin{pmatrix} E_1(\mathbf{k}_0) - \mathbf{M}_{11}(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B} & \\ -\mathbf{M}_{21}(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B} & E_1(\mathbf{k}_0) - \mathbf{M}_{22}(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B} \end{pmatrix} \quad (137)$$

$$H_2(\mathbf{k}_0) = \begin{pmatrix} E_2(\mathbf{k}_0) - \mathbf{M}_{33}(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B} & \\ -\mathbf{M}_{43}(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B} & E_2(\mathbf{k}_0) - \mathbf{M}_{44}(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B} \end{pmatrix} \quad (138)$$

⋮

と表せる。これはバンド基底で表示した行列だが、元々の基底で表示するには

$$H(\mathbf{k}_0) = U(\mathbf{k}_0)H_{\text{band}}(\mathbf{k}_0)U^\dagger(\mathbf{k}_0) \quad (139)$$

とユニタリー変換する。ここで $H_{\text{band}}(\mathbf{k}_0) = U^\dagger(\mathbf{k}_0)H(\mathbf{k}_0)U(\mathbf{k}_0)$ 。 $\mathbf{M}_{\text{band}}(\mathbf{k}_0)$ は \mathbf{k}_0 に依存するが、 \mathbf{k}_0 近傍の振る舞いに興味があるのであれば、その依存性を無視しても良い。

^{*9} L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, Phys. Rev. **114**, 90 (1959).