

第 4 章 磁気秩序

- 4.1 局在スピン間の相互作用
 - 4.1.1 Heisenberg 相互作用
 - 4.1.2 超交換相互作用
 - 4.1.3 伝導電子を介した相互作用
 - 4.1.4 相互作用の異方性
- 4.2 局在スピン系の秩序
 - 4.2.1 磁気秩序の平均場近似
 - 4.2.2 感受率
 - 4.2.3 強磁性と反強磁性
 - 4.2.4 変分原理
- 4.3 局在スピン系の集団励起
 - 4.3.1 Bose 粒子表示
 - 4.3.2 物理量への集団歴からの寄与
 - 4.3.3 スピン波の古典的描像
 - 4.3.4 強磁性の場合
 - 4.3.4 反強磁性の場合
- 4.4 遍歴電子系の場合
 - 4.4.1 ジェリウム模型
 - 4.4.2 Hartree-Fock 近似
 - 4.4.3 誘電遮蔽
 - 4.4.4 磁気不安定性 ←堀が担当
 - 4.4.5 磁気秩序 ←堀が担当
 - 4.4.6 電荷秩序 ←堀が担当
- 4.5 遍歴電子系の磁気秩序下の励起
 - 4.5.1 反強磁性相における横スピン感受率
 - 4.5.2 強相関極限

4.4 遍歴電子系の秩序

○今回の内容

遍歴電子系における磁気秩序や電荷秩序について扱っていく。4.4.4「磁気不安定性」では、Hubbard 模型におけるスピン磁化率を求め、有限温度で磁気秩序が発生する条件を導出する。このとき、振動磁場下の常磁性状態で議論していく一方、4.4.5「磁気秩序」では、実際にゼロ磁場下の磁気秩序状態を仮定し、有限温度で磁気秩序が発生する条件について再度、議論する。4.4.6「電荷秩序」では、電荷秩序や軌道秩序が発生する条件について磁気秩序のときと同様に考察していく。

4.4.4 磁気不安定性

◆ Hubbard 模型

前節でみたように、金属において、電子間にはたらく Coulomb 相互作用は、他の電子やイオンによる静電遮蔽により有効的に短距離的になる^{*1}。このような遮蔽された電子相互作用を、Wannier 軌道を用いたサイト表示で一般的に表すと、

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{i-j} n_i n_j, \quad n_i \equiv \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} \quad (4.108)$$

この Fourier 変換は、

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2N_0} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}} n_{-\mathbf{q}}, \quad V_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \quad (4.109)$$

*1 金属中の電子の平均距離が大体 1 Å だとすると、電子間の Coulomb 斥力の大きさは 1 Ry (~ 13.6 eV) にもなるはずである。それでも、なお金属状態が普遍的に見られる理由の 1 つがこの遮蔽効果である。他の理由に、「自由な 1 粒子状態から Coulomb 斥力の相互作用を徐々に加えて行っても、結局はもとの 1 粒子状態と定性的に変わらない状態 (準粒子) になる」という Landau によるフェルミ液体理論などがある。これに対抗する概念が 5 章で学習する Mott 絶縁体 (電子相関によって生じる絶縁体) である [1]。

である。

○ (4.108) の Fourier 変換の具体的な計算

$a_{i\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{k}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} a_{\mathbf{k}\sigma}$ を定義すれば, (4.108) の Fourier 変換は*2

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \sum_{ij} V_{i-j} n_i n_j &= \frac{1}{2} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_R V_R a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{i+R\sigma'}^\dagger a_{i+R\sigma'} \quad (\because \mathbf{R} \equiv \mathbf{i} - \mathbf{j}) \\
&= \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_R \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \frac{1}{2N_0^2} e^{i\{-k_1\cdot i + k_2\cdot i - k_3\cdot(i+R) + k_4\cdot(i+R)\}} V_R a_{k_1\sigma}^\dagger a_{k_2\sigma} a_{k_3\sigma'}^\dagger a_{k_4\sigma'} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_R \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \frac{1}{N_0} e^{-i(k_3 - k_4)\cdot R} V_R a_{k_1\sigma}^\dagger a_{k_2\sigma} a_{k_3\sigma'}^\dagger a_{k_4\sigma'} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_R \sum_{k_2, k_3, k_4} \frac{1}{N_0} e^{-i(k_3 - k_4)\cdot R} V_R a_{k_2 - k_3 + k_4\sigma}^\dagger a_{k_2\sigma} a_{k_3\sigma'}^\dagger a_{k_4\sigma'} \\
&= \frac{1}{2N_0} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_R \sum_{k_2, q, k_4} e^{-iq\cdot R} V_R a_{k_2 + q\sigma}^\dagger a_{k_2\sigma} a_{k_4 - q\sigma'}^\dagger a_{k_4\sigma'} \quad (\because \mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \\
&= \frac{1}{2N_0} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_R \sum_q V_R e^{-iq\cdot R} n_{q\sigma} n_{-q\sigma'} \quad \left(\because n_{q\sigma} \equiv \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+q\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \right) \\
&= \frac{1}{2N_0} \sum_q V_q \sum_{\sigma\sigma'} n_{q\sigma} n_{-q\sigma'} \quad \left(\because V_q = \sum_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R}} e^{-iq\cdot\mathbf{R}} \right) \\
&= \frac{1}{2N_0} \sum_q V_q n_q n_{-q} \quad (\because n_q \equiv n_{q\uparrow} + n_{q\downarrow})
\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma\sigma'} n_{q\sigma} n_{-q\sigma'} &= n_{q\uparrow} n_{-q\uparrow} + n_{q\uparrow} n_{-q\downarrow} + n_{q\downarrow} n_{-q\uparrow} + n_{q\downarrow} n_{-q\downarrow} \\
&= (n_{q\uparrow} + n_{q\downarrow})(n_{-q\uparrow} + n_{-q\downarrow}) \\
&= n_q n_{-q}
\end{aligned}$$

を用いた。

以下では, $V_{i-j} = U\delta_{i,j}$ (つまり, オンサイト斥力) とし, 1 粒子ホッピング項^{*3} も考慮した最も簡単な **Hubbard** 模型を考える。

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad n_{i\sigma} \equiv a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \quad (4.110)$$

i サイトの相互作用項は, 粒子数 $n_i \equiv n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ とスピン分極の z 成分 $S_i \equiv (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})/2$ または横成分 $S_i^+ = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}$, $S_i^- = a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}$ を用いて

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{4} n_i^2 - S_i^{z2} = -\frac{1}{2} (S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+) + \frac{1}{2} n_i \quad (4.111)$$

と表される。すなわち, $U > 0$ の Hubbard 型のオンサイト斥力は, (4.108) の Coulomb 斥力に加えて, スピン S_i の情報も加わり, 電荷については斥力, 磁気について引力として働くことが分かる。

*2 計算結果を TeX に打ち込んでいる途中で, 添え字のベクトルが太字になっていないことに気づいた。書き換えるのが面倒なのでご了承ください。

*3 第 3 章で学習したが, (4.110) の第一項のように

$$H = \sum_{n\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}n}^\dagger a_{\mathbf{k}n} \quad (3.13)$$

の形のハミルトニアンは

$$\epsilon_{n\mathbf{k}} = \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha n}^{(\mathbf{k})*} h_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} U_{\beta n}^{(\mathbf{k})}, \quad h_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \equiv \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\alpha-\beta)} t_{\mathbf{R}}^{\alpha\beta} \quad (3.22)$$

$$a_{j\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{n\mathbf{k}} U_{\alpha n}^{(\mathbf{k})*} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{j}+\alpha)} a_{\mathbf{k}n}^\dagger \quad (3.23)$$

$$a_{\mathbf{k}n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\alpha\mathbf{j}} U_{\alpha n}^{(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{j}+\alpha)} a_{j\alpha}^\dagger \quad (3.24)$$

を用いれば,

$$H = \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} t_{ij}^{\alpha\beta} a_{i\alpha}^\dagger a_{j\beta} = \sum_{j\mathbf{R}} \sum_{\alpha\beta} t_{\mathbf{R}}^{\alpha\beta} a_{j+\mathbf{R}\alpha}^\dagger a_{j\beta} \quad (3.25)$$

のようなホッピングを用いた形に書き換えられる。

○ (4.111) の具体的な計算

$n_i \equiv n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ と $2S_i^z \equiv (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$ から,

$$n_i + 2S_i^z = 2n_{i\uparrow}$$

$$n_i - 2S_i^z = 2n_{i\downarrow}$$

よって,

$$n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} = \frac{1}{4}(n_i + 2S_i^z)(n_i - 2S_i^z) = \frac{1}{4}n_i^2 - S_i^{z2}$$

また, スピンの横成分 $S_i^+ = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}$, $S_i^- = a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}$ については,

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}(S_i^+ S_i^- + S_i^- S_i^+) + \frac{1}{2}n_i \\ &= -\frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow} a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow} a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}) + \frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) \\ &= +\frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^\dagger + a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}) + \frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) \\ &= -\frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} a_{i\downarrow} a_{i\downarrow}^\dagger + a_{i\uparrow} a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) + \frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) \\ &= -\frac{1}{2}\{a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow}(1 - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) + (1 - a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow})a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}\} + \frac{1}{2}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} + a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) \\ &= a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow} \\ &= n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned}$$

であるから, (4.111) が成り立つ。

◆ RPA によるスピン感受率

Hubbard 模型の磁気秩序を RPA 近似（乱雑位相近似, Random Phase Approximation）*4 で取り扱ってみよう。書き換えた相互作用項に平均場近似をほどこす。

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{U}{N_0} \sum_q \left(\frac{1}{4} n_q n_{-q} - S_q^z S_{-q}^z \right) \simeq -\frac{2U}{N_0} \sum_q S_{-q}^z m_q \quad (4.112)$$

ここで $m_q = \langle S_q^z \rangle$ とした。

○ (4.112) の具体的な計算

$V_{i-j} = U\delta_{i,j}$ なので, $V_{\mathbf{R}} = U\delta_{\mathbf{R},0}$ 。(4.109) から

$$V_q = \sum_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} U\delta_{\mathbf{R},0} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = U$$

$$\therefore H_{\text{int}} = \frac{1}{2N_0} \sum_q V_q n_q n_{-q} = \frac{U}{2N_0} \sum_q n_q n_{-q}$$

また, (4.108) から

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{i-j} n_i n_j = \frac{1}{2} \sum_{ij} U\delta_{i,j} n_i n_j = \frac{U}{2} \sum_i n_i^2$$

$$\therefore \sum_i n_i^2 = \frac{1}{N_0} \sum_q n_q n_{-q}$$

スピン S_i についても同様に計算を行うと, $S_q^z \equiv \sum_{\sigma} \sigma n_{q\sigma} / 2 = (n_{q\uparrow} - n_{q\downarrow}) / 2$ を用いて

$$\sum_i S_i^z{}^2 = \frac{1}{N_0} \sum_q S_q^z S_{-q}^z$$

が示せる。よって,

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = U \sum_i \left(\frac{1}{4} n_i^2 - S_i^z{}^2 \right) = \frac{U}{N_0} \sum_q \left(\frac{1}{4} n_q n_{-q} - S_q^z S_{-q}^z \right)$$

*4 時間変化を伴い振動数 ω に依存する平均場近似。

ここで、スピン密度演算子 S_q^z を

$$S_q^z = m_q + (S_q^z - m_q) = m_q + \delta S_q^z$$

という、平均値 $m_q = \langle S_q^z \rangle$ とそれからの揺らぎ $\delta S_q^z = S_q^z - m_q$ で書き表す。この表式を $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ に代入して、揺らぎの二次を無視して、 S_q^z の項だけを残すと、

$$\begin{aligned} U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} &\approx -\frac{U}{N_0} \sum_q S_q^z S_{-q}^z \\ &= -\frac{U}{N_0} \sum_q (m_q + \delta S_q^z) (m_{-q} + \delta S_{-q}^z) \\ &= -\frac{U}{N_0} \sum_q (m_q m_{-q} + m_q \delta S_{-q}^z + m_{-q} \delta S_q^z + \delta S_q^z \delta S_{-q}^z) \\ &\approx -\frac{U}{N_0} \sum_q \{m_q m_{-q} + m_q (S_{-q}^z - m_{-q}) + m_{-q} (S_q^z - m_q)\} \\ &\approx -\frac{U}{N_0} \sum_q (m_q S_{-q}^z + m_q S_q^z) \\ &= -\frac{2U}{N_0} \sum_q S_{-q}^z m_q \end{aligned}$$

となる。^{*5}

^{*5} Coulomb 相互作用 $H_{\text{int}} = \frac{1}{2N_0} \sum_q^{\neq 0} V_q n_q n_{-q}$ を Fock 項を無視する平均場近似で

$$H_{\text{int}} \sim \frac{1}{N_0} \sum_q V_q \langle n_{-q} \rangle n_q - \frac{1}{2N_0} \sum_q V_q \langle n_q \rangle \langle n_{-q} \rangle$$

となるので、 $-\frac{U}{N_0} \sum_q S_q^z S_{-q}^z$ に対して同様の計算を行えば、

$$-\frac{U}{N_0} \sum_q S_q^z S_{-q}^z \sim \frac{2U}{N_0} \sum_q \langle S_{-q}^z \rangle S_q^z - \frac{U}{N_0} \sum_q \langle S_q^z \rangle \langle S_{-q}^z \rangle$$

となる。つまり、Fock 項を無視する平均場近似を行い、 S_q^z の項だけを残せば (4.112) を得る。

次に、線形応答理論を使って、スピン感受率を求めてみることにする*6。

○ 1.3 線形応答理論の復習

線形応答理論によれば、外場 $H_{\text{ex}} = -BF(t) = -BF_0 e^{\delta t} e^{-i\omega t}$ が存在するとき、この外場に誘起される演算子 A の量子統計平均 $A(t)$ は

$$\chi_{AB}^{\text{R}}(t) \equiv \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle \quad (1.102)$$

を導入すると

$$\begin{aligned} A(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}^{\text{R}}(t-t') F(t') \quad (1.103) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}^{\text{R}}(t-t') F_0 e^{-i(\omega+i\delta)t'} \\ &= F_0 e^{-i(\omega+i\delta)t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}^{\text{R}}(t-t') e^{i(\omega+i\delta)(t-t')} \\ &= \chi_{AB}^{\text{R}}(\omega) F(t) \quad (1.104) \end{aligned}$$

ここで、 $\tilde{A}(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$ であり、複素感受率 $\chi_{AB}^{\text{R}}(\omega)$ を導入した。

$$\chi_{AB}^{\text{R}}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi_{AB}^{\text{R}}(t) e^{i(\omega+i\delta)t} \quad (1.105)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \langle [\tilde{A}(t), B] \rangle e^{i(\omega+i\delta)t} \quad (1.106)$$

これを使って、RPA の感受率を求める。

*6 同様の方法で、電荷密度 $\langle n_{\mathbf{q}} \rangle$ を誘起する外場 $\phi(\mathbf{q}, \omega)$ を考えれば、電荷感受率

$$\langle n_{\mathbf{q}} \rangle = \chi_c^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \phi_{\mathbf{q}}, \quad \chi_c^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \frac{2\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + 2(V_{\mathbf{q}}/N_0)\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.104)$$

も求まる。

波数 \mathbf{q} , 振動数 ω で変化する磁場 $h_i(t) = h_{\mathbf{q}}e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}-\omega t)}$ に対して, 外場は $-S_{-\mathbf{q}}^z h_{\mathbf{q}}e^{-i\omega t}$ *7である。このとき, $\langle S_{\mathbf{q}'}^z \rangle = m_{\mathbf{q}'}e^{-i\omega t}\delta_{\mathbf{q}',\mathbf{q}}$ が誘起されるので, 外場と平均場の和

$$\begin{aligned} -BF(t) &= -S_{-\mathbf{q}}^z h_{\mathbf{q}}e^{-i\omega t} - \frac{2U}{N_0} \sum_{\mathbf{q}'} S_{-\mathbf{q}'}^z \langle S_{\mathbf{q}'}^z \rangle \\ &= -S_{-\mathbf{q}}^z h_{\mathbf{q}}e^{-i\omega t} - \frac{2U}{N_0} \sum_{\mathbf{q}'} S_{-\mathbf{q}'}^z m_{\mathbf{q}'}e^{-i\omega t}\delta_{\mathbf{q}',\mathbf{q}} \\ &= -S_{-\mathbf{q}}^z \left(h_{\mathbf{q}} + \frac{2U}{N_0} m_{\mathbf{q}} \right) e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

に対する線形応答は,

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle &= F(t) \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [\tilde{S}_{\mathbf{q}}^z(t), B] \rangle e^{i\omega t} \\ &= e^{-i\omega t} \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [\tilde{S}_{\mathbf{q}}^z(t), -S_{-\mathbf{q}}^z \left(h_{\mathbf{q}} + \frac{2U}{N_0} m_{\mathbf{q}} \right)] \rangle e^{i\omega t} \\ &= - \left(h_{\mathbf{q}} + \frac{2U}{N_0} m_{\mathbf{q}} \right) e^{-i\omega t} \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [\tilde{S}_{\mathbf{q}}^z(t), S_{-\mathbf{q}}^z] \rangle e^{i\omega t} \end{aligned}$$

ここで, 相互作用のない系 (今考えている平均場がない系) のスピン感受率および Lindhard 関数

$$\begin{aligned} \chi_s^{R,\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [\tilde{S}_{\mathbf{q}}^\mu(t), S_{-\mathbf{q}}^\nu] \rangle e^{i\omega t} \\ &= \langle \langle s_{\mathbf{q}}^\mu; s_{-\mathbf{q}}^\nu \rangle \rangle \\ &= \frac{1}{2} \chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) \delta_{\mu,\nu} \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega) \equiv - \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_-) - f(\xi_+)}{\hbar(\omega + i\delta) + \xi_- - \xi_+} \quad (3.72)$$

を用いると

$$\langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle = \chi_s^{R,\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega) \left(h_{\mathbf{q}} + \frac{2U}{N_0} m_{\mathbf{q}} \right) e^{-i\omega t}$$

*7 教科書では $-m_{-\mathbf{q}}h_{\mathbf{q}}e^{-i\omega t}$ と記述があるが, ここでは $-S_{-\mathbf{q}}^z$ の平均値をとる前の $-S_{-\mathbf{q}}^z h_{\mathbf{q}}e^{-i\omega t}$ を採用する。

$$\begin{aligned}
m_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t} &= \frac{1}{2} \chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) [h_{\mathbf{q}} + 2(U/N_0) m_{\mathbf{q}}] e^{-i\omega t} \\
m_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{2} \chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) [h_{\mathbf{q}} + 2(U/N_0) m_{\mathbf{q}}] \\
\rightarrow m_{\mathbf{q}} &= \chi_s^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) h_{\mathbf{q}}, \quad \chi_s^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \frac{1}{2} \frac{\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - (U/N_0) \chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.113)
\end{aligned}$$

とスピン感受率 $\chi_s^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)$ が求まる*8。

◆ Stoner 条件

自発磁化の発生は、 $\chi_s^{\text{R}}(\mathbf{q}, 0)$ が発散する条件から決定される。通常、 $\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, 0)$ は降温とともに単調増加するので、 $\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, 0)$ が最大値をとる波数を \mathbf{Q} として、

$$\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{Q}, 0) U/N_0 \geq 1$$

の条件を満たすとき、磁気秩序が発生する。例えば、 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ の強磁性の場合、Fermi エネルギーより十分低温 ($T \rightarrow 0$) で $\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{0}, 0)$ は、

$$\chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}, \omega = 0) = \sum_k \left(-\frac{df}{d\xi} \right) \simeq \sum_k \delta(\mu - \epsilon_k) = \rho_{\sigma}(\mu) \equiv \rho_{\text{F}} \quad (3.73)$$

と Fermi 準位での状態密度 ρ_{F} に達するので、有限温度で強磁性が発生する条件は

$$\rho_{\text{F}} U/N_0 > 1$$

ということになる。この条件を **Stoner 条件** といい、 ρ_{F} が大きいほど強磁性が実現しやすいと言える。(4.113)におけるスピン感受率 $\chi_s^{\text{R}}(\mathbf{0}, 0)$ を増強させる分母の因子を

*8 相互作用のない系では、 $m_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \chi_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) h_{\mathbf{q}}$ となるが、相互作用 U によってこの形になる。局在スピン系においても、相互作用 $J_{\mathbf{q}}^{\mu}$ によって感受率が

$$\chi^{\mu}(\mathbf{q}) = \frac{\chi_0^{\mu}}{1 - \chi_0^{\mu} J_{\mathbf{q}}^{\mu}} \quad (4.21)$$

という式で表されたことを思い出してほしい。

Stoner 因子という。^{*9} 様々な単体金属における相互作用 U , 状態密度 ρ_F , Stoner 因子を図に示す [2]。よく知られた強磁性体の鉄 (Fe), コバルト (Co), ニッケル (Ni) が Stoner 条件を満たしていることがわかる。

図: 様々な単体金属における (a) 相互作用 U , (b) 状態密度 ρ_F , (c) Stoner 因子 [2]。

*9 静的な磁場 H に対して

$$\langle n_\sigma \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon N(\varepsilon - \mu_B H \sigma + U m \sigma) f(\varepsilon)$$

を用いて, 磁化を $m = (\langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle)/2$ とすれば, 感受率は $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} (-2\mu_B m/H)$ から

$$\chi = \chi_0 \left(1 + U \frac{\chi}{2\mu_B^2} \right) \rightarrow \chi = \frac{\chi_0}{1 - U\chi_0/2\mu_B^2}$$

と磁化率が比較的簡単に求まる。 $\chi_0 = 2\mu_B^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right] \rho(\varepsilon)$ であり, $T \rightarrow 0$ で $\rightarrow 2\rho_F \mu_B^2$ となる。この式からも, Stoner 条件を導出できる。今回の RPA の計算では, 時間変化を伴い振動数 ω に依存する動的感受率を求めたので, RPA の感受率はこの χ よりも一般的な量だといえる。

◆ 2次元格子の $\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0)$ の構造

$\chi_0^R(\mathbf{Q}, \omega)$ の構造は、エネルギーバンド構造 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ と電子数密度 $n = N_e/N_0$ に依存する。例えば、2次元正方格子（格子定数 a ）の最近接ホッピング（ $-t$ ）のみのエネルギーバンド $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ では^{*10}, $n = 1$ (half-filling: $\mu = 0$) で強いネスティングに起因した状態密度が対数発散 ($\propto -\ln \epsilon$) する。また, $\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0)$ は $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ で最大値を取り, $(\ln T)^2$ に比例して^{*11}, 対数発散する (図 4.12)。したがって, 平均場近似の範囲では, 無限小の U であっても有限温度で \mathbf{Q} に対応する反強磁性 (いわゆるスピン密度波, SDW) が発生することになる。

10 (3.22) において $U_{\alpha n}^{(\mathbf{k})} = \delta_{\alpha, 0}$, $U_{\beta n}^{(\mathbf{k})} = \delta_{\beta, 0}$, $t_{\mathbf{R}}^{\alpha\beta} = -t(\delta_{\mathbf{R}, (a, 0, 0)} + \delta_{\mathbf{R}, (-a, 0, 0)} + \delta_{\mathbf{R}, (0, a, 0)} + \delta_{\mathbf{R}, (0, -a, 0)})$ とすると,

$$\begin{aligned}\epsilon_{n\mathbf{k}} &= \sum_{\alpha\beta} U_{\alpha n}^{(\mathbf{k})*} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\alpha-\beta)} t_{\mathbf{R}}^{\alpha\beta} U_{\beta n}^{(\mathbf{k})} \\ &= \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}}^{\alpha\beta} = -t(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) \\ &= -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)\end{aligned}$$

*11 教科書の p. 97 では, $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\xi_{\mathbf{k}}$ が成り立つとき, $f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - f_{\mathbf{k}} = \tanh(\beta\xi_{\mathbf{k}}/2)$ より

$$\begin{aligned}\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0) &= -\sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta\xi_{\mathbf{k}}/2)}{2\xi_{\mathbf{k}}} \\ \frac{\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0)}{\rho_F} &\simeq \int_0^{\xi_c} d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{\xi} = \int_0^{\beta\epsilon_c/2} dx \frac{\tanh x}{x} \\ &\simeq \ln\left(\frac{\beta\epsilon_c}{2}\right) - \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} = \ln\left(\frac{2\epsilon_c e^\gamma}{\pi k_B T}\right)\end{aligned}$$

となり低温で $-\ln T$ に比例して対数発散すると記述がある。これは, 今考えている2次元正方格子 ($\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \xi_{\mathbf{k}}$ が成り立つ) で $(\ln T)^2$ に比例するという事実と矛盾している。おそらく, Fermi 準位に十分近い領域で $|\xi_{\mathbf{k}}| \leq \epsilon_c$ で和を評価し, 状態密度がその領域で一定であると仮定したためであると思われる (多分)。実際に, 状態密度 $\rho(\xi) \propto -\ln \xi$ を考慮して計算すると

$$\begin{aligned}\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta\xi_{\mathbf{k}}/2)}{2\xi_{\mathbf{k}}} = \int_{-4t}^{4t} d\xi \rho(\xi) \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{\xi} \\ &\propto -\int_{-2\beta t}^{2\beta t} dx \ln\left(\frac{2x}{\beta}\right) \frac{\tanh x}{x} \propto (\ln \beta)^2 \propto (\ln T)^2\end{aligned}$$

まあ, ただ, どちらの計算も低温で発散するという結果がでてくるけど。とりあえず, 図に $-\ln T$ と $(\ln T)^2$ の比較を示しておく。

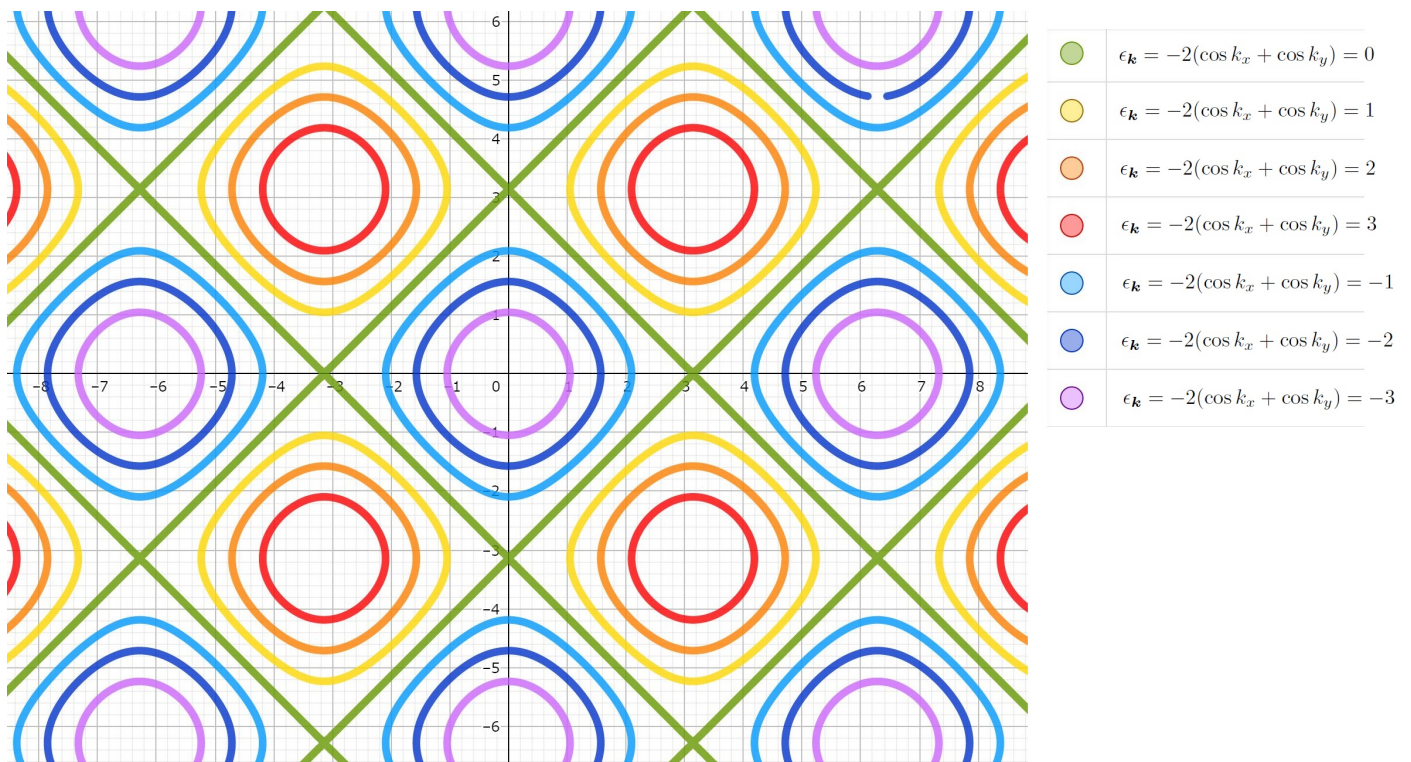


図: 2次元正方格子 $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ の等エネルギー一面 ($t = a = 1$)。

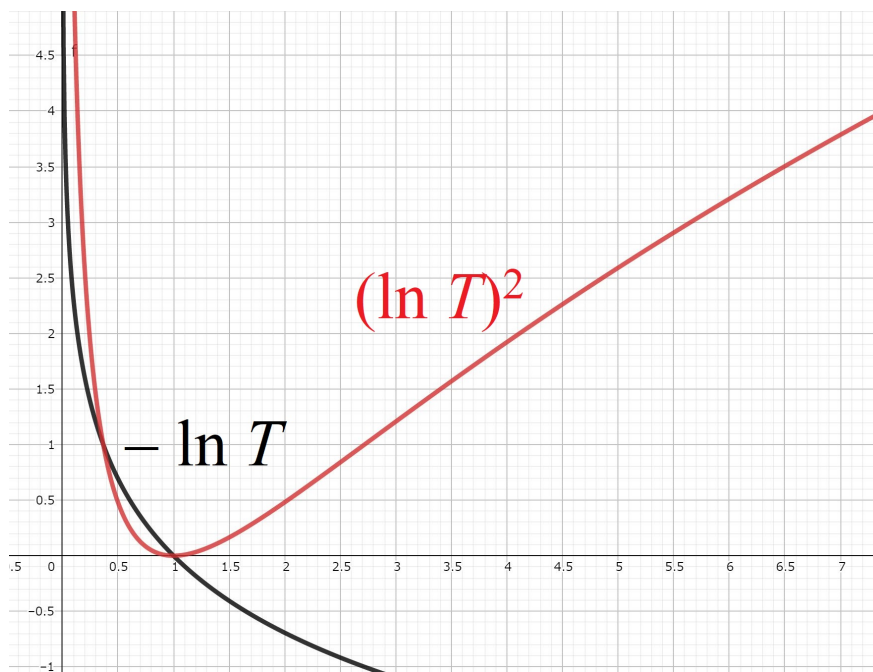


図: $-\ln T$ および $(\ln T)^2$ 。

図 4.12: 2次元格子の $\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0)$ の \mathbf{q} および T 依存性 ($t = \alpha = 1$)。

4.4.5 磁気秩序

4.4.4 でみたように、常磁性状態の $\chi_s^R(\mathbf{q}, 0)$ がある波数 \mathbf{Q} , 転移温度 T_0 で発散したとする。 T_0 以下では、自発的な秩序が発生する。4.4.4 では、常磁性状態（つまり、まだ秩序状態を考えてない）のスピン磁化率から秩序状態が発生する条件を議論したが、この節は初めから（ゼロ磁場下での）秩序状態を仮定して議論をすすめ、秩序状態が発生する条件について再度、考察していくこととする。

◆強磁性秩序

まず、 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ の z 方向の強磁性状態を考える。平均場ハミルトニアン^{*12} は

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\xi_{\mathbf{k}} - U m_0 \sigma) a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.114)$$

である。次に、自己無撞着方程式を導出するために、Green 関数を求める。

^{*12} $2S_q^z \equiv \sum_{\sigma} \sigma n_{q\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$ であり、 $m_q = N_0 m_0 \delta_{q,0}$ とすると平均場 (4.112) は

$$-\frac{2U}{N_0} \sum_{\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}}^z m_{\mathbf{q}} = -U \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} m_0 \delta_{q,0} = - \sum_{\mathbf{k}\sigma} U m_0 \sigma a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$$

となる。

○ 3.3.3 相互作用のない Green 関数の復習

相互作用のない系

$$H = \sum_{ij} (t_{ij} - \mu\delta_{i,j}) a_i^\dagger a_j \quad (3.51)$$

の Green 関数（松原 Green 関数の Fourier 級数の展開級数） $G_{ij}^T(\omega_n)$ は、

$$\sum_k M_{ik}(\omega_n) G_{kj}^T(\omega_n) = \delta_{i,j}, \quad M_{ij}(\omega_n) \equiv (i\hbar\omega_n + \mu)\delta_{i,j} - t_{ij} \quad (3.53)$$

を満たす。 M_{ij} を (i, j) 要素にもつ行列を $M(\omega_n)$ とすれば、 $M(\omega_n)$ の逆行列を用いて

$$G_{ij}^T(\omega_n) = [M^{-1}(\omega_n)]_{ij} \quad (3.54)$$

である。

系に並進対称性があり、(3.51) を対角化する基底 $i = \mathbf{k}$ を用いれば、 $G_{ij}^T(\omega_n)$ も対角成分だけ値をもち^{*13}

$$G_n^T(\mathbf{k}, \omega_{n'}) = \frac{1}{i\hbar\omega_{n'} - \xi_{n\mathbf{k}}} \quad (3.55)$$

となる。平均値 $\langle a_j^\dagger a_i \rangle$ は

$$\langle a_j^\dagger a_i \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G_{ij}^T(\omega_n) e^{i\omega_n 0_+} \quad (3.56)$$

のように松原 Green 関数の和で表すことができ、種々の平均場近似を行う際に有用である。特に、 $i = \mathbf{k}$ の対角基底では、 $i = j$ の平均値のみ値をもち

$$\langle a_{\mathbf{k}n}^\dagger a_{\mathbf{k}n} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega_{n'} 0_+}}{i\hbar\omega_{n'} - \xi_{n\mathbf{k}}} = f_{n\mathbf{k}} \quad (3.57)$$

となる。ここで、 $f_{n\mathbf{k}} = f(\xi_{n\mathbf{k}})$ である。

強磁性状態の平均場ハミルトニアン (4.114) の Green 関数は, $i = (\mathbf{k}, \sigma)$, $j = (\mathbf{k}', \sigma')$, $t_{ij} = (\epsilon_{\mathbf{k}} - Um_0\sigma)\delta_{(\mathbf{k},\sigma),(\mathbf{k}',\sigma')}$ であるから, (3.55) に対して $\xi_{nk} \rightarrow \xi_{nk} - Um_0\sigma$ の置き換えをすればよくて

$$G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{i\hbar\omega_n - \xi_{nk} + Um_0\sigma}$$

となる*14。よって, 平均値 $\langle a_j^{\dagger} a_i \rangle$ を得るための公式 (3.56), (3.57) を用いると

$$\begin{aligned} m_0 &= \frac{1}{2N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{2\beta N_0} \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \sigma G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n) e^{i\omega_n 0+} \\ &= \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}} - Um_0) - f(\xi_{\mathbf{k}} + Um_0)}{2} \end{aligned} \quad (4.115)$$

と自己無撞着方程式が得られる*15。Curie 温度 T_c を決める方程式は, $T \rightarrow T_c$ で $m_0 \rightarrow 0$ より, 一般の x の関数 $f(x)$ について, $\delta x \rightarrow 0$ のとき, $f(x + \delta x) - f(x) \rightarrow (df/dx)\delta x$ であることを用いると

$$1 = \frac{U}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} \right)_{T=T_c} \quad (4.116)$$

*13 $i = \mathbf{k}$, $j = \mathbf{k}'$, $t_{ij} = \epsilon_{nk}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$, $\xi_{nk} \equiv \epsilon_{nk} - \mu$ とすると, $H = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{nk} a_{\mathbf{k}n}^{\dagger} a_{\mathbf{k}n}$ となり,

$$M(\omega_n) = \begin{matrix} & \dots & \mathbf{k} & \dots \\ \vdots & & & \\ \mathbf{k} & \begin{pmatrix} \ddots & & & 0 \\ & M_{\mathbf{k},\mathbf{k}} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} & \\ \vdots & & & \end{matrix}$$

に対して, $G_n^T(\mathbf{k}, \omega_n) = [M(\omega_n)^{-1}]_{\mathbf{k},\mathbf{k}}$ を計算している。

*14 具体的には

$$M(\omega_n) = \begin{matrix} & (\mathbf{k}_1, \uparrow) & (\mathbf{k}_1, \downarrow) & (\mathbf{k}_2, \uparrow) & (\mathbf{k}_2, \downarrow) & \dots \\ (\mathbf{k}_1, \uparrow) & \begin{pmatrix} M_{(\mathbf{k}_1, \uparrow), (\mathbf{k}_1, \uparrow)} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & M_{(\mathbf{k}_1, \downarrow), (\mathbf{k}_1, \downarrow)} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & M_{(\mathbf{k}_2, \uparrow), (\mathbf{k}_2, \uparrow)} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & M_{(\mathbf{k}_2, \downarrow), (\mathbf{k}_2, \downarrow)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots \end{pmatrix} & \end{matrix}$$

に対して, $G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n) = [M(\omega_n)^{-1}]_{(\mathbf{k},\sigma),(\mathbf{k},\sigma)}$ を計算している。

*15 つまり, $\langle n_{\sigma} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} f(\xi_{\mathbf{k}} - \sigma Um_0)$ としたとき $m_0 = (\langle n_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow} \rangle) / (2N_0)$ である。

となる。(3.73) より, $T \rightarrow 0$ で右辺は $\rho_F U/N_0$ であり, $\sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f}{\partial \xi_{\mathbf{k}}}\right)_{T \neq 0} < \rho_F$ なので, 有限温度で強磁性が生じる条件は 4.4.4 の Stoner 条件と一致する。(3.73) より, $\sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f}{\partial \xi_{\mathbf{k}}}\right) = \chi_0^R(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}, 0)$ に注意すれば, 強磁性状態を仮定して導出した(4.116) の条件は, (4.113) の分母がゼロ, すなわち常磁性状態の磁化率 $\chi_s^R(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}, 0)$ が $T = T_c$ で発散する条件に一致する。したがって, 常磁性状態の磁化率が発散する条件から求めた T_c と強磁性状態が消失する条件からもとめた T_c は一致する。このことは自明のように思えるが, あらゆる近似で両者が一致する保証はない(平均場近似ってすごいね!)。両者が一致する条件は保存近似として知られており, 平均場近似は保存近似である。

遍歴電子系では, 与えられた電子数密度 $n \equiv N_e/N_0$ になるように, $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ に含まれる化学ポテンシャル μ を (T, U, n) ごとに求める必要があり, その条件は

$$n = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{\beta N_0} \sum_{n\mathbf{k}\sigma} G_\sigma^T(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f(\xi_{\mathbf{k}} - U m_0 \sigma) \quad (4.117)$$

一般的な電子構造 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ の場合は解析的に解けないので, 自己無撞着方程式(4.115) と化学ポテンシャル μ を求める条件(4.117) を数値的に解く必要がある。

◆反強磁性秩序

次に反強磁性について考える。秩序ベクトルを $\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$ とし, 簡単のため $2\mathbf{Q}$ と $\mathbf{0}$ は等価な点であるとする。 $\mathbf{p} \equiv \mathbf{k} + \mathbf{Q}$ として平均場ハミルトニアンは,

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger & a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -Um_{\mathbf{Q}}\sigma \\ -Um_{\mathbf{Q}}\sigma & \xi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ a_{\mathbf{p}\sigma} \end{pmatrix} \quad (4.118)$$

となる^{*16}。反強磁性の場合, MBZ (磁気 Brillouin 域) は元の BZ (Brillouin 域)

^{*16} つまり, $H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} \{(\xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \xi_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma}) - Um_{\mathbf{Q}}\sigma(a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma})\}$ である。(4.110) の 1 粒子ホッピング項を $\sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} (\xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + \xi_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma})$ と置き換えている。 $m_{\mathbf{q}} = N_0 m_{\mathbf{q}} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}}$ とすると平均場(4.112)は

$$-\sum_{\mathbf{k}\sigma} Um_{\mathbf{Q}}\sigma a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} = -\sum_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} Um_{\mathbf{Q}}\sigma (a_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + a_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma})$$

となる。

の体積の半分なので、和の内容が MBZ に関して周期的ならば、 $\sum_k^{\text{MBZ}} = (1/2) \sum_k$ としてよい。このハミルトニアンより Green 関数は、 $i = (\mathbf{k}, \sigma)$, $j = (\mathbf{k}', \sigma')$, $t_{ij} = \epsilon_{\mathbf{k}} \delta_{(\mathbf{k}, \sigma), (\mathbf{k}', \sigma')} - Um_{\mathbf{Q}} \sigma \{ \delta_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma), (\mathbf{k}', \sigma')} + \delta_{(\mathbf{k}-\mathbf{Q}, \sigma), (\mathbf{k}', \sigma')} \}$ なので、

$$G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n) = \begin{pmatrix} i\hbar\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} & Um_{\mathbf{Q}}\sigma \\ Um_{\mathbf{Q}}\sigma & i\hbar\omega_n - \xi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}^{-1} \quad (4.119)$$

であり^{*17}，強磁性のときと同じように自己無撞着方程式は

$$\begin{aligned} m_{\mathbf{Q}} &= \frac{1}{2N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \langle a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{2N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} \sigma \left[\langle a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle + \langle a_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2\beta N_0} \sum_{n\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} \sigma \left\{ [G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n)]_{12} + [G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n)]_{21} \right\} e^{i\omega_n 0_+} \\ &= m_{\mathbf{Q}} \frac{U}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}^-) - f(\xi_{\mathbf{k}}^+)}{2S_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (4.120)$$

となる。ここで、 $\xi_{\mathbf{k}}^{\pm} = (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{p}}) / 2 \pm S_{\mathbf{k}}$, $S_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{p}})^2 / 4 + U^2 m_{\mathbf{Q}}^2}$ である。

^{*17} (3.53) の定義から求めた $M(\omega_n)$

$$M = \begin{pmatrix} (\mathbf{k}_1, \uparrow) & (\mathbf{k}_1, \downarrow) & \cdots & (\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \uparrow) & \cdots \\ (\mathbf{k}_1, \uparrow) & \boxed{M_{(\mathbf{k}_1, \uparrow), (\mathbf{k}_1, \uparrow)}} & 0 & \cdots & \boxed{M_{(\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \uparrow), (\mathbf{k}_1, \uparrow)}} & 0 \\ (\mathbf{k}_1, \downarrow) & 0 & M_{(\mathbf{k}_1, \downarrow), (\mathbf{k}_1, \downarrow)} & \cdots & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ (\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \uparrow) & \boxed{M_{(\mathbf{k}_1, \uparrow), (\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \uparrow)}} & 0 & \cdots & \boxed{M_{(\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \uparrow), (\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \uparrow)}} & \cdots \\ (\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \downarrow) & 0 & M_{(\mathbf{k}_1, \downarrow), (\mathbf{k}_1 + \mathbf{Q}, \downarrow)} & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

のうち（この行列は 4 つの対角行列から成る），以下の 4 成分を取り出した行列で計算している。

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{k}, \sigma) & (\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma) \\ (\mathbf{k}, \sigma) & (\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \boxed{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}} & \boxed{Um_{\mathbf{Q}}\sigma} \\ \boxed{Um_{\mathbf{Q}}\sigma} & \boxed{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}}} \end{bmatrix}$$

○ (4.120) の具体的な計算

補足事項 A.4 と比較して, $\xi_1 = \xi_{\mathbf{k}}$, $\Delta = Um_{\mathbf{Q}}\sigma$, $\xi_2 = \xi_{\mathbf{p}}$ と考えればよい。
(A.64) から,

$$\begin{aligned} \beta^{-1} \sum_n G_{\sigma}^T(\mathbf{k}, \omega_n) e^{i\omega_n 0_+} &= \begin{pmatrix} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle & \langle a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \\ \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}\sigma} \rangle & \langle a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \end{pmatrix} \\ &= f(\xi^+) \begin{pmatrix} u^2 & uve^{i\phi} \\ uve^{-i\phi} & v^2 \end{pmatrix} + f(\xi^-) \begin{pmatrix} v^2 & -uve^{i\phi} \\ -uve^{-i\phi} & u^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である。よって,

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}\sigma} \rangle &= uv(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \{f(\xi^-) - f(\xi^+)\} \\ \sum_{\sigma} \left[\langle a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle + \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \right] &= 2uv(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \{f(\xi^-) - f(\xi^+)\} \\ &(\because uve^{i\phi}|_{\sigma=\uparrow} = -uve^{i\phi}|_{\sigma=\downarrow}) \end{aligned}$$

よって, $[uv(e^{i\phi} + e^{-i\phi})]^{-1} = \sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{p}})^2 / 4 + U^2 m_{\mathbf{Q}}^2} \equiv S_{\mathbf{k}}$ および $\xi^{\pm} = (\xi_1 + \xi_2 \pm \sqrt{(\xi_1 - \xi_2)^2 + 4|\Delta|^2}) / 2 \equiv \xi_{\mathbf{k}}^{\pm}$ を導入して $\sum_k^{\text{MBZ}} = (1/2) \sum_k$ を用いれば (4.120) が導ける。

図 4.13 に 2 次元正方格子模型の常磁性および反強磁性状態における遅延 Green 関数のスペクトル強度を示す。反強磁性状態では, $\xi_{\mathbf{k}}$ と $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ の分散関係が混ざるため, $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ を満たす \mathbf{k} 付近にギャップが生じる*18。また, (1, 1) 成分は, $a_{\mathbf{k}}$ 粒子に対する強度に対応するので*19, $\hbar\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}$ で強く, $\hbar\omega = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ で弱い。(2, 2) 成分は $a_{\mathbf{p}}$ 粒子の強度であり, (1, 1) 成分の場合と逆になる。

*18 その \mathbf{k} (例えば 2 次元正方格子模型の half-filling, $\mu = 0$ の場合, $\mathbf{k} = (\pi/a, 0)$ のことであり, Fermi 面上の波数である。) では, $\xi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \xi_{\mathbf{k}} \pm Um_{\mathbf{Q}}\sigma$ となる。つまり, BCS の平均場ハミルトニアンエネルギー固有値と比較すれば, $Um_{\mathbf{Q}}\sigma$ は超伝導の BCS ギャップ Δ に対応しているのだろう。

*19 (A.62) のように表され, この場合の u^2 と u^2 は, $\xi_{\mathbf{k}}^+$ と $\xi_{\mathbf{k}}^-$ のバンドに $a_{\mathbf{k}}$ 粒子が含まれる割合を表している。

(4.115) の強磁性の Curie 温度 T_c を求めたときと同様に, Néel 温度 T_N を決める自己無撞着方程式は, $T \rightarrow T_N$ で $m_{\mathbf{Q}} \rightarrow 0$ より

$$1 = \frac{U}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - f(\xi_{\mathbf{k}})}{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} = \frac{U}{N_0} \chi_0^{\text{R}}(\mathbf{Q}, 0) \quad (4.121)$$

この場合も (4.113) の $\chi_s^{\text{R}}(\mathbf{Q}, 0)$ が $T = T_N$ で発散する条件と一致している (つまり, 平均場は保存近似である)。

また, 強磁性のときの (4.117) と同様に, 粒子数密度 n を決める条件は, (A.64) を用いて

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} \left(\langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle + \langle a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\beta N_0} \sum_{n\mathbf{k}\sigma}^{\text{MBZ}} \left\{ [G_\sigma^T(\mathbf{k}, \omega_n)]_{11} + [G_\sigma^T(\mathbf{k}, \omega_n)]_{22} \right\} e^{i\omega_n 0^+} \\ &= \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} [f(\xi_{\mathbf{k}}^-) + f(\xi_{\mathbf{k}}^+)] \end{aligned} \quad (4.122)$$

$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ の関係があり, half-filling ($n = 1$) の場合, $\mu = 0$ であり, 自己無撞着方程式は

$$1 = \frac{U}{N_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta S_{\mathbf{k}}/2)}{2S_{\mathbf{k}}}, \quad S_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m_{\mathbf{Q}}^2} \quad (4.123)$$

となる (超伝導の BCS ギャップ方程式*20 に似てるね!)。

*20 超伝導の BCS ギャップ方程式は

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta E_{\mathbf{k}}/2)}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$$

で与えられる (Δ は BCS 超伝導ギャップ, V は電子-フォノン相互作用)。やはり, $Um_{\mathbf{Q}\sigma}$ は超伝導の BCS ギャップ Δ に対応してそうだ。N .N. Bogoljubov の理論では Green 関数を使わずにギャップ方程式を導いているが, 今回の計算と同じように BCS ギャップ方程式も Green 関数を用いて導出できる。これを実際に示したのが Gor'kov である [3]。

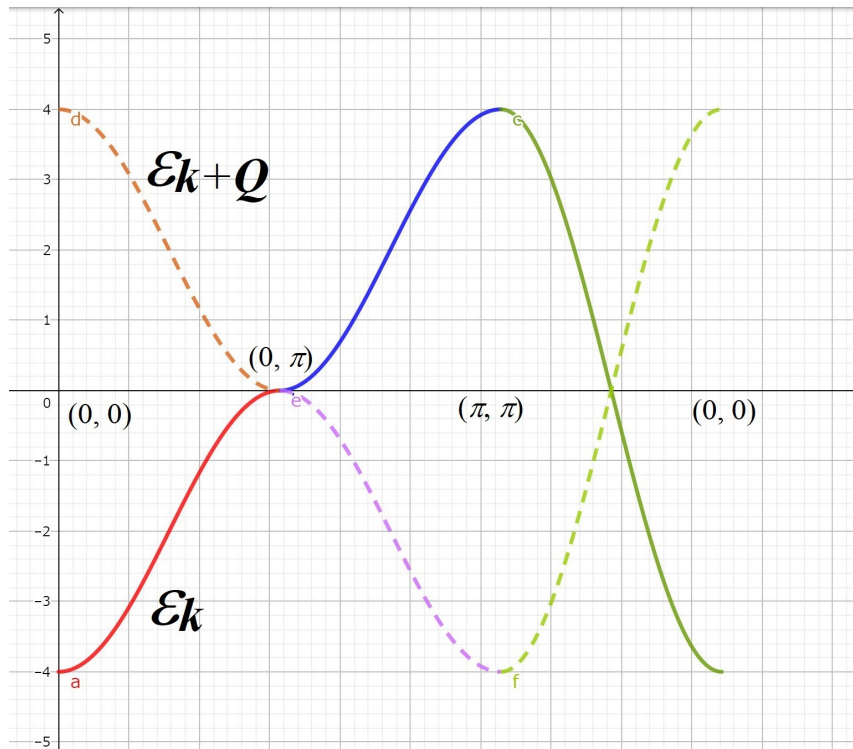


図: $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$ および $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ の分散関係 ($t = a = 1$)。

図 4.13: 2次元正方格子の模型 $\chi_0^R(\mathbf{Q}, 0)$ の \mathbf{q} に対する遅延 Green 関数 $G_\sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ のスペクトル強度 (遅延 Green 関数は松原 Green 関数を $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ の手続きで解析接続したもの)。 (a) 常磁性 ($U = 0$)。 (b) 反強磁性 ($U = 3t$)。強度の強い曲線が分散関係を表す。

4.4.6 電荷秩序

これまで磁気秩序について議論してきたが、電荷秩序についても考察していく。(4.110) のように、Hubbard 型のオンサイト斥力 ($V_{\mathbf{R}} = U\delta_{\mathbf{R},0}$) では、どの波数 \mathbf{q} においても斥力となっている ($V_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R}} U\delta_{\mathbf{R},0} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = U > 0$) ので電荷秩序は期待できない。しかし、より長距離の電子間斥力が優勢になると、電荷秩序が発生する可能性が生じる。例えば、1 辺 a の単純単位格子の最近接格子間に斥力 V がはたらく場合、

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{R}} &= V(\delta_{\mathbf{R},(a,0,0)} + \delta_{\mathbf{R},(-a,0,0)} + \delta_{\mathbf{R},(0,a,0)} + \delta_{\mathbf{R},(0,-a,0)} + \delta_{\mathbf{R},(0,0,a)} + \delta_{\mathbf{R},(0,0,-a)}) \\ V_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \\ &= V(e^{-i\cos q_x a} + e^{i\cos q_x a} + e^{-i\cos q_y a} + e^{i\cos q_y a} + e^{-i\cos q_z a} + e^{i\cos q_z a}) \\ &= 2V(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a) \end{aligned} \quad (4.124)$$

であり、 $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ で最大の引力 ($-6V < 0$) が働くことが分かる。実際、

$$\langle n_{\mathbf{q}} \rangle = \chi_c^R(\mathbf{q}, \omega) \phi_{\mathbf{q}}, \quad \chi_c^R(\mathbf{q}, \omega) \equiv \frac{2\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)}{1 + 2(V_{\mathbf{q}}/N_0)\chi_0^R(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.104)$$

の電荷感受率は、スピン感受率 (4.113) と分母の \pm が異なり、 $V_{\mathbf{q}}$ が負で絶対値が最大となる波数 \mathbf{Q} で発散する可能性がある。

同様に、多軌道系では、 m_1, m_2 軌道間のオンサイト斥力

$$H_{\text{int}} = U_{12} \sum_i n_{im_1} n_{im_2}, \quad n_{im} \equiv \sum_{\sigma} a_{im\sigma}^{\dagger} a_{im\sigma} \quad (4.125)$$

を i サイトの電子数演算子 $n_i = n_{im_1} + n_{im_2}$ と軌道占有率の差を表す演算子 $d_i = n_{im_1} - n_{im_2}$ を用いて変形すると

$$H_{\text{int}} = \frac{U_{12}}{4} \sum_i (n_i n_i - d_i d_i) \quad (4.126)$$

となるので, これまで 4.4.4 や 4.4.5 で扱ってきた 1 軌道系のスピン $2S_i \equiv (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$ を $d_i = n_{im_1} - n_{im_2}$ に置き換えて同様の議論を行えば, この相互作用は軌道秩序 (軌道占有数の差の秩序^{*21}) を引き起こす原因となることがわかる。

参考文献

- [1] 小形正男 「モット転移、スピン液体、電荷秩序、超伝導 (第 53 回物性若手夏の学校 講義ノート)」 (2009 年).
- [2] イバツハ・リユート 「固体物理学 21 世紀物質科学の基礎」 丸善出版 (1998 年).
- [3] 高野文彦 「多体問題 新物理学シリーズ 18」 培風館 (1975 年).
- [4] J. F. Annett "Superconductivity, Superfluids, and Condensates" Oxford Master Series in Physics (2004).
- [5] 永井佑紀 「Hubbard モデルの RPA」 (2012 年).
URL: http://park.itc.u-tokyo.ac.jp/kato-yusuke-lab/nagai/note_120323_RPA.pdf

^{*21} もちろん, 磁気秩序はスピン占有数の差の秩序である。

補足事項 A.4 2 基底の相互作用のない系の Green 関数

強磁性状態 (4.114) のときの Green 関数は対角成分だけ値をもっていた。しかし、反強磁性状態のハミルトニアン (4.118) は 2 次形式で与えられるため、Green 関数 (4.119) は非対角成分も値をもつ (BCS 理論の平均場ハミルトニアンもこれにあたる*22)。 $A^\dagger \equiv (a_1^\dagger \ a_2^\dagger)$ として、次のように、2 次形式でハミルトニアンが与えられるときの Green 関数を考えたい。

$$H = A^\dagger \mathcal{H} A, \quad \mathcal{H} \equiv \begin{pmatrix} \xi_1 & \Delta^* \\ \Delta & \xi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.55})$$

一般に 2×2 の Hermite 行列は、単位行列 σ_0 と Pauli 行列 $\boldsymbol{\sigma}$ を用いて展開できるので

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= f_0 \sigma_0 + \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} f_0 + f_z & f_x - if_y \\ f_x + if_y & f_0 - f_z \end{pmatrix} \\ f_0 &= \frac{\xi_1 + \xi_2}{2}, f_x = \text{Re } \Delta, f_y = \text{Im } \Delta, f_z = \frac{\xi_1 - \xi_2}{2} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

と分解できる。この行列の固有値 ξ^\pm と固有ベクトル \mathbf{x}^\pm は*23

$$\xi^\pm \equiv f_0 \pm |\mathbf{f}| = \frac{1}{2} \left(\xi_1 + \xi_2 \pm \sqrt{(\xi_1 - \xi_2)^2 + 4|\Delta|^2} \right) \quad (\text{A.57})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^+ &= \begin{pmatrix} u \\ ve^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}^- = \begin{pmatrix} -ve^{-i\phi} \\ u \end{pmatrix} \\ u &\equiv \sqrt{\frac{1 + f_z/|\mathbf{f}|}{2}}, \quad v \equiv \sqrt{\frac{1 - f_z/|\mathbf{f}|}{2}}, \quad \tan \phi = \frac{f_y}{f_x} \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

*22 BCS 近似ハミルトニアンに平均場近似すると

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & a_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu & -\Delta \\ -\Delta^* & -(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

で与えられる。

*23 例えば、BCS 理論の平均場ハミルトニアンの固有値は $E_{\mathbf{k}} = +\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + |\Delta|^2}$, と $-E_{\mathbf{k}}$ 。

ここで、規格化条件より $u^2 + v^2 = 1$ である。したがって、 $U \equiv (\mathbf{x}^+ \ \mathbf{x}^-)$, $A \equiv UB \left[B^\dagger \equiv \begin{pmatrix} b_+^\dagger & b_-^\dagger \end{pmatrix} \right]$ とすれば、 $U^\dagger \mathcal{H} U = \text{diag}(\xi^+, \xi^-)$ から

$$H = \xi^+ b_+^\dagger b_+ + \xi^- b_-^\dagger b_- \quad (\text{A.59})$$

と変換できる（これは皆さんも馴染み、Bogoliubov 変換ですね）。この基底（Bogoliubov 変換後の基底）での松原 Green 関数 $\tilde{G}_\pm^T(\tau) \equiv -\langle T_\tau b_\pm(\tau) b_\pm^\dagger \rangle / \hbar$ は対角的であり、その Fourier 変換は

$$\tilde{G}_\pm^T(\omega_n) = \frac{1}{i\hbar\omega_n - \xi^\pm} \quad (\text{A.60})$$

となる。元の基底（Bogoliubov 変換前の基底）での松原 Green 関数 $\tilde{G}_\pm^T(\tau) \equiv -\langle T_\tau a_i(\tau) a_j^\dagger \rangle / \hbar \neq G_\pm^T(\tau)$ は、行列式を $D(z) \equiv (z - \xi_1)(z - \xi_2) - |\Delta|^2$ ($z = i\hbar\omega_n$) として

$$\begin{aligned} G^T(\omega_n) &= \begin{pmatrix} z - \xi_1 & -\Delta^* \\ -\Delta & z - \xi_2 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{D(z)} \begin{pmatrix} z - \xi_2 & \Delta^* \\ \Delta & z - \xi_1 \end{pmatrix} \\ &= \tilde{G}_+^T(\omega_n) \begin{pmatrix} u^2 & uve^{-i\phi} \\ uve^{i\phi} & v^2 \end{pmatrix} + \tilde{G}_-^T(\omega_n) \begin{pmatrix} v^2 & -uve^{-i\phi} \\ -uve^{i\phi} & u^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

最後の表式は

$$G^T = U \tilde{G}^T U^\dagger$$

とも表現できる（つまり、Green 関数も同じように変換される）。 $D(z) = 0$ の解は $z = \xi^\pm$ であり、Green 関数の極^{*24}が系の固有エネルギー ξ^\pm を与えることが分かる^{*25}。(A.61) の最後の表式を用いて、 $i = 1, 2$ の状態密度を求めると

$$\rho_1(\epsilon + \mu) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{11}^R(\epsilon/\hbar) = u^2 \delta(\epsilon - \xi^+) + v^2 \delta(\epsilon - \xi^-) \quad (\text{A.62})$$

$$\rho_2(\epsilon + \mu) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{22}^R(\epsilon/\hbar) = v^2 \delta(\epsilon - \xi^+) + u^2 \delta(\epsilon - \xi^-) \quad (\text{A.63})$$

*24 複素関数の正則でない点（特異点）の一種。

*25 もちろん、もともと対角成分しか持たない 1 基底の相互作用のない Green 関数 (3.55) も固有エネルギーで極をもつ。

であり*26, u^2 と v^2 は ξ^+ と ξ^- のバンドに $i = 1$ 状態が含まれる割合*27を表している。 $i = 2$ の場合は v^2 と u^2 がその割合である。

期待値 $n_{ij} \equiv \langle a_i^\dagger a_j \rangle$ は, (3.56) から $G^T(\omega_n)$ を用いて $n_{ij} = \beta^{-1} \sum_n G_{ij}^T(\omega_n) e^{i\omega_n 0+}$ で求められるので

$$\begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} \\ n_{21} & n_{22} \end{pmatrix} = f(\xi^+) \begin{pmatrix} u^2 & uve^{i\phi} \\ uve^{-i\phi} & v^2 \end{pmatrix} + f(\xi^-) \begin{pmatrix} v^2 & -uve^{i\phi} \\ -uve^{-i\phi} & u^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.64})$$

全粒子数は $n_{11} + n_{22} = [f(\xi^+) + f(\xi^-)](u^2 + v^2) = f(\xi^+) + f(\xi^-)$ である。係数を具体的に表すと

$$u^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\xi_1 - \xi_2}{\sqrt{(\xi_1 - \xi_2)^2 + 4|\Delta|^2}} \right] \quad (\text{A.65})$$

$$v^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\xi_1 - \xi_2}{\sqrt{(\xi_1 - \xi_2)^2 + 4|\Delta|^2}} \right] \quad (\text{A.66})$$

$$uve^{i\phi} = \frac{\Delta}{\sqrt{(\xi_1 - \xi_2)^2 + 4|\Delta|^2}} \quad (\text{A.67})$$

Bose 粒子系の場合も同様に求めることができる。

*26 相互作用のない系の遅延 Green 関数は

$$G_n^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar(\omega + i\delta) - \xi_{n\mathbf{k}}} = \frac{(\hbar\omega - \xi_{n\mathbf{k}}) + i\delta}{(\hbar\omega - \xi_{n\mathbf{k}})^2 + \delta^2}$$

であり, $G_n^R(\mathbf{k}, \omega)$ のスペクトル強度は, 正の無限小量 $\delta = +0$ に対して

$$A_n(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_n^R(\mathbf{k}, \omega) \quad (\text{3.41})$$

$$A_n(\mathbf{k}, \omega) = \delta(\hbar\omega - \xi_{n\mathbf{k}}) \quad (\text{3.43})$$

となる。つまり, $G_n^R(\mathbf{k}, \omega)$ のスペクトル強度が強い ($\delta = +0$ では, 発散している) 曲線が分散関係 $\xi_{n\mathbf{k}}$ を表す。状態密度は

$$\rho_n(\epsilon + \mu) = \sum_{\mathbf{k}} A_n(\mathbf{k}, \epsilon/\hbar) \quad (\text{3.44})$$

のように表される。2 基底の場合は (A.62), (A.63) のようにスペクトル強度が u と v で混ざる。

*27 超伝導の BCS ハミルトニアンでは, 電子とホールの割合を表していた。