

量子物性特論 B 演習問題 (I) 「乱雑位相近似、密度揺らぎ、集団励起」

担当：加藤雄介 2010.04.26

問題 I-1 「運動方程式の方法；自由電子系」乱雑位相近似は、さまざまな形で定式化されている。講義以外の方法のひとつをここでは取り上げる。自由電子系を例に下準備をする。全系のハミルトニアンが（シュレーディンガー表示で）

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}} &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{ex}}(t), \\ \hat{\mathcal{H}}_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \underbrace{\frac{k^2}{2m}}_{\equiv \varepsilon_{\mathbf{k}}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{ex}}(t) &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left(v(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \rho_{\text{ex}}(\mathbf{q}, \omega) \exp(-i\omega t) + \text{c. c.} \right) \exp(\delta t)\end{aligned}$$

で与えられるとする。ここで、

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad \hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma}, \quad \hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} = \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}$$

であるものとする。このとき、ハイゼンベルグの運動方程式

$$i \frac{\partial \hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma}(t)}{\partial t} = [\hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma}(t), \hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}}] \quad (1)$$

を外場について一次までの精度で解き、

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma}(t) \rangle = \rho(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma, \omega) \exp(-i\omega t + \delta t) + \text{c.c.}$$

$$\rho(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \rho(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma, \omega) = \frac{v(\mathbf{q}) \rho_{\text{ex}}(\mathbf{q}, \omega)}{\Omega} \underbrace{2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\delta}}_{\equiv Q_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)}$$

のように与えられることを示せ。

問題 I-2 「運動方程式の方法；電子ガス（クーロン相互作用をする電子系）」

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}} &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{ex}}(t) \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} &= \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{q^2} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}\end{aligned}$$

でハミルトニアンが与えられるとき、

1. ハイゼンベルグの運動方程式 (1) の右辺に現れる $[\hat{\rho}_{\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}]$ は

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{v(\mathbf{k}')}{2} \left(\hat{\rho}_{\mathbf{k}'} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{k}',\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \right) + \left(\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{k}',\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \right) \hat{\rho}_{\mathbf{k}'} \right) \quad (2)$$

で与えられることを示せ。

2. (2) は $\hat{\rho}_{\mathbf{k}'}$ を含んでいる。このうち、 $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ だけが励起されるとして、

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}'} (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{k}',\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}) \rangle \sim \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}'} \rangle \langle (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{k}',\sigma} - \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}',\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}) \rangle$$

と近似して、運動方程式を解くと、

$$\frac{\rho(\mathbf{q}, \omega)}{\rho_{\text{ex}}(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{v(\mathbf{q}) Q_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) / \Omega}{1 - v(\mathbf{q}) Q_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) / \Omega}$$

となることを示せ。またこの近似の下での誘電関数は

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{v(\mathbf{q}) Q_0^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega)}{\Omega}$$

で与えられることを示せ。

問題 I-3 「スペクトル関数のモーメント」空間反転対称性がある系において、スペクトル関数

$$I(\mathbf{q}, \omega) = (1 - e^{-\beta\omega}) \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \langle m | \hat{\rho}_{\mathbf{q}} | n \rangle \langle n | \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} | m \rangle \delta(\omega - E_n + E_m)$$

の偶数次のモーメントはゼロであること

$$\int d\omega \omega^l I(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad l; \text{ even} \quad (3)$$

を示せ。

問題 I-4 「総和則」

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \frac{k^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}_{\equiv \hat{H}_0} + \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{q^2} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}$$

として

$$\langle [\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}, [\hat{H}, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}]] \rangle = \langle [\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}, [\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}]] \rangle = Nq^2/m$$

(N は全粒子数) を用いて総和則

$$\int d\omega \omega I(\mathbf{q}, \omega) = Nq^2/m \quad (4)$$

を示せ。

問題 I-5 「厳密なプラズマ周波数」(3), (4) を用いて、誘電関数を

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = \left(1 + \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} Q^{\text{R}}(\mathbf{q}, \omega) \right)^{-1} \quad (5)$$

ω^{-1} で展開すると

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) \sim 1 - \frac{\omega_{\text{p}}^2}{\omega^2} + O(\omega^{-4}), \quad \omega_{\text{p}}^2 = 4\pi e^2 (N/\Omega)/m \quad (6)$$

となることを示せ。(6) は、乱雑位相近似によらず、高周波で厳密に成り立つ結果であることがわかる。

問題 I - 6 「自由フェルミオン系の密度揺らぎ」 相互作用のないフェルミオン系において時間に依存する外場 $U(\mathbf{r}, t)$ によって誘起される粒子数密度の揺らぎについて考える。外場の下でのハミルトニアンが

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \frac{k^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}}_{\equiv \hat{H}_0} + \int d\mathbf{r} \hat{\rho}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_0 + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}(t) \quad (7)$$

与えられるとする。 $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ は粒子数密度演算子で、そのフーリエ変換

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

は、フェルミオンの生成消滅演算子 $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ を用いて

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma} \quad (9)$$

と表される。(7) の最右辺の式は (8), (9) と

$$U_{\mathbf{q}}(t) = \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) U(\mathbf{r}, t)$$

を用いて導いた。外場ポテンシャルの時間依存性が

$$U_{\mathbf{q}}(t) = U(\mathbf{q}, \omega) \exp(-i\omega t) \quad (10)$$

で表されるとき、線形応答の範囲では $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ の時刻 t における期待値 $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle$ の t 依存性は $\exp(-i\omega t)$ であるので、

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle = \rho(\mathbf{q}, \omega) \exp(-i\omega t) \quad (11)$$

とおく。線形応答理論を用いて

$$\frac{\rho(\mathbf{q}, \omega)}{U(\mathbf{q}, \omega)} = Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega \quad (12)$$

を導け。ただし Ω は体積を表す。 $Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)$ は次の表式で定義される自由フェルミ粒子に対する遅延グリーン関数

$$Q_0^R(\mathbf{q}, \omega) = -i \int_0^\infty dt \exp((i\omega - \delta)t) \langle [\hat{\rho}_{\mathbf{q}}(t), \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}] \rangle_0 \quad (13)$$

であり、 $\langle \quad \rangle_0$ は $\exp(-\beta \hat{H}_0)/Z_0$ 、 $Z_0 = \text{Tr} \exp(-\beta \hat{H}_0)$ を重みとした熱平均であるとする。

問題 I - 7 「絶対零度低次元自由電子系の密度揺らぎ」 2次元自由電子系において、 $\text{Im} Q_0^R(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$ となる $(|\mathbf{q}|, \omega)$ は3次元のそれと一致することを示せ。また1次元自由電子系において $\text{Im} Q_0^R(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$ となる $(|\mathbf{q}|, \omega)$ を求め、図示せよ。いずれも絶対温度 $T = 0$ で考えるものとする。

コメント：ここで得られる $(|\mathbf{q}|, \omega)$ の領域は、粒子空孔対励起状態である。一次元の結果は、密度揺らぎの低エネルギー励起状態が、

$$\varepsilon = \pm v_F |\mathbf{q}|, \quad \pm v_F |\mathbf{q} - 2\mathbf{k}_F|, \quad q \sim 0,$$

の線形分散を持つボース系の単一励起、または多重励起状態で表わされることを示唆している。その結果は短距離相互作用が存在する場合でも変わらない。短距離相互作用が存在する一次元フェルミ粒子系の低エネルギー状態を線形分散を持つ自由ボース系として記述する非摂動論的手法のことをボソン化の方法という。

問題 I - 8 「絶対零度一次元ブロッホ電子系の密度揺らぎ」

$$Q_0^R(q, \omega) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}} + i\delta} \quad (14)$$

において、 k, q を一次元結晶運動量とみなし、 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ を $|\mathbf{k}| < \pi/a$ (a は格子定数) に対して定義されたブロッホ状態の分散関係を表すとする、(14) は一次元ブロッホ電子系の密度揺らぎを表す遅延グリーン関数となる。以下では

$$\varepsilon(k) = -\varepsilon_0 \cos(ka), \quad \varepsilon_0 > 0$$

とし (one-dimensional tight-binding model)、絶対零度で、フェルミ分布関数が

$$f_{k,\sigma} = \theta\left(\frac{\pi}{2a} - |k|\right)$$

で与えられるとき、 $\text{Im}Q_0^R(q, \omega) \neq 0$ となる $(|q|, \omega)$ を求め、図示せよ。

コメント：ここで求めた (q, ω) の領域は、ブロッホ電子系の密度揺らぎの励起状態が存在する (q, ω) を表す。spin1/2 の一次元量子スピン系のうち XY 模型と呼ばれる模型 (ハイゼンベルグのスピン模型で z 成分間の交換相互作用がないもの) は一次元ブロッホ電子系にマップすることができ、 $\text{Im}Q_0^R(q, \omega)$ は一次元 XY 模型における中性子散乱強度に対応する動的構造因子 $S(q, \omega)$ である。上で求めた結果は、XY 模型における磁気励起が存在する (q, ω) を求めたことにほかならない。その結果は、一次元ハイゼンベルグスピン模型に対応すると考えられている磁性体の中性子散乱の実験結果と (大まかな性質については) 一致している。なお一次元ハイゼンベルグスピン模型の動的構造因子の計算はベータ仮説法という手法を用いて厳密解が求められている。

問題 I - 9 「短距離相互作用系の RPA」フェルミオン系において 2 体相互作用 $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ が短距離型である場合、すなわち 2 体相互作用のフーリエ変換の $\tilde{v}(q)$

$$\tilde{v}(q) = \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$$

において $\tilde{v}(q \rightarrow 0)$ が有限である場合に、時間に依存する外場 $U(\mathbf{r}, t)$ によって誘起される粒子数密度の揺らぎについて考える。この場合のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{v}(q) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}' \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k} \sigma} + \int d\mathbf{r} \hat{\rho}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, t) \quad (15)$$

$$= \hat{H}_0 - \frac{N\tilde{v}(0)}{2\Omega} + \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \tilde{v}(q) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} U_{\mathbf{q}}(t) \quad (16)$$

で与えられる (N は全粒子数)。乱雑位相近似

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} \rightarrow \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \langle \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} \rangle + \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} + \text{c-number}$$

の下、(10), (11) を用いると (16) は、

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} (U(\mathbf{q}, \omega) + \tilde{v}(q) \rho(\mathbf{q}, \omega)) \exp(-i\omega t) + \text{c-number} \quad (17)$$

と置き換えられる。このとき線形応答の範囲で

$$\frac{\rho(\mathbf{q}, \omega)}{U(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega}{1 - \tilde{v}(\mathbf{q})Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega}$$

で与えられることを示せ。

問題 I - 10 「短距離相互作用系の集団励起」前問で扱った系において $T = 0, \omega > 0$ のとき、

$$1 - v(\mathbf{q})Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega = 0$$

を満たす $(\mathbf{q}, \omega)$ は粒子・空孔対励起の状態か集団励起状態のいずれかの分散関係を与える。

$$\tilde{q} = q/k_F, \quad \tilde{\omega} = \omega m/k_F^2$$

を用いて $Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega$ が

$$\text{Re}Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega = \frac{mk_F}{2\pi^2} \left\{ -1 + \frac{1}{2\tilde{q}} \left[1 - \left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} - \frac{\tilde{q}}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + (\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} - \frac{\tilde{q}}{2})}{1 - (\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} - \frac{\tilde{q}}{2})} \right| - \frac{1}{2\tilde{q}} \left[1 - \left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}}{2} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{1 + (\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}}{2})}{1 - (\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}}{2})} \right| \right\} \quad (18)$$

$$\text{Im}Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega = \begin{cases} -\frac{mk_F}{4\pi\tilde{q}} \left[1 - \left(\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{q}} - \frac{\tilde{q}}{2} \right)^2 \right], & |\tilde{q}^2/2 - \tilde{q}| \leq \tilde{\omega} \leq \tilde{q}^2/2 + \tilde{q} \\ -\frac{mk_F\tilde{\omega}}{2\pi\tilde{q}}, & 0 \leq \tilde{\omega} \leq \tilde{q} - \tilde{q}^2/2 \end{cases} \quad (19)$$

で与えられることを用いて、 $q \ll k_F$ における集団励起状態の分散関係を $\omega = cq$ とおいたとき、 c を求めよ。

ヒント

$Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)$ の長波長極限 $q \rightarrow 0$ は、近づき方 (ω/q の比の取り方) に依存し、以下のように振舞う：

$$\text{Re}Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega \sim \begin{cases} \frac{k_F^3}{3\pi^2 m} \frac{q^2}{\omega^2}, & \omega \text{ fixed}, q \rightarrow 0 \\ \frac{mk_F}{\pi^2} \left(-1 + \frac{s}{2} \ln \left| \frac{1+s}{1-s} \right| \right), & s = m\omega/(k_F q) \text{ fixed}, q \rightarrow 0 \end{cases} \quad (20)$$

$$\text{Im}Q_0^R(\mathbf{q}, \omega)/\Omega \sim \begin{cases} 0, & \omega \text{ fixed}, q \rightarrow 0 \\ 0, & s \text{ fixed to be a value larger than } 1, q \rightarrow 0 \\ -mk_F s/(2\pi), & s \text{ fixed to be a value smaller than } 1, q \rightarrow 0 \end{cases} \quad (21)$$