研究ノート_解析計算

電気伝導度と量子計量の関係

電気伝導度は

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1) = -\frac{1}{\omega_1}\Sigma_k \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega)(\mathrm{Tr}[J_{\alpha\beta}(G^R - G^A) + J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta(G^R - G^A) + J_\alpha(G^R - G^A)J_\beta G^A(\omega-\omega_1)]$$

で与えられる。この実部を考える。

まず、第一項は純虚数なので寄与しない。次に第二項を考える。

$$\frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1)+\sigma_{\beta\alpha}(\omega_1)}{2} = \frac{1}{2\omega_1}\Sigma_k(f(E_n)-f(E_m))\mathrm{Re}\frac{i((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})}{\omega_1-(E_m-E_n)+i\delta}$$

$$\mathrm{Re}\frac{i((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})}{\omega_1-(E_m-E_n)+i\delta} = ((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})\mathrm{Re}\frac{i}{\omega_1-(E_m-E_n)+i\delta}$$

$$\pi\delta(\omega_1-(E_m-E_n))$$

$$\frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1)+\sigma_{\beta\alpha}(\omega_1)}{2} = \frac{\pi}{2\omega_1}\Sigma_k(f(E_n)-f(E_m))((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})\delta(\omega_1-(E_m-E_n))$$

$$\Sigma_{n:occ}\Sigma_{m:emp}\frac{\pi}{2\omega_1}((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})\delta(\omega_1-(E_m-E_n)) - \Sigma_{n:emp}\Sigma_{m:occ}((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})\delta(\omega_1-(E_m-E_n))$$

$$\Sigma_{n:occ}\Sigma_{m:emp}((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})[\delta(\omega_1-(E_m-E_n))-\delta(\omega_1-(E_n-E_m))]$$

$$\frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1)+\sigma_{\beta\alpha}(\omega_1)}{2\pi} = \Sigma_k\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}(\omega_1,k)$$

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}(\omega_1,k) = \frac{1}{2\omega_1}\Sigma_{n:occ}\Sigma_{m:emp}((J_\alpha)_{nm}(J_\beta)_{mn}+(J_\beta)_{nm}(J_\alpha)_{mn})[\delta(\omega_1-(E_m-E_n))-\delta(\omega_1-(E_n-E_m))]$$

$$\frac{1}{2}\Sigma_{n:occ}\Sigma_{m:emp}[\frac{\langle n|\partial_\alpha H|m\rangle\langle m|\partial_\beta H|m\rangle}{(E_n-E_m)^2}+(\alpha\leftrightarrow\beta)] = g_{\alpha\beta}$$

$$a = 1 \tag{1}$$
$$= 2 \tag{2}$$

相互作用ありのQM

同様の計算をする。

$$\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta G^R] = \langle n_L(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|G^R(\omega+\omega_1)|k_R(\omega)\rangle\langle k_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle\ell_L(\omega)|G^R(\omega)|n_R(\omega)\rangle \tag{3}$$

$$\langle n_L(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\frac{\delta_{mk}}{\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1)}\langle k_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_R(\omega+\omega_1)\rangle\frac{\delta_{\ell n}}{\omega-E_n} \tag{4}$$

$$= \frac{\langle n_L(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))(\omega-E_n)} \tag{5}$$

ここで、band coalescentの項を無視する

$$\langle n_L(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle \approx |||n_L(\omega)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle \tag{6}$$
$$\langle m_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle \approx |||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle \tag{7}$$

そうすれば

$$\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta G^R] \approx \frac{|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))(\omega-E_n)} \tag{8}$$

を得る。

次に

$$\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta G^A] \tag{9}$$
$$= \langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|G^R(\omega+\omega_1)|k_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle k_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_L(\omega)\rangle\langle\ell_R(\omega)|G^A(\omega)|n_L(\omega)\rangle \tag{10}$$
$$= \langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\frac{\delta_{mk}}{\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1)}\langle k_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_L(\omega)\rangle\frac{\delta_{\ell n}}{\omega-E_n^*} \tag{11}$$
$$= \frac{\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_L(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))(\omega-E_n^*)} \tag{12}$$
$$\approx \frac{|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))(\omega-E_n^*)} \tag{13}$$

したがって

$$\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta(G^R(\omega)-G^A(\omega)] \tag{14}$$

$$\approx \frac{|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))} \tag{15}$$

$$\times(\frac{1}{\omega-E_n(\omega)}-\frac{1}{\omega-E_n^*}) \tag{16}$$

これを対称化した上で実部を取ると、

$$[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+(\alpha\leftrightarrow\beta)]\in\mathbb{R}$$

に注意する。

$$E_n=E_n^{'}-iE_n^{"},\quad E_n^{'},E_n^{"}\in\mathbb{R} \tag{17}$$

と書くと、

$$\mathrm{Re}\frac{1}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))}\times(\frac{1}{\omega-E_n(\omega)}-\frac{1}{\omega-E_n^*}) \tag{18}$$

$$=-2\frac{E_m^{"}(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E_m^{'}(\omega+\omega_1))^2}\frac{E_n^{"}(\omega)}{(\omega-E_n^{'})^2+E_n^{"}(\omega)^2} \tag{19}$$

このfactor2が対称化するときの1/2とキャンセルする。マイナスは伝導度の公式のマイナスとキャンセルする。結果的に、第一項の寄与は

$$[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+(\alpha\leftrightarrow\beta)]|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2 \tag{20}$$

$$\times\frac{E_m^{"}(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E_m^{'}(\omega+\omega_1))^2}\frac{E_n^{"}(\omega)}{(\omega-E_n^{'})^2+E_n^{"}(\omega)^2}\frac{f(\omega)}{\omega_1^2} \tag{21}$$

となる。次に第二項を考える。

$$\omega-\omega_1\to\omega$$

とおいてomega積分を変数変換する。すると、例えば

$$f(\omega)\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega)J_\beta G^A(\omega-\omega_1)]\to f(\omega+\omega_1)\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta G^A(\omega)] \tag{22}$$

などのように置き換わる。

$$\mathrm{Tr}[J_\alpha G^R(\omega+\omega_1)J_\beta G^A(\omega)] \tag{23}$$

$$=\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|G^R(\omega+\omega_1)|k_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle k_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_L(\omega)\rangle\langle \ell_R(\omega)|G^A(\omega)|n_L(\omega)\rangle \tag{24}$$

$$=\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\frac{\delta_{mk}}{\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1)}\langle k_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_L(\omega)\rangle\frac{\delta_{\ell n}}{\omega-E_n(\omega)} \tag{25}$$

$$=\frac{\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|J^\beta|n_L(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))(\omega-E_n^*(\omega))} \tag{26}$$

$$\approx\frac{|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1))(\omega-E_n^*(\omega))} \tag{27}$$

$$\mathrm{Tr}[J_\alpha G^A(\omega+\omega_1)J_\beta G^A(\omega)] \tag{28}$$

$$=\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|G^A(\omega+\omega_1)|k_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle k_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_L(\omega)\rangle\langle \ell_R(\omega)|G^A(\omega)|n_L(\omega)\rangle \tag{29}$$

$$=\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\frac{\delta_{mk}}{\omega+\omega_1-E_m^*(\omega+\omega_1)}\langle k_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|\ell_L(\omega)\rangle\frac{\delta_{\ell n}}{\omega-E_n^*(\omega)} \tag{30}$$

$$=\frac{\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_L(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m^*)(\omega-E_n^*)} \tag{31}$$

$$\approx\frac{|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega+\omega_1-E_m^*(\omega+\omega_1))(\omega-E_n^*(\omega))} \tag{32}$$

この二つを合わせると

$$\frac{|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle}{(\omega-E_n^*(\omega))}\times(\frac{1}{\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1)}-\frac{1}{\omega+\omega_1-E_m^*(\omega+\omega_1)}) \tag{33}$$

となる。これを対称かして実部を取ると、結局

$$[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+(\alpha\leftrightarrow\beta)]|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2\mathrm{Re}\frac{1}{\omega-E_n^*(\omega)}(\frac{1}{\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1)}-\frac{1}{\omega+\omega_1-E_m^*(\omega+\omega_1)})/2 \tag{34}$$

を考えることになる。

$$\mathrm{Re}\frac{1}{\omega-E_n^*(\omega)}(\frac{1}{\omega+\omega_1-E_m(\omega+\omega_1)}-\frac{1}{\omega+\omega_1-E_m^*(\omega+\omega_1)}) \tag{35}$$

$$\approx 2\frac{E_m^{"}}{(\omega+\omega_1-E_m^{'})^2+E_m^{"}(\omega)^2}\frac{E_n^{"}}{(\omega-E_n^{'})^2+E_n^{"}(\omega)^2} \tag{36}$$

であり、factor2は再び対称化するときの1/2とキャンセルする。第一項との違いは符号だけであることに注意。結局、第二項の寄与は

$$\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+(\alpha\leftrightarrow\beta)]|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2 \tag{37}$$

$$\times\frac{E_m^{"}(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E_m^{'}(\omega+\omega_1))^2}\frac{E_n^{"}(\omega)}{(\omega-E_n^{'})^2+E_n^{"}(\omega)^2}\frac{-f(\omega+\omega_1)}{\omega_1^2} \tag{38}$$

となる。よって、二つの和は

$$[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+(\alpha\leftrightarrow\beta)]|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2 \tag{39}$$
$$\times\frac{E^"_m(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E'_m(\omega+\omega_1))^2}\frac{E^"_n(\omega)}{(\omega-E'_n)^2+E^"_n(\omega)^2}\frac{f(\omega)-f(\omega+\omega_1)}{\omega_1^2} \tag{40}$$

ここで再びband coalescentの寄与を無視して

$$\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+\langle n_R(\omega)|J_\beta|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\alpha|n_R(\omega)\rangle \tag{41}$$
$$\approx|||m_R(\omega+\omega_1)\rangle^2[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+\langle n_R(\omega)|J_\beta|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\alpha|n_R(\omega)\rangle]\in\mathbb{R} \tag{42}$$

結局、被積分関数は

$$[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+\langle n_R(\omega)|J_\beta|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\alpha|n_R(\omega)\rangle] \tag{43}$$
$$\times|||m_R(\omega+\omega_1)\rangle^2|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2 \tag{44}$$
$$\times\frac{E^"_m(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E'_m(\omega+\omega_1))^2}\frac{E^"_n(\omega)}{(\omega-E'_n)^2+E^"_n(\omega)^2} \tag{45}$$
$$\times\frac{f(\omega)-f(\omega+\omega_1)}{\omega_1^2} \tag{46}$$

と近似できる。ここで現れた

$$|m_R\rangle\langle m_L|,\quad |m_L\rangle\langle m_R| \tag{47}$$

は射影演算子であり、したがって半正定値であることが重要である。

ここまでの計算で、

$$g_{\alpha\beta}\approx\int_0^\infty d\omega_1\int_{-\infty}^\infty\frac{d\omega}{2\pi^2}[\langle n_R(\omega)|J_\alpha|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|J_\beta|n_R(\omega)\rangle+\langle n_R(\omega)|J_\beta|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|J_\alpha|n_R(\omega)\rangle] \tag{48}$$
$$\times|||m_R(\omega+\omega_1)\rangle^2|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2 \tag{49}$$
$$\times\frac{E^"_m(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E'_m(\omega+\omega_1))^2}\frac{E^"_n(\omega)}{(\omega-E'_n)^2+E^"_n(\omega)^2} \tag{50}$$
$$\times\frac{f(\omega)-f(\omega+\omega_1)}{\omega_1^2} \tag{51}$$

と分かった。見やすくするために

$$h(n,m,\omega,\omega_1,k)=|||m_R(\omega+\omega_1)\rangle^2|||n_L(\omega)\rangle||^2|||m_L(\omega+\omega_1)\rangle||^2 \tag{52}$$
$$\times\frac{E^"_m(\omega+\omega_1)}{(\omega+\omega_1-E'_m(\omega+\omega_1))^2}\frac{E^"_n(\omega)}{(\omega-E'_n)^2+E^"_n(\omega)^2} \tag{53}$$
$$\times\frac{f(\omega)-f(\omega+\omega_1)}{\omega_1^2} \tag{54}$$

を導入する。hは正であることが重要である。すると、

$$\sum_{\alpha,\beta}c_\alpha g_{\alpha\beta}c_\beta\approx\sum_n\int_0^\infty d\omega_1\int_{-\infty}^\infty\frac{d\omega}{2\pi^2}\langle n_R(\omega)|c_\alpha J_\alpha\sum_m h(n,m,\omega,\omega_1,k)|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|c_\beta J_\beta|n_R(\omega)\rangle \tag{55}$$
$$+\langle n_R(\omega)|c_\beta J_\beta\sum_m h(n,m,\omega,\omega_1,k)|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|c_\alpha J_\alpha|n_R(\omega)\rangle \tag{56}$$

ここで、

$$|\phi_n(\omega)\rangle=\sum_\alpha c_\alpha J_\alpha|n_R(\omega)\rangle \tag{57}$$

とおくと、

$$\sum_{\alpha,\beta}c_\alpha g_{\alpha\beta}c_\beta\approx\sum_n\int_0^\infty d\omega_1\int_{-\infty}^\infty\frac{d\omega}{2\pi^2}\langle\phi_n(\omega)|\sum_m h(n,m,\omega,\omega_1,k)|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|\phi_n(\omega)\rangle \tag{58}$$
$$+\langle\phi_n(\omega)|\sum_m h(n,m,\omega,\omega_1,k)|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)|\phi_n(\omega)\rangle\geq 0 \tag{59}$$

である。なぜなら、

$$\sum_m h(n,m,\omega,\omega_1,k)|m_R(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_L(\omega+\omega_1)|,\quad \sum_m h(n,m,\omega,\omega_1,k)|m_L(\omega+\omega_1)\rangle\langle m_R(\omega+\omega_1)| \tag{60}$$

はともに半正定値なので、非積分関数が非負になるからである。以上で、band coalescentの項を無視する近似で、量子計量の半正定値性が示された。