

Nara Women's University

ボゾン化法による新奇一次元導体ピーナッツ型フラーレンポリマーの理論的研究

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2023-07-12 キーワード (Ja): ボゾン化法, ピーナッツ型フラーレンポリマー キーワード (En): 作成者: 西本,真侑 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10935/5954

ボゾン化法による新奇一次元導体
ピーナッツ型フラレンポリマーの理論的研究

奈良女子大学大学院 人間文化総合科学研究科
博士後期課程 自然科学専攻
西本 真侑

2023年3月14日

目次

第 1 章	序論	5
1.1	研究の背景	5
1.2	目的	11
1.3	構成	12
第 2 章	フラーレンポリマーにおける朝永ラッティンジャー理論	15
2.1	モデルとボゾン化法の適用	15
2.2	状態密度	25
第 3 章	スペクトル関数	31
3.1	解析的な計算	31
3.2	スペクトル関数の数値解析	36
第 4 章	電気抵抗率と光学伝導度	47
4.1	モデルとハミルトニアン	47
4.2	メモリー関数	49
4.3	電気抵抗率	52
4.4	光学伝導度	56
第 5 章	まとめ	59
付録 A	一次元スピンレスフェルミオン系とボゾン化法	63
A.1	ボゾン化法	64
A.2	分布関数	71
A.3	状態密度	72
A.4	スペクトル関数	73
付録 B	ピーナッツ型フラーレンポリマーにおけるスペクトル関数	79

B.1	遅延グリーン関数 $G_{p,\nu}^R(x, t)$ の計算	79
B.2	$T = 0$ でのスペクトル関数	82
付録 C	メモリー関数の計算の詳細	91
参考文献		105

第 1 章

序論

1.1 研究の背景

1.1.1 電子相関効果

金属中を運動する伝導電子には電子間相互作用がはたらくが、十分低温、低エネルギーでは相互作用のない自由フェルミ粒子系と定性的に同じ振る舞いを示す。このようなフェルミ粒子系をフェルミ液体と呼ぶ [1–3]。フェルミ液体では、電子は相互作用の効果がかかり込まれた有効質量 m^* をもつ準粒子と呼ばれる「衣を着た電子」として振る舞う。このような考え方は、相互作用によって有限となる準粒子の寿命が、十分に長いとみなせる場合に有効であり、三次元系では低温かつフェルミ面近傍で準粒子の寿命は十分長いとみなすことができる [4, 5]。その結果、例えば、低温での比熱 $C(T)$ が温度 T に比例 ($C(T) \propto m^*T$) し、磁化率 $\chi(T)$ が温度に依存しない ($\chi(T) \sim m^*$) というように、有効質量を用いて自由フェルミ系と同じ表式を得ることができる [6]。さらに、運動量分布関数には、図 1.1(a) のようにフェルミ波数で有限の不連続のとびが現れる。これは準粒子の寿命がフェルミ面に近付くにつれて無限大になることを反映しており、フェルミ液体の重要な特徴である。

一方で、一次元系では、電子の運動の自由度が強く制限されるため、フェルミ液体の考え方は破綻し [7]、代わりに朝永ラッティンジャー液体 (TLL) 状態が現れる [8–13]。TLL 状態では低エネルギー励起は電荷の励起とスピンの励起に対応する互いに独立な集団励起として記述される。集団励起はボーズ統計に従うことから、一次元系ではフェルミエネルギー付近で図 1.2 のようにバンドを線形に近似し、ボゾン演算子を用いて系の励起を記述するボゾン化法 [11–14] が有効である (付録 A.1 参照)。この手法を用いて運動量分布関数を求めると、 $|k - k_F|^A$ で与えられる冪依存型の関数となり、図 1.1(b) のように、TLL 状態ではフェルミ波数でのとびは見られず連続となる。ここで、 A は相互作用に依存する

指数である (付録 A.2 参照)。この他にも、TLL 状態では様々な相関関数に冪依存性が見られる。たとえば、状態密度 $D(\epsilon, T)$ についても、 $D(\epsilon, 0) \propto |\epsilon|^\lambda$ と $D(0, T) \propto T^\lambda$ のように冪依存型の関数となる。ここで、 ϵ はフェルミエネルギーを基準としたエネルギーであり、 λ は相互作用の強さに依存する指数である (付録 A.3 参照)。さらにスペクトル関数は、図 1.3 のように、スピンと電荷が独立した励起速度 v_σ と v_ρ を持つことからスペクトルが分裂し、それぞれの励起に対応するエネルギーで冪依存型の特異性が見られる。また、異なるブランチ間の散乱を考えた場合には、 $-v_\rho$ に対応するエネルギーでショルダーが現れる (付録 A.4 参照) [15–18]。以上のように、一次元系では高次元系とは異なる特異な振る舞いが見られる。

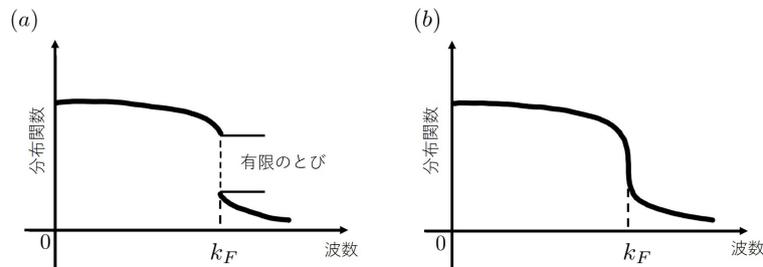


図 1.1 (a) 三次元相関電子系と (b) 一次元系相関電子系の運動量分布関数。

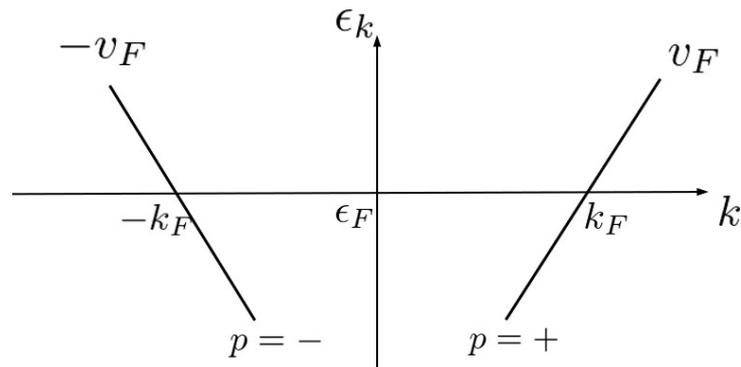


図 1.2 線形に近似したエネルギーバンド。 ϵ_F はフェルミエネルギー、 k_F はフェルミ波数、 v_F はフェルミ速度である。

1.1.2 カーボンナノチューブとフラレンポリマー

1991 年に発見されたカーボンナノチューブ (CNT) [20] は、蜂の巣格子型の炭素原子から成るグラフェン (図 1.4) を円筒状に丸めた構造を持つ物質である。その丸め方は多数存

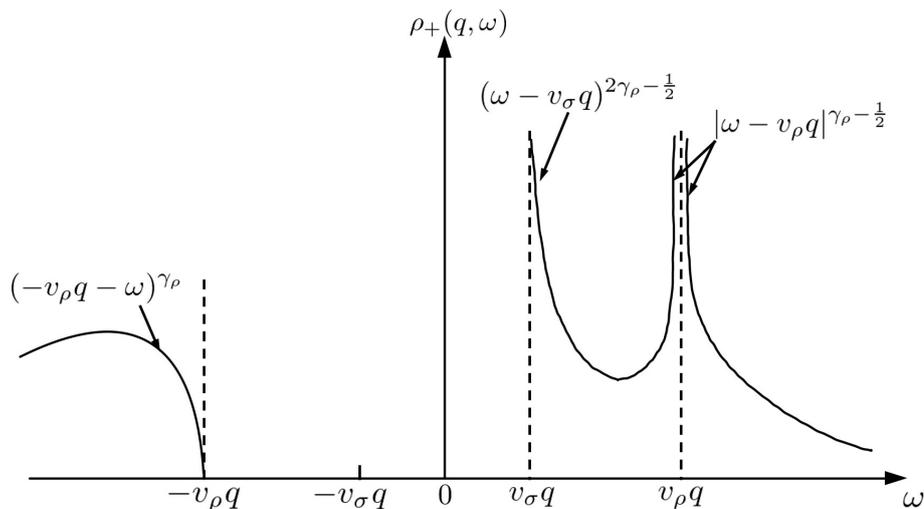


図 1.3 SU(2) 対称性を持つ系におけるスピン自由度を含んだ場合の + ブランチのスペクトル関数 $\rho_+(q, \omega)$ [19]。ここで、 $q > 0$ であり、指数 γ_ρ は相互作用に依存する変数である。 v_ρ は電荷励起の速度、 v_σ はスピン励起の速度であり、 $\omega > 0$ において電荷の励起とスピンの励起で分離している。

在し、チューブ 1 周の長さを持つカイラルベクトル

$$\mathbf{L} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (1.1)$$

によって構造が決定される。ここで、 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 は二次元六角格子の基本並進ベクトルである。カイラリティと呼ばれる整数の組み合わせ (n, m) が (n, n) の場合がアームチェア型であり金属の性質を示す。 $(n, 0)$ の場合がジグザグ型であり、 n が 3 の倍数の場合に金属、それ以外の場合は半導体の性質を示す。一般的な (n, m) の場合がカイラル型であり、 $n - m$ が 3 の倍数の時に金属、それ以外の場合は半導体の性質を示す。このように丸め方で電気伝導性が変化するという性質から、半導体デバイスなどへの応用が期待されている。

金属的性質を示す CNT に対する光電子分光実験の結果が図 1.5 である。この実験は状態密度の直接観測となっている。状態密度のエネルギーおよび、温度について、指数が約 0.43 ~ 0.54 の特異な冪的振る舞いが観測されたことから、CNT は TLL 状態が実現する一次元系であると考えられている [21]。

CNT と同じく炭素原子のみから成る物質にフラレンがある [22]。フラレンは中空状の炭素分子であり、その代表として挙げられる C_{60} は 60 個の炭素原子の五員環と六員環で構成されるサッカーボール状の三次元中空分子である。1993 年には、この C_{60} が紫外光照射によって重合することが Rao らによって報告された [23]。その後、尾上らによって、紫外光照射で図 1.6 の二次元ダンベル型フラレンポリマーが作成され [24-28]、電子

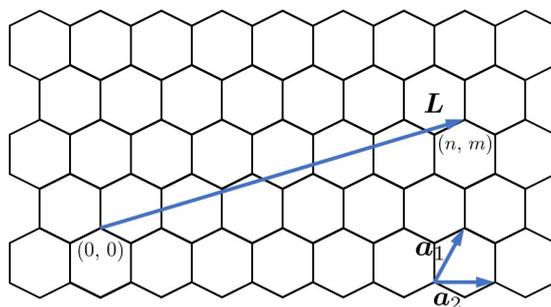


図 1.4 グラフェンの蜂の巣格子。カイラルベクトル L は基本並進ベクトル a_1 、 a_2 を用いてカイラリティ (n, m) で指定される。

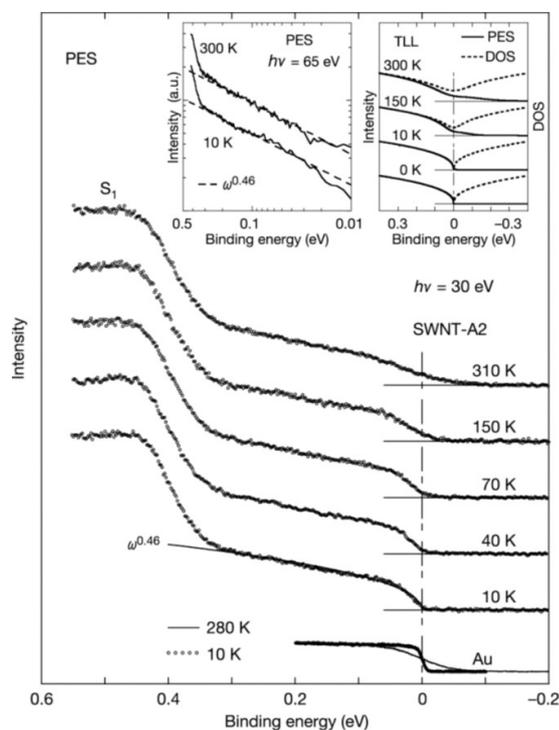


図 1.5 CNT に対する光電子分光実験の結果。横軸が束縛エネルギー、縦軸が強度である。参考文献 [21] より引用。

線照射で図 1.7 の一次元ピーナッツ型フラーレンポリマー (PSFP) が作成された [29–33]。ダンベル型フラーレンポリマーは C_{60} 分子同士が互いの $C = C$ 二重結合を開裂させることで 2 つの $C - C$ 単結合でリンクしたシクロ四員環を介した結合をしており、全体として π 電子共役系が形成されていないことから半導体的性質を示すと考えられる。一方で、PSFP は超高真空チャンバー内でフラーレン薄膜 (膜厚 100 nm) を作成した後に、電子線 (入射エネルギー 3 keV、ドーズ量 $10^{15} \sim 10^{16} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) を照射することで C_{60} 同士が一般化 Stone-Wales (GSW) 転移反応を通して重合しポリマーが形成され [34, 35]、 π 電子共役系を形成することによって金属的性質を示すと考えられている。

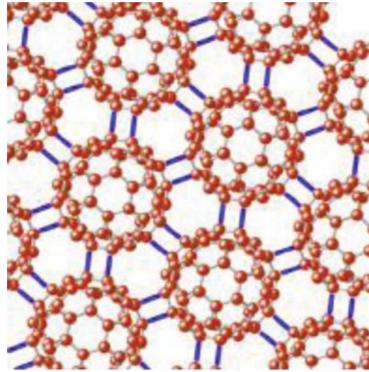


図 1.6 二次元ダンベル型フラーレンポリマー。参考文献 [28] より引用。

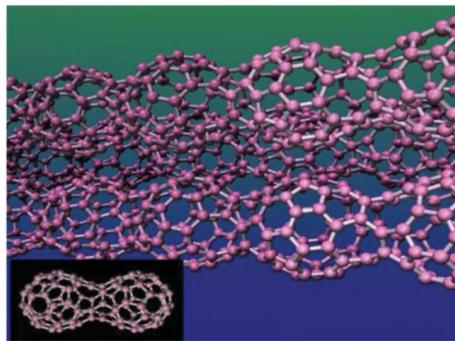


図 1.7 一次元ピーナッツ型フラーレンポリマー。カーボンナノチューブに周期的な凹凸を付加したような構造をもつ。参考文献 [28] より引用。

この PSFP に対して *in situ* 高分解能光電子分光実験が行われ、状態密度が実験的に調べられた [36]。フェルミエネルギー付近での光電子スペクトル (エネルギー分解能 : 12 meV) の温度依存性 (30~350 K) が図 1.8 である。温度が 350K から 30K に下がるにつれて $D(\omega, T = 0) \propto |\hbar\omega - E_F|^\alpha$ の冪乗則が見られることから、PSFP は TLL 状態が実現する一次元電子系であることが言える。図 1.8 を両対数プロットした図 1.9 に対してフィッティングを行った結果、 $D(\omega, T = 0) \propto |\omega|^\alpha$ について $\alpha = 0.65 \pm 0.08$ が得られ、 $D(\omega = 0, T) \propto T^\alpha$ では $\alpha = 0.59 \pm 0.04$ が得られている。この約 0.6 という PSFP の指数 α の値は金属単層カーボンナノチューブの約 0.5 (0.43~0.54) [21] と比べて非常に大きな値となっている。この指数の増加は、参考文献 [37] で理論的に予想されたリーマン幾何学の効果を反映した曲率ポテンシャルによる指数の増加とよく一致しているため、PSFP の図 1.7 のような周期的な凹凸曲面構造により有効的なポテンシャルが現れていると考えられている。このように、PSFP は、1950 年代から理論的に予測されてきた、電子に対するリーマン幾何学的効果 [38] が発現する物質として注目を集めている。

また、PSFP は、電子線を照射した領域のみポリマー化することで物理的性質を制御す

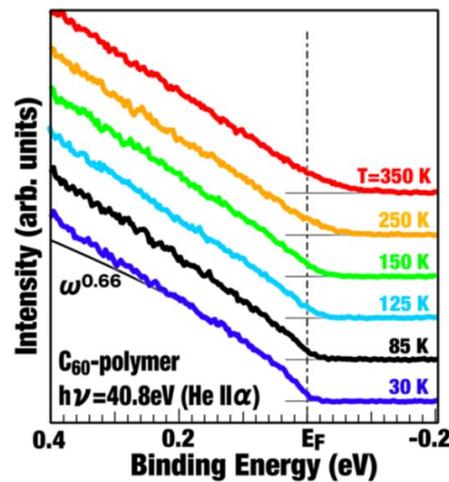


図 1.8 PSFP のフェルミエネルギー付近における *in situ* 高分解能光電子スペクトル (エネルギー分解能: 12 meV) の温度依存性。横軸が束縛エネルギー、縦軸が強度である。参考文献 [36] より引用。

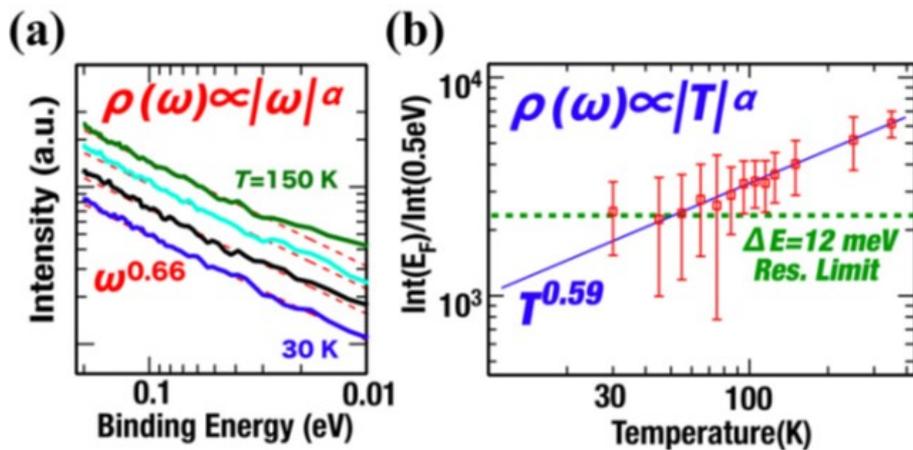


図 1.9 図 1.8 の光電子スペクトルの (a) 束縛エネルギー、(b) 温度についての幂依存性。両者ともに両対数でプロットされている。(b) については縦軸がフェルミエネルギー E_F での強度と束縛エネルギー 0.5 eV での強度の比で表されている。参考文献 [36] より引用。

ることができるため、デバイス応用の面でも魅力的であると考えられる [39]。さらに、上述した幾何学的曲率による有効ポテンシャルの効果が現れるなど、CNT と異なる新奇なカーボンナノ物質としてさらなる研究の進展が期待されている。

しかしながら、PSFP が形成される際に起こる GSW 転移は、図 1.10 のように炭素原子同士の結合が 90 度回転することで、環員数が変化する反応であることから重合部分の架橋構造には様々な形状が現れうる。*in situ* IR 分光実験によると、1つのポリマー内に

異なる架橋構造は現れないことがわかっているが、その架橋部分の幾何学的構造は明らかではない [30–32]。一方で理論研究として、比較的安定な PSFP の架橋構造を表した図 1.11 の T3 構造 [40] に対して GSW 転移により得られる 53 種類の構造異性体に対して第一原理計算が行われ、バンド構造や電気伝導性などが調べられた [41]。例えば 53 種類の構造異性体の中で、ユニットセル当たりの総エネルギーが T3 構造と比較して 1.421 eV 低く 2 番目に安定な FP6L 構造 (図 1.12) と、2.188 eV 低く最も安定な FP5N 構造 (図 1.13) に注目する。これらの構造間には、架橋部分が FP5N 構造は 5 個の八員環のみで構成されているのに対して、FP6L 構造は七員環と八員環で構成されているというわずかな違いが存在する。第一原理計算により得られたバンド分散は FP6L 構造が図 1.14、FP5N 構造が図 1.15 である。フェルミエネルギー (0 eV) 付近に注目すると、両構造共にバンドがフェルミエネルギーと交差していることから金属的であると考えられるが、そのバンド構造は大きく異なる。図 1.14 を見ると、FP6L 構造については、フェルミ波数が 1 つであり、ちょうどその点で 2 本のバンドが異なるフェルミ速度 (正および負) で交差している。また、これらのバンドは縮退していない。一方で、FP5N 構造では原子構造内の高度な対称性に起因して負のフェルミ速度を持つバンドが 2 重に縮退している。そのため、図 1.15 のように正のフェルミ速度を持つバンドとの合計 3 本のバンドがフェルミエネルギーからずれた所で交点を持ち、2 つのフェルミ波数が現れる。このように、架橋構造のわずかな幾何学的形状の違いから、物理的性質に影響を与えるフェルミエネルギー付近のバンド構造に大きな違いが現れる。したがって、さらなる研究の進展、デバイスへの応用のためには、合成された PSFP がどのような構造をもつのかを判別することが重要となる。

1.2 目的

T3 構造に対する GSW 転移により得られる 53 種類の構造異性体の内、実現する可能性が高いのはエネルギー的に安定なものであると考えられる。そこで、最もエネルギー的に安定な FP5N 構造と次に安定な FP6L 構造に対して、次章で述べる状態密度の理論的

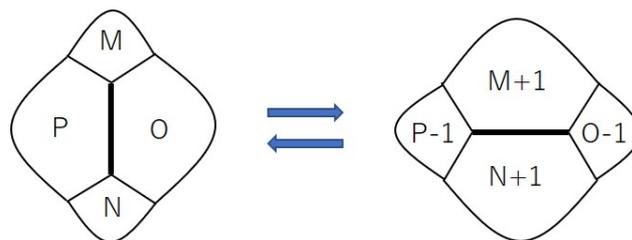


図 1.10 一般化 Stone-Wales 転移の概要図。例えば、M 員環と N 員環を繋ぐ炭素間の二重結合が 90 度回転し、M、N、O、P 員環が M+1、N+1、O-1、P-1 員環に変化する。

研究が行われたが、結果として両構造間には指数の定量的な違いが現れるが、その差は実験誤差の範囲に収まることがわかっている [42]。そのため、光電子分光実験による両構造の判別は難しい。そこで、本研究では、第一原理計算によるバンド構造を直接反映し、かつ実験的に観測可能な物理量であるスペクトル関数、および輸送特性として電気抵抗率と光学伝導度に注目し、両安定構造が定性的な違いにより判別できるかを明らかにすることを目的とする。

1.3 構成

本論文は全 5 章で構成されている。第 2 章では本研究で用いる PSFP のモデルとそれに関する先行研究の紹介を行う。ここでは、そのモデルに対してボソン化法が適用され、状態密度の解析が行われている。第 3 章と第 4 章では、それぞれ、スペクトル関数と電気抵抗率および光学伝導度の解析を行う。これらの物理量に対して解析的な表式を導出し、それに基づいた数値解析の結果を議論する。第 5 章では本研究のまとめを行う。



図 1.11 比較的エネルギー的に安定な T3 構造。参考文献 [41] より引用。

図 1.12 T3 構造に対する GSW 転移により得られる FP6L 構造。参考文献 [41] より引用。

図 1.13 T3 構造に対する GSW 転移により得られる FP5N 構造。参考文献 [41] より引用。

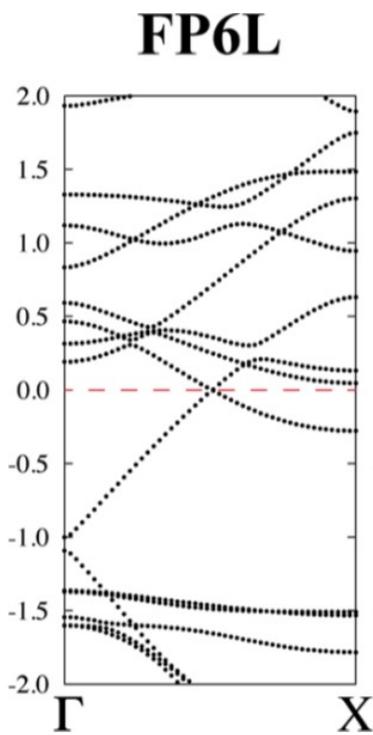


図 1.14 FP6L 構造の分散関係。赤色破線はフェルミエネルギーを表す。参考文献 [41] より引用。

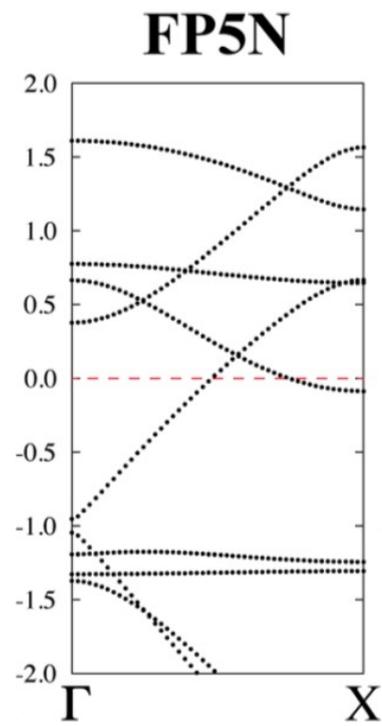


図 1.15 FP5N 構造の分散関係。赤色破線はフェルミエネルギーを表す。参考文献 [41] より引用。

第2章

フラレンポリマーにおける朝永ラッティンジャー理論

本章では、本研究で用いるフラレンポリマーの朝永ラッティンジャー液体 (TLL) 理論 [42] を紹介する。この理論では、第1章で紹介した第一原理計算によって得られた様々な構造のうち、2種類の安定構造 (FP6L、FP5N) を取り扱う。また、この理論を用いて得られた状態密度のエネルギーおよび温度依存性の結果およびその実験との比較について述べる。

2.1 モデルとボゾン化法の適用

第一原理計算によって得られたバンド分散 (図 1.14、1.15) の中から低エネルギー励起に重要な役割を果たすフェルミエネルギーをよぎるバンドのみを取り出し、それらに対してフェルミエネルギーにおいて線形近似を行う。その分散関係は図 2.1 によって与えられる。図 2.1(a) と (b) はそれぞれ FP6L と FP5N のバンド構造に対応する。以下では、FP6L の線形化されたバンド分散をバンド構造 I、FP5N の線形化されたバンド分散をバンド構造 II と記す。ここで、符号 $p = + (-)$ は右向き (左向き) に運動する状態を表す。バンド構造 I では、速度 v_1 と $-v_2$ ($-v_1$ と v_2) をもつバンド分散が波数 K_0 ($-K_0$) で交差している。これらの状態はスピン自由度を除いて縮退していない。一方、バンド構造 II では、速度 v_1 のバンド分散と速度 $-v_2$ のバンド分散、および $-v_1$ のバンド分散と v_2 のバンド分散が交差している。ここで、フェルミ速度 v_1 のバンド分散は縮退していないが、フェルミ速度 v_2 のバンド分散は二重に縮退している。このため、バンド構造 II では3つのバンド分散が交差するエネルギーよりもフェルミエネルギーが小さくなる。その結果、フェルミ速度 v_1 のバンド分散のフェルミ波数 K_1 とフェルミ速度 v_2 のバンド分散のフェルミ波数 K_2 は異なり、 $K_1 < K_2$ を満たす。第一原理計算によって得られたバンド

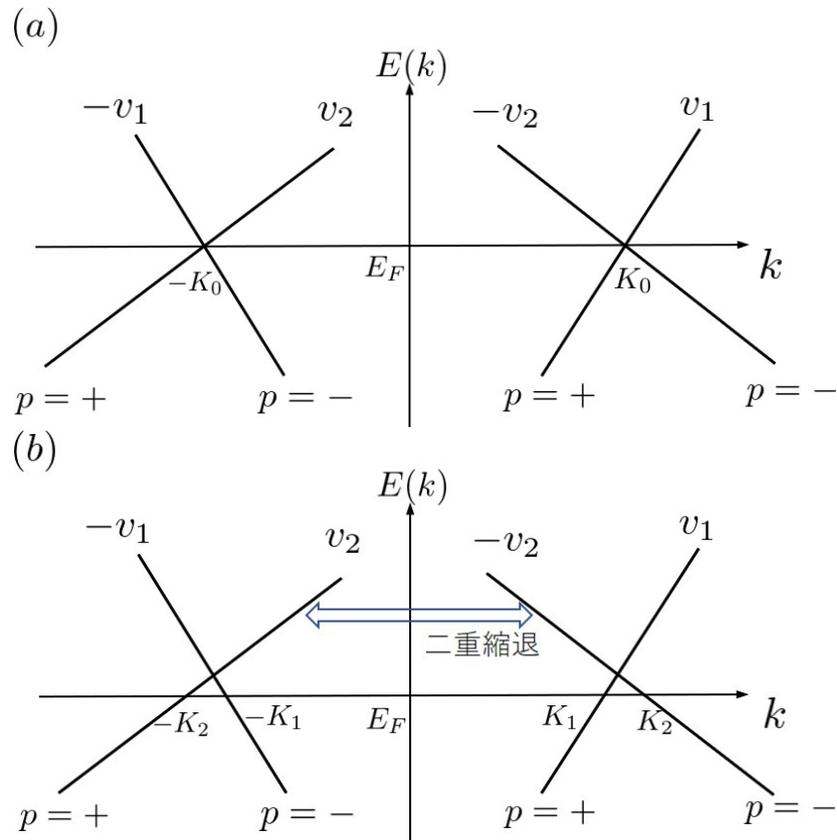


図 2.1 フラーレンポリマーの TLL 理論構築に必要なバンド分散。第一原理計算で得られたバンド分散 (図 1.14, 1.15) の中からフェルミエネルギー E_F をよぎるバンドのみを取り出し、 E_F 近傍で線形近似を行っている。(a) は FP6L、(b) は FP5N に対応し、以下ではそれぞれバンド構造 I、バンド構造 II と記す。ここで、 v_1 、 v_2 はフェルミ速度であり、 $p = +$ ($-$) は右向き (左向き) に運動する状態を表す。(a) では、各々のバンドは縮退しておらず、フェルミ波数 $\pm K_0$ で交差する。(b) では、フェルミ速度 v_1 のバンドは縮退していないが、フェルミ速度 v_2 のバンドが二重に縮退している。前者と後者のフェルミ波数はそれぞれ K_1 と K_2 である。

構造 I、II のフェルミ速度は表 2.1 にまとめられている。低エネルギー励起を記述するハ

表 2.1 バンド構造 I と II のフェルミ速度

	バンド構造 I	バンド構造 II
v_1	6.809×10^5 m/s	7.322×10^5 m/s
v_2	4.237×10^5 m/s	2.639×10^5 m/s

ミルトニアン¹の運動エネルギー部分 \mathcal{H}_k は以下の式で与えられる。

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_k &= \sum_{p=\pm} \sum_{\nu=1}^N \sum_k p v_{F\nu} k c_{p,\nu}^\dagger(k) c_{p,\nu}(k) \\ &= -i \sum_{p=\pm} \sum_{\nu=1}^N p v_{F\nu} \int dx \psi_{p,\nu}^\dagger \partial_x \psi_{p,\nu}\end{aligned}\quad (2.1)$$

ここで、 ν はスピン自由度を含むバンドインデックスである。したがって、その数 N はバンド構造 I では $N = 4$ 、バンド構造 II では $N = 6$ となる。また、 $v_{F\nu}$ は ν 番目のバンドのフェルミ速度である。バンドインデックス、フェルミ速度、およびスピンの間の関係は以下の表 2.2 にまとめられている。また、 $c_{p,\nu}(k)$ は ν 番目のバンドの p ブランチの波

表 2.2 バンドインデックス ν とフェルミ速度、スピンの間の関係

バンド構造 I			バンド構造 II		
ν	$v_{F\nu}$	spin	ν	$v_{F\nu}$	spin
1	v_1	\uparrow	1	v_1	\uparrow
2	v_2	\uparrow	2	v_2	\uparrow
			3	v_2	\uparrow
3	v_1	\downarrow	4	v_1	\downarrow
4	v_2	\downarrow	5	v_2	\downarrow
			6	v_2	\downarrow

数 k (k はフェルミ波数からのズレを表し、フェルミ波数よりも遥かに小さいものとする) の電子の消滅演算子であり、ゆるやかに変化する電子場の演算子 $\psi_{p,\nu}(x)$ と以下のような関係で結ばれている。

$$\psi_{p,\nu}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} c_{p,\nu}(k) \quad (2.2)$$

ここで、 L は系の長さである。この電子場の演算子を用いて、バンド構造 I および II のスピニアップの電子の消滅演算子 $\psi_\uparrow(x, t)$ およびスピндаウンの電子の消滅演算子 $\psi_\downarrow(x, t)$ は次のように与えられる。バンド構造 I では、

$$\psi_\uparrow(x, t) = \left(\psi_{+,1}(x, t) + \psi_{-,2}(x, t) \right) e^{iK_0 x} + \left(\psi_{-,1}(x, t) + \psi_{+,2}(x, t) \right) e^{-iK_0 x} \quad (2.3)$$

$$\psi_\downarrow(x, t) = \left(\psi_{+,3}(x, t) + \psi_{-,4}(x, t) \right) e^{iK_0 x} + \left(\psi_{-,3}(x, t) + \psi_{+,4}(x, t) \right) e^{-iK_0 x} \quad (2.4)$$

バンド構造 II では、

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}(x, t) = & \psi_{+,1}(x, t)e^{iK_1x} + \left(\psi_{-,2}(x, t) + \psi_{-,3}(x, t) \right) e^{iK_2x} \\ & + \psi_{-,1}(x, t)e^{-iK_1x} + \left(\psi_{+,2}(x, t) + \psi_{+,3}(x, t) \right) e^{-iK_2x} \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\downarrow}(x, t) = & \psi_{+,4}(x, t)e^{iK_1x} + \left(\psi_{-,5}(x, t) + \psi_{-,6}(x, t) \right) e^{iK_2x} \\ & + \psi_{-,4}(x, t)e^{-iK_1x} + \left(\psi_{+,5}(x, t) + \psi_{+,6}(x, t) \right) e^{-iK_2x} \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる。

電子間相互作用としては、長距離クーロン相互作用を取り入れる。その際、最も大きな行列要素を持つ項はカーボンナノチューブと同様に前方散乱項であり、そのハミルトニアン \mathcal{H}_{int} は以下の式で与えられる。

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{\bar{V}(0)}{2} \int dx \rho(x)^2 \quad (2.7)$$

ここで、 $\rho(x)$ は電荷密度の空間的にゆっくり変化する部分であり、 $\rho(x) =: \sum_{p=\pm} \sum_{\nu=1}^N \psi_{p,\nu}^{\dagger}(x) \psi_{p,\nu}(x)$: によって与えられる。前方散乱の行列要素 $\bar{V}(0)$ は、 $\bar{V}(0) = (2e^2/\kappa) \ln R_s/R$ と書かれる。ここで $-e$ は電子の電荷、 κ は誘電率、 R はフラレンポリマーの平均半径、 R_s はクーロン相互作用の長距離のカットオフである。なお、 $\bar{V}(0)$ は、 R_s に対数関数で依存しているため、 R_s の値にはあまり依らない。実際には他の相互作用も存在するが、それらは $O(a/R)$ (a は最近接炭素間距離) であるため無視する。このような相互作用は前章で紹介したカーボンナノチューブの光電子分光の結果を再現する。

次に、ハミルトニアンおよびゆるやかに変化する電子場の演算子 $\psi_{p,\nu}(x)$ を位相変数を用いて表す。付録 A で記した手法を多チャンネルに拡張し [43]、位相変数 $\theta_{\nu}(x)$ および $\phi_{\nu}(x)$ を導入する。

$$\theta_{\nu}(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_p p \left\{ Q_{p,\nu} - \frac{2\pi p x}{L} N_{p,\nu} - \frac{2\pi i}{L} \sum_{q \neq 0} p \frac{e^{-iqx}}{q} \rho_{p,\nu}(q) \right\} \quad (2.8)$$

$$\phi_{\nu}(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_p p \left\{ Q_{p,\nu} - \frac{2\pi p x}{L} N_{p,\nu} - \frac{2\pi i}{L} \sum_{q \neq 0} p \frac{e^{-iqx}}{q} \rho_{p,\nu}(q) \right\} \quad (2.9)$$

ここで、 $[Q_{p,\nu}, N_{p',\nu'}] = i\delta_{pp'}\delta_{\nu\nu'}$ であり、 $\rho_{p,\nu}(q)$ は次のように定義される。

$$\rho_{p,\nu}(q) \equiv \begin{cases} \sum_k c_{p,\nu}^{\dagger}(k+q) c_{p,\nu}(k) & \cdots q \neq 0 \\ N_{p,\nu} = \sum_k : c_{p,\nu}^{\dagger}(k) c_{p,\nu}(k) : & \cdots q = 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

この位相変数は、交換関係

$$[\theta_\nu(x), \phi_{\nu'}(x')] = i\pi \text{sgn}(x - x') \delta_{\nu\nu'} \quad (2.11)$$

を満たす。この位相変数を用いて、ハミルトニアン $\mathcal{H} = \mathcal{H}_k + \mathcal{H}_{\text{int}}$ は

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\nu, \nu'=1} \int dx \{ \Pi_\nu (K^{-1})_{\nu\nu'} \Pi_{\nu'} + \partial_x \theta_\nu V_{\nu\nu'} \partial_x \theta_{\nu'} \} \quad (2.12)$$

と書ける。ここで、 $\Pi_\nu = -\partial_x \phi_\nu / (2\pi)$ によって定義され、

$$[\theta_\nu(x), \Pi_{\nu'}(x')] = i\delta_{\nu\nu'} \delta(x - x') \quad (2.13)$$

を満たす。すなわち、 Π_ν は θ_ν に共役な運動量である。式 (2.12) において、 $N \times N$ の行列 K と V は以下のように与えられる。

$$(K^{-1})_{\nu\nu'} = 2\pi v_{F\nu} \delta_{\nu\nu'} \quad (2.14)$$

$$V_{\nu\nu'} = \frac{v_{F\nu}}{2\pi} \delta_{\nu\nu'} + \frac{\bar{V}(0)}{2\pi^2} = \frac{v_{F\nu}}{2\pi} \delta_{\nu\nu'} + g \quad (2.15)$$

すなわち、バンド構造 I では、

$$K = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\pi v_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\pi v_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

$$V = \begin{pmatrix} \frac{v_1}{2\pi} + g & g & g & g \\ g & \frac{v_2}{2\pi} + g & g & g \\ g & g & \frac{v_1}{2\pi} + g & g \\ g & g & g & \frac{v_2}{2\pi} + g \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

一方、バンド構造 II では、

$$K = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\pi v_1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\pi v_2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

$$V = \begin{pmatrix} \frac{v_1}{2\pi} + g & g & g & g & g & g \\ g & \frac{v_2}{2\pi} + g & g & g & g & g \\ g & g & \frac{v_2}{2\pi} + g & g & g & g \\ g & g & g & \frac{v_1}{2\pi} + g & g & g \\ g & g & g & g & \frac{v_2}{2\pi} + g & g \\ g & g & g & g & g & \frac{v_2}{2\pi} + g \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

一方、電子場の演算子 $\psi_{p,\nu}(x)$ はこの位相変数を用いて、

$$\psi_{p,\nu}(x) = \frac{\eta_{p,\nu}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp \left\{ i \frac{p}{\sqrt{2}} [\theta_\nu(x) + p\phi_\nu(x)] \right\} \quad (2.20)$$

と書ける。ここで、 $\eta_{p,\nu}$ は $\eta_{p,\nu}^\dagger = \eta_{p,\nu}$ および $\{\eta_{p,\nu}, \eta_{p',\nu'}\} = 2\delta_{pp'}\delta_{\nu\nu'}$ を満たすマヨラナフェルミオン演算子である。また、 α は格子間隔程度の微小量であり、その逆数は波数のカットオフを表す。

最後にハミルトニアンに対角化を行う。位相変数の運動方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{\Pi} = V \frac{\partial^2}{\partial x^2} \boldsymbol{\theta} \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\theta} = K^{-1} \mathbf{\Pi} \quad (2.22)$$

で与えられる。ここで、 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_N)^T$ 、 $\mathbf{\Pi} = (\Pi_1, \dots, \Pi_N)^T$ である。これを用いるとエネルギー固有値 $\omega = \tilde{v}|q|$ と対応する固有ベクトル \mathbf{X} は以下の固有値方程式によって決定される。

$$(\tilde{v}^2 K - V) \mathbf{X} = 0 \quad (2.23)$$

以下ではその解を \tilde{v}_j と \mathbf{X}_j ($j = 1, \dots, N$) とする。なお固有ベクトルの規格化条件は $(\mathbf{X}_i, K \mathbf{X}_j) = \delta_{ij}$ である。

上で得られた固有ベクトルを用いて、 $N \times N$ 行列 X を

$$X = (\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_N) \quad (2.24)$$

と定義する。この行列は $X^T K X = 1_N$ を満たす。行列 X および KX を用いて以下のとおり新たな変数 $\Theta_j(x)$ 、 $\Xi_j(x)$ を定義する。

$$\theta_\nu(x) = \sum_{j=1}^N X_{\nu j} \Theta_j(x) \quad (2.25)$$

$$\Pi_\nu(x) = \sum_{j=1}^N (KX)_{\nu j} \Xi_j(x) \quad (2.26)$$

この変数は、交換関係 $[\Theta_j(x), \Xi_{j'}(x')] = i\delta_{jj'}\delta(x-x')$ を満たす。この変数を用いると、ハミルトニアンは以下のように対角化される。

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \int dx \left\{ \Xi_j^2 + \tilde{v}_j^2 (\partial_x \Theta_j)^2 \right\} \quad (2.27)$$

一方、電子場の演算子 $\psi_{p,\nu}(x)$ は以下のように表される。

$$\psi_{p,\nu}(x, t) = \frac{\eta_{p,\nu}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp \left[i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j=1}^N \left(X_{\nu j} \Theta_j(x, t) + p(KX)_{\nu j} \Phi_j(x, t) \right) \right] \quad (2.28)$$

ここで、

$$\phi_\nu(x) = \sum_{j=1}^N (KX)_{\nu j} \Phi_j(x) \quad (2.29)$$

である。後の計算に役立つようモード展開 [44] を行う。 $[b_j(q), b_{j'}^\dagger(q')] = \delta_{jj'} \delta_{qq'}$ を満たすボゾンの生成消滅演算子 $b_j^\dagger(q)$, $b_j(q)$ を用いて、ハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \sum_q \tilde{v}_j |q| b_j^\dagger(q) b_j(q) \quad (2.30)$$

この時、

$$\Theta_j(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_q \left(b_j(q) e^{iqx - i\tilde{v}_j |q| t} + b_j^\dagger(q) e^{-iqx + i\tilde{v}_j |q| t} \right) \sqrt{\frac{1}{2\tilde{v}_j |q|}} \quad (2.31)$$

$$\Xi_j(x, t) = -\frac{i}{\sqrt{L}} \sum_q \left(b_j(q) e^{iqx - i\tilde{v}_j |q| t} - b_j^\dagger(q) e^{-iqx + i\tilde{v}_j |q| t} \right) \sqrt{\frac{\tilde{v}_j |q|}{2}} \quad (2.32)$$

$$\Phi_j(x, t) = \frac{2\pi}{\sqrt{L}} \sum_q \frac{1}{q} \left(b_j(q) e^{iqx - i\tilde{v}_j |q| t} + b_j^\dagger(q) e^{-iqx + i\tilde{v}_j |q| t} \right) \sqrt{\frac{\tilde{v}_j |q|}{2}} \quad (2.33)$$

である。

以下に、バンド構造 I と II について、式 (2.23) の解と $N \times N$ 行列 X および KX をまとめておく。バンド構造 I では、

$$\mathbf{X}_1 = \sqrt{\pi v_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_1 = v_1 \quad (2.34)$$

$$\mathbf{X}_2 = \sqrt{\pi v_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_2 = v_2 \quad (2.35)$$

$$\mathbf{X}_3 = \frac{1}{\sqrt{Z_+}} \begin{pmatrix} B_+ \\ A_+ \\ B_+ \\ A_+ \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_3 = v_+ \quad (2.36)$$

$$\mathbf{X}_4 = \frac{1}{\sqrt{Z_-}} \begin{pmatrix} B_- \\ A_- \\ B_- \\ A_- \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_4 = v_- \quad (2.37)$$

と得られる。ここで、

$$\tilde{v}_{\pm}^2 = \frac{v_1^2 + v_2^2 + 4\pi g(v_1 + v_2) \pm \sqrt{D}}{2} \quad (2.38)$$

$$D = (v_1^2 - v_2^2)\{v_1^2 - v_2^2 + 8\pi g(v_1 - v_2)\} + 16\pi^2 g^2 (v_1 + v_2)^2 \quad (2.39)$$

$$Z_{\pm} = \frac{B_{\pm}^2}{\pi v_1} + \frac{A_{\pm}^2}{\pi v_2} \quad (2.40)$$

$$A_{\pm} = \frac{v_{\pm}^2 - v_1^2}{2\pi v_1} \quad (2.41)$$

$$B_{\pm} = \frac{v_{\pm}^2 - v_2^2}{2\pi v_2} \quad (2.42)$$

である。この結果から、 $\tilde{v}_1 = v_1$ および $\tilde{v}_2 = v_2$ はそれぞれバンド1、バンド2のスピン励起を表していることがわかる。一方、2つの電荷励起の速度はそれぞれ v_+ と v_- である。上記の結果を用いると、 4×4 行列 X と KX は以下のように与えられる。

$$X = \begin{pmatrix} \sqrt{\pi v_1} & 0 & \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & \sqrt{\pi v_2} & \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ -\sqrt{\pi v_1} & 0 & \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & -\sqrt{\pi v_2} & \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

$$KX = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\pi v_1} \sqrt{\pi v_1} & 0 & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\pi v_2} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ -\frac{1}{2\pi v_1} \sqrt{\pi v_1} & 0 & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & -\frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\pi v_2} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

一方、バンド構造 II では、励起の速度 \tilde{v}_j と対応する固有ベクトル \mathbf{X}_j は以下のように得られる。

$$\mathbf{X}_1 = \sqrt{\pi v_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_1 = v_1 \quad (2.45)$$

$$\mathbf{X}_2 = \sqrt{\pi v_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_2 = v_2 \quad (2.46)$$

$$\mathbf{X}_3 = \sqrt{\pi v_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_3 = v_2 \quad (2.47)$$

$$\mathbf{X}_4 = \sqrt{\pi v_2} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_4 = v_2 \quad (2.48)$$

$$\mathbf{X}_5 = \frac{1}{\sqrt{Z_+}} \begin{pmatrix} B_+ \\ A_+ \\ A_+ \\ B_+ \\ A_+ \\ A_+ \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_5 = v_+ \quad (2.49)$$

$$\mathbf{X}_6 = \frac{1}{\sqrt{Z_-}} \begin{pmatrix} B_- \\ A_- \\ A_- \\ B_- \\ A_- \\ A_- \end{pmatrix} \cdots \tilde{v}_6 = v_- \quad (2.50)$$

ここで、

$$\tilde{v}_\pm^2 = \frac{v_1^2 + v_2^2 + 4\pi g(v_1 + 2v_2) \pm \sqrt{D}}{2} \quad (2.51)$$

$$D = (v_1^2 - v_2^2) \left\{ v_1^2 - v_2^2 + 8\pi g(v_1 - 2v_2) \right\} + 16\pi^2 g^2 (v_1 + 2v_2)^2 \quad (2.52)$$

$$Z_{\pm} = \frac{B_{\pm}^2}{\pi v_1} + \frac{2A_{\pm}^2}{\pi v_2} \quad (2.53)$$

$$A_{\pm} = \frac{v_{\pm}^2 - v_1^2}{2\pi v_1} \quad (2.54)$$

$$B_{\pm} = \frac{v_{\pm}^2 - v_2^2}{2\pi v_2} \quad (2.55)$$

である。 $\tilde{v}_1 = v_1$ 、 $\tilde{v}_2 = v_2$ 、 $\tilde{v}_3 = v_2$ はそれぞれ、バンド1、バンド2、バンド3のスピ
ン励起の速度である。一方、 $\tilde{v}_4 = v_2$ 、 $\tilde{v}_5 = v_+$ 、 $\tilde{v}_6 = v_-$ は電荷励起の速度である。こ
の結果を用いると、 6×6 行列 X と KX は

$$X = \begin{pmatrix} \sqrt{\pi v_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & \sqrt{\pi v_2} & 0 & \sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\pi v_2} & -\sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ -\sqrt{\pi v_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & -\sqrt{\pi v_2} & 0 & \sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & 0 & -\sqrt{\pi v_2} & -\sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

$$KX = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\pi v_1} \sqrt{\pi v_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\pi v_2} & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\pi v_2} & -\frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ -\frac{1}{2\pi v_1} \sqrt{\pi v_1} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_1} \frac{B_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & -\frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\pi v_2} & 0 & \frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\pi v_2} & -\frac{1}{2\pi v_2} \sqrt{\frac{\pi v_2}{2}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_+}{\sqrt{Z_+}} & \frac{1}{2\pi v_2} \frac{A_-}{\sqrt{Z_-}} \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

である。

このボソン化法をカーボンナノチューブに適用するには、バンド構造 I において
 $v_1 = v_2 = v_0$ ($v_0 \sim 8.0 \times 10^5 \text{m/s}$ はカーボンナノチューブのフェルミ速度) とすれば
よい。その場合、 $\tilde{v}_1 = \tilde{v}_2 = \tilde{v}_4 = v_0$ 、 $\tilde{v}_3 = v_+ = v_0 \sqrt{1 + 4V(0)/(\pi v_0)}$ となる。このよ
うに、バンド構造 I では4つの低エネルギー励起が全て異なる速度を持つが、カーボンナ
ノチューブでは4つの励起のうち3つが縮退する。一方、バンド構造 II では6つの低エ
ネルギー励起が存在し、カーボンナノチューブとは異なる。このように、フラーレンポリ
マーとカーボンナノチューブは同じ炭素原子のみから成る一次元伝導体であるにもかかわ

らず、励起状態の性質が異なる。これは、凸凹構造に伴う有効ポテンシャルの効果と捉えることができる。

なお、ここで紹介したボソン化法は周期的境界条件に基づいており、参考文献 [42] で用いられたものとは異なる。本節のボソン化法では、次節で紹介する状態密度の空間依存性を議論できず、バルクの位置の状態密度が得られるだけである。ただし、この手法を用いなければスペクトル関数を得ることはできない。

2.2 状態密度

本節では、参考文献 [42] で行われた実験的に観測されたフラレンポリマーの状態密度の冪指数を定量的に記述する理論研究について紹介する。 ν 番目のバンドの位置 x での局所状態密度は

$$D_\nu(\omega, T, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \{\psi_\nu^\dagger(x, 0), \psi_\nu(x, t)\} \rangle \quad (2.58)$$

で与えられ、全体の局所状態密度 (LDOS) は各バンドの値の和で

$$D(\omega, T, x) = \sum_{\nu=1}^N D_\nu(\omega, T, x) \quad (2.59)$$

となる。先に述べたように、前節で導入したボソン化法を用いると位置依存性は得られないため、以下では位置 x を落とす。 ν 番目のバンドの状態密度は以下のとおり計算される。

$$D_\nu(\omega, T) = \frac{2}{\pi^2 \alpha} \prod_{j=1}^N \left(\frac{\alpha}{\tilde{v}_j} \right)^{Y_{\nu j}} \cos \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_{\nu j} \right) \times \int_0^\infty \frac{dt}{t^{\sum_{j=1}^N Y_{\nu j}}} \left\{ \cos \omega t \left(\frac{\pi T t}{\sinh \pi T t} \right)^{\sum_{j=1}^N Y_{\nu j}} - 1 \right\} \quad (2.60)$$

ここで、 T は絶対温度を表す。この式は、 $T = 0$ において、

$$D_\nu(\omega, 0) = \frac{1}{\pi \alpha} \prod_{j=1}^N \left(\frac{\alpha}{\tilde{v}_j} \right)^{Y_{\nu j}} \frac{1}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_{\nu j})} \omega^{\sum_{j=1}^N Y_{\nu j} - 1} \quad (2.61)$$

となる。ここで、 $\Gamma(z)$ はガンマ関数である。一方、 $\omega = 0$ において

$$D_\nu(0, T) = \frac{1}{\pi^2 \alpha} \prod_{j=1}^N \left(\frac{\alpha}{\tilde{v}_j} \right)^{Y_{\nu j}} \frac{\left\{ \Gamma(\sum_{j=1}^N Y_{\nu j} / 2) \right\}^2}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_{\nu j})} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_{\nu j} - 1} \quad (2.62)$$

となる。これらの式において、

$$Y_{\nu j} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{\nu j})^2}{2\pi\tilde{v}_j} + 2\pi\tilde{v}_j[(KX)_{\nu j}]^2 \right\} \quad (2.63)$$

である。したがって、 ν 番目のバンドの状態密度に現れる冪指数 $\lambda(\nu)$ は、

$$\lambda(\nu) = \sum_{j=1}^N Y_{\nu j} - 1 \quad (2.64)$$

で与えられる。具体的な値として、バンド構造 I では、

$$\lambda(1) = \lambda(3) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2\pi v_+} \frac{B_+^2}{Z_+} \left[1 + \left(\frac{v_+}{v_1} \right)^2 \right] + \frac{1}{2\pi v_-} \frac{B_-^2}{Z_-} \left[1 + \left(\frac{v_-}{v_1} \right)^2 \right] \right\} - \frac{1}{2} \quad (2.65)$$

$$\lambda(2) = \lambda(4) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2\pi v_+} \frac{A_+^2}{Z_+} \left[1 + \left(\frac{v_+}{v_2} \right)^2 \right] + \frac{1}{2\pi v_-} \frac{A_-^2}{Z_-} \left[1 + \left(\frac{v_-}{v_2} \right)^2 \right] \right\} - \frac{1}{2} \quad (2.66)$$

バンド構造 II では、

$$\lambda(1) = \lambda(4) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2\pi v_+} \frac{B_+^2}{Z_+} \left[1 + \left(\frac{v_+}{v_1} \right)^2 \right] + \frac{1}{2\pi v_-} \frac{B_-^2}{Z_-} \left[1 + \left(\frac{v_-}{v_1} \right)^2 \right] \right\} - \frac{1}{2} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} \lambda(2) = \lambda(3) = \lambda(5) = \lambda(6) \\ = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2\pi v_+} \frac{A_+^2}{Z_+} \left[1 + \left(\frac{v_+}{v_2} \right)^2 \right] + \frac{1}{2\pi v_-} \frac{A_-^2}{Z_-} \left[1 + \left(\frac{v_-}{v_2} \right)^2 \right] \right\} - \frac{1}{4} \end{aligned} \quad (2.68)$$

である。

相互作用の値 $\bar{V}(0)/(\pi v_0) = 7.47$ を用いた数値計算の結果を図 2.2-2.5 に記す。この相互作用の値は、カーボンナノチューブで得られた実験値を再現する。これらの図の $D^{(b)}(\omega, T)$ が式 (2.59) の $D(\omega, T)$ となっている。一方、 $D^{(e)}(\omega, T)$ は試料の端の状態密度であるが、前節で紹介したボソン化法では得られないので、以下の議論では除く。ここで、バンド構造 I の $D(\omega, T=0)$ が図 2.2、 $D(\omega=0, T)$ が図 2.4、バンド構造 II の $D(\omega, T=0)$ が図 2.3、 $D(\omega=0, T)$ が図 2.5 とを表している。各図の (b) は (a) を両対数でプロットしたものである。青の実線はカーボンナノチューブの結果である。両バンド構造ともに、TLL 状態の特徴である状態密度のエネルギー ω および温度 T の冪関数となっている。また、その冪の値は 2 つの異なったフェルミ速度が存在することに対応して 2 種類現れ、エネルギーまたは温度の関数としてクロスオーバーする。 $\bar{V}(0)/(\pi v_0) = 7.47$ の場合の値は以下の通りとなっている。バンド構造 I では、低エネルギー（温度）領域で $\lambda = \lambda(1) \simeq 0.568$ 、高エネルギー（温度）領域で $\lambda = \lambda(2) \simeq 0.645$ である。一方、バンド構造 II では、低エネルギー（温度）領域で $\lambda = \lambda(1) \simeq 0.542$ 、高エネルギー（温度）領域で $\lambda = \lambda(2) \simeq 0.687$ である。これらの値は、カーボンナノチューブで観測された指

数である約 0.46 よりも大きな値であり、参考文献 [36] による光電子分光実験の結果を定量的に記述することができている。実験的には指数のクロスオーバーは観測されていないが、エネルギー分解能の向上や解析方法の変更により今後観測される可能性はある。

このような結果から、状態密度ではバンド構造 I と II の違いは指数の定量的な違いとして現れることがわかる。しかしながら、この差異は光電子分光実験の誤差の範囲であるため、光電子分光実験で得られる状態密度によって FP6L と FP5N のどちらが実現しているかを同定するのは難しいと考えられる。

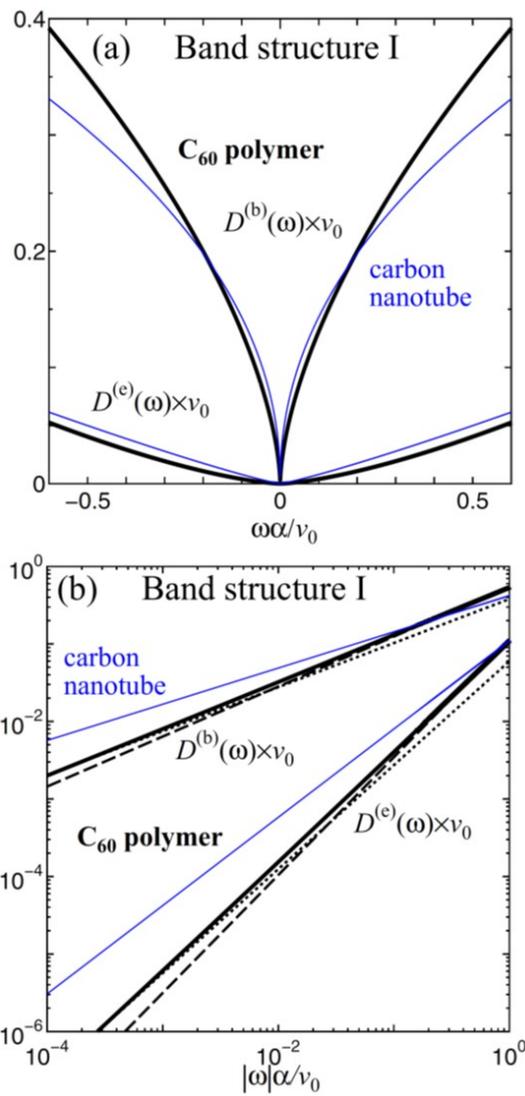


図 2.2 バンド構造 I の $T = 0$ での状態密度のエネルギー ω 依存性。青線はカーボンナノチューブを表す。(a) は線形プロット、(b) は両対数プロットである。(b) において、点線および破線は低エネルギーおよび高エネルギーの冪の値を用いたフィッティングである。参考文献 [42] より引用。

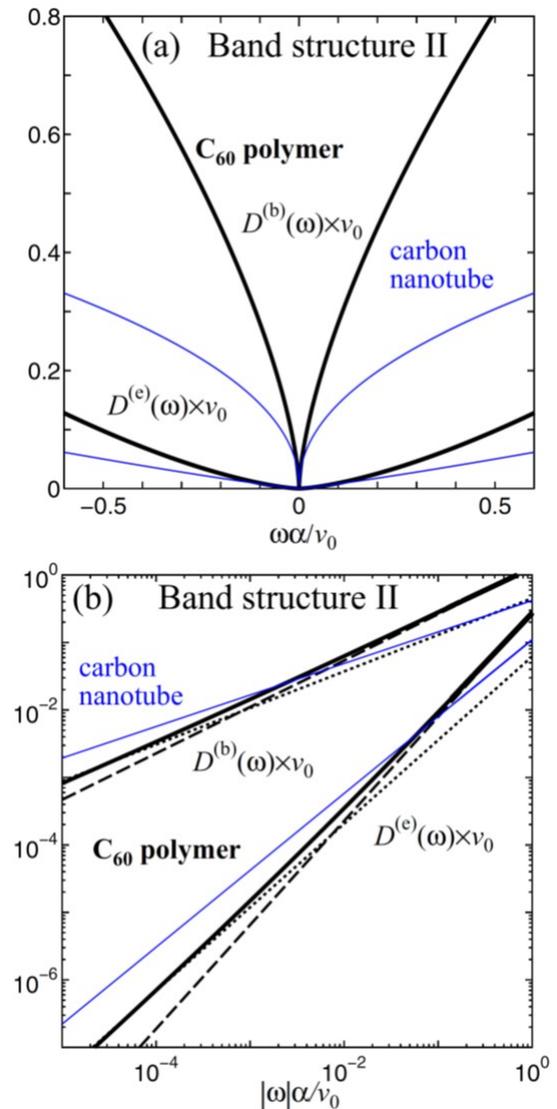


図 2.3 バンド構造 II の $T = 0$ での状態密度のエネルギー ω 依存性。青線はカーボンナノチューブを表す。(a) は線形プロット、(b) は両対数プロットである。(b) において、点線および破線は低エネルギーおよび高エネルギーの冪の値を用いたフィッティングである。参考文献 [42] より引用。

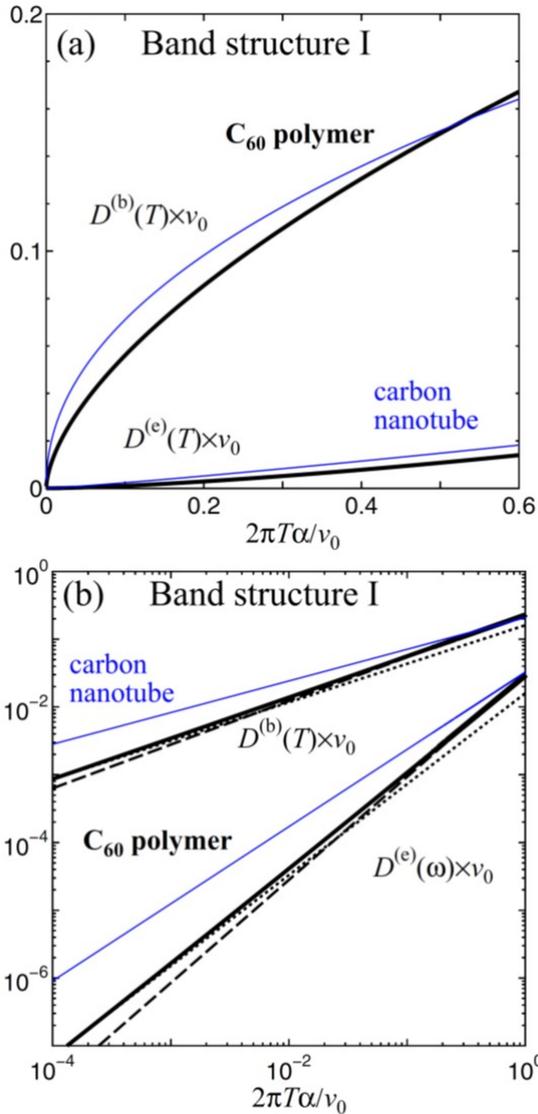


図 2.4 バンド構造 I の $\omega = 0$ での状態密度の温度 T 依存性。青線はカーボンナノチューブを表す。(a) は線形プロット、(b) は両対数プロットである。(b) において、点線および破線は低温および高温の冪の値を用いたフィッティングである。参考文献 [42] より引用。

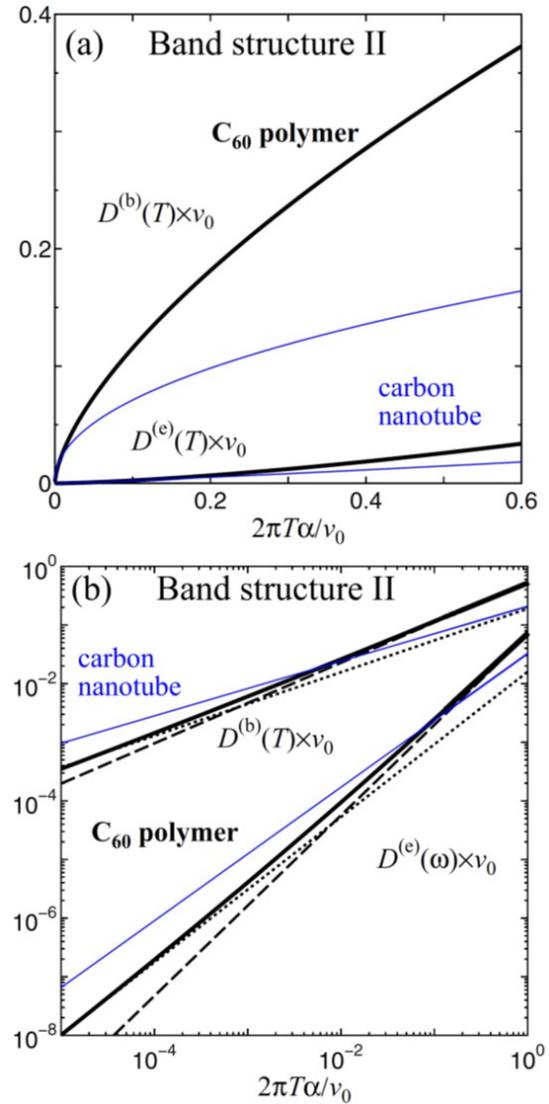


図 2.5 バンド構造 II の $\omega = 0$ での状態密度の温度 T 依存性。青線はカーボンナノチューブを表す。(a) は線形プロット、(b) は両対数プロットである。(b) において、点線および破線は低温および高温の冪の値を用いたフィッティングである。参考文献 [42] より引用。

第3章

スペクトル関数

本章では、前章で導入したフラレンポリマーのボソン化理論を用いて、スペクトル関数を議論する [45]。まず、バンド構造 I およびバンド構造 II に対して解析的計算によりスペクトル関数の具体的な式を導出する。その後、得られた式の数値計算を行い、両バンド構造のスペクトル関数の比較・検討を行う。また、カーボンナノチューブとの比較も行う。

3.1 解析的な計算

本章の計算では、上向きスピンのスペクトル関数 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ を取り扱う。 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ は以下の式によって定義される。

$$A_{\uparrow}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int dx \int dt e^{-i(kx - \omega t)} G_{\uparrow}^R(x, t) \quad (3.1)$$

ここで、 $G_{\uparrow}^R(x, t)$ は上向きスピンの電子の遅延グリーン関数であり

$$G_{\uparrow}^R(x, t) = -i\theta(t) \langle \{\psi_{\uparrow}(x, t), \psi_{\uparrow}^{\dagger}(0, 0)\} \rangle \quad (3.2)$$

で与えられる。もちろん、 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ はハミルトニアンのスピン空間の回転対称性のため下向きスピンのスペクトル関数 $A_{\downarrow}(k, \omega)$ に等しい。

遅延グリーン関数 $G_{\uparrow}^R(x, t)$ は、バンド構造 I については式 (2.3) を用いると、

$$G_{\uparrow}^R(x, t) = \left\{ G_{+,1}^R(x, t) + G_{-,2}^R(x, t) \right\} e^{iK_0 x} + \left\{ G_{-,1}^R(x, t) + G_{+,2}^R(x, t) \right\} e^{-iK_0 x} \quad (3.3)$$

と表され、バンド構造 II については式 (2.5) を用いて、

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}^R(x, t) = & G_{+,1}^R(x, t) e^{iK_1 x} + \left(G_{-,2}^R(x, t) + G_{-,3}^R(x, t) \right) e^{iK_2 x} \\ & + G_{-,1}^R(x, t) e^{-iK_1 x} + \left(G_{+,2}^R(x, t) + G_{+,3}^R(x, t) \right) e^{-iK_2 x} \end{aligned} \quad (3.4)$$

と表される。ここで、 $G_{p,\nu}^R(x,t)$ はゆるやかに変化する場の演算子 $\psi_{p,\nu}(x,t)$ の遅延グリーン関数で、

$$G_{p,\nu}^R(x,t) = -i\theta(t)\langle\{\psi_{p,\nu}(x,t), \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0)\}\rangle \quad (3.5)$$

である。付録 B.1 に示したように、 $G_{p,\nu}^R(x,t)$ は以下のように計算される。

$$G_{p,\nu}^R(x,t) = -i\theta(t)\left(F_{p,\nu}(x,t) + F_{p,\nu}(-x,-t)\right) \quad (3.6)$$

ここで、

$$F_{p,\nu}(x,t) = \frac{1}{2\pi\alpha} \prod_{j=1}^N [W_j(x,t)]^{A_{\nu,j}(p)} [W_j(-x,t)]^{A_{\nu,j}(-p)} \quad (3.7)$$

$$W_j(x,t) = \left[\left(1 - i\frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha}\right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x - \tilde{v}_j t)} \sinh\left(\pi \frac{x - \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)}\right) \right]^{-1} \quad (3.8)$$

$$A_{\nu,j}(p) = \frac{1}{8\pi\tilde{v}_j} \left(X_{\nu j} + 2\pi p(KX)_{\nu j}\tilde{v}_j\right)^2 \quad (3.9)$$

$$\xi_j(T) = \frac{\tilde{v}_j}{T} \quad (3.10)$$

である。この表式から、 $F_{p,\nu}(x,t)$ と $F_{p,\nu}(-x,-t)$ は複素共役の関係であることがわかる。以下に、バンド構造 I とバンド構造 II の指数 $A_{\nu,j}(p)$ と関数 $F_{p,\nu}(x,t)$ をまとめておく。バンド構造 I では、指数は

$$A_{11}(p) = A_{31}(p) = A_{22}(p) = A_{42}(p) = \frac{(1+p)^2}{8} \quad (3.11)$$

$$A_{21}(p) = A_{41}(p) = A_{12}(p) = A_{32}(p) = 0 \quad (3.12)$$

$$A_{13}(p) = A_{33}(p) = \frac{1}{8\pi v_+} \left(1 + p\frac{v_+}{v_1}\right)^2 \frac{B_+^2}{Z_+} \quad (3.13)$$

$$A_{23}(p) = A_{43}(p) = \frac{1}{8\pi v_+} \left(1 + p\frac{v_+}{v_2}\right)^2 \frac{A_+^2}{Z_+} \quad (3.14)$$

$$A_{14}(p) = A_{34}(p) = \frac{1}{8\pi v_-} \left(1 + p\frac{v_-}{v_1}\right)^2 \frac{B_-^2}{Z_-} \quad (3.15)$$

$$A_{24}(p) = A_{44}(p) = \frac{1}{8\pi v_-} \left(1 + p\frac{v_-}{v_2}\right)^2 \frac{A_-^2}{Z_-} \quad (3.16)$$

となり、式 (3.7) の $F_{p,\nu}(x, t)$ は

$$F_{+,1}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_1^{1/2}(x, t) W_3^{A_{13}(+)}(x, t) W_3^{A_{13}(-)}(-x, t) \\ \times W_4^{A_{14}(+)}(x, t) W_4^{A_{14}(-)}(-x, t) \quad (3.17)$$

$$F_{-,1}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_1^{1/2}(-x, t) W_3^{A_{13}(-)}(x, t) W_3^{A_{13}(+)}(-x, t) \\ \times W_4^{A_{14}(-)}(x, t) W_4^{A_{14}(+)}(-x, t) \quad (3.18)$$

$$F_{+,2}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_2^{1/2}(x, t) W_3^{A_{23}(+)}(x, t) W_3^{A_{23}(-)}(-x, t) \\ \times W_4^{A_{24}(+)}(x, t) W_4^{A_{24}(-)}(-x, t) \quad (3.19)$$

$$F_{-,2}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_2^{1/2}(-x, t) W_3^{A_{23}(-)}(x, t) W_3^{A_{23}(+)}(-x, t) \\ \times W_4^{A_{24}(-)}(x, t) W_4^{A_{24}(+)}(-x, t) \quad (3.20)$$

で与えられる。一方、バンド構造 II の指数 $A_{\nu,j}(p)$ と関数 $F_{p,\nu}(x, t)$ は以下のように与えられる。

$$A_{11}(p) = A_{41}(p) = A_{22}(p) = A_{52}(p) \\ = A_{33}(p) = A_{63}(p) = \frac{(1+p)^2}{8} \quad (3.21)$$

$$A_{12}(p) = A_{13}(p) = A_{14}(p) = A_{21}(p) = A_{23}(p) = A_{31}(p) \\ = A_{32}(p) = A_{42}(p) = A_{43}(p) = A_{44}(p) = A_{51}(p) \\ = A_{53}(p) = A_{61}(p) = A_{62}(p) = 0 \quad (3.22)$$

$$A_{24}(p) = A_{34}(p) = A_{54}(p) = A_{64}(p) = \frac{(1+p)^2}{16} \quad (3.23)$$

$$A_{15}(p) = A_{45}(p) = \frac{1}{8\pi v_+} \left(1 + p \frac{v_+}{v_1}\right)^2 \frac{B_+^2}{Z_+} \quad (3.24)$$

$$A_{25}(p) = A_{35}(p) = A_{55}(p) = A_{65}(p) = \frac{1}{8\pi v_+} \left(1 + p \frac{v_+}{v_2}\right)^2 \frac{A_+^2}{Z_+} \quad (3.25)$$

$$A_{16}(p) = A_{46}(p) = \frac{1}{8\pi v_-} \left(1 + p \frac{v_-}{v_1}\right)^2 \frac{B_-^2}{Z_-} \quad (3.26)$$

$$A_{26}(p) = A_{36}(p) = A_{56}(p) = A_{66}(p) = \frac{1}{8\pi v_-} \left(1 + p \frac{v_-}{v_2}\right)^2 \frac{A_-^2}{Z_-} \quad (3.27)$$

$$F_{+,1}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_1^{1/2}(x, t) W_5^{A_{15}(+)}(x, t) W_5^{A_{15}(-)}(-x, t) \\ \times W_6^{A_{16}(+)}(x, t) W_6^{A_{16}(-)}(-x, t) \quad (3.28)$$

$$F_{-,1}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_1^{1/2}(-x, t) W_5^{A_{15}(-)}(x, t) W_5^{A_{15}(+)}(-x, t) \\ \times W_6^{A_{16}(-)}(x, t) W_6^{A_{16}(+)}(-x, t) \quad (3.29)$$

$$F_{+,2}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_2^{3/4}(x, t) W_5^{A_{25}(+)}(x, t) W_5^{A_{25}(-)}(-x, t) \\ \times W_6^{A_{26}(+)}(x, t) W_6^{A_{26}(-)}(-x, t) \quad (3.30)$$

$$F_{-,2}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_2^{3/4}(-x, t) W_5^{A_{25}(-)}(x, t) W_5^{A_{25}(+)}(-x, t) \\ \times W_6^{A_{26}(-)}(x, t) W_6^{A_{26}(+)}(-x, t) \quad (3.31)$$

$$F_{+,3}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_2^{3/4}(x, t) W_5^{A_{35}(+)}(x, t) W_5^{A_{35}(-)}(-x, t) \\ \times W_6^{A_{36}(+)}(x, t) W_6^{A_{36}(-)}(-x, t) \quad (3.32)$$

$$F_{-,3}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} W_2^{3/4}(-x, t) W_5^{A_{35}(-)}(x, t) W_5^{A_{35}(+)}(-x, t) \\ \times W_6^{A_{36}(-)}(x, t) W_6^{A_{36}(+)}(-x, t) \quad (3.33)$$

これらの結果を用いると、バンド構造 I の上向きスピンを持つ電子のスペクトル関数 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ は

$$A_{\uparrow}(k, \omega) = \begin{cases} A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega) & \cdots k \sim K_0 \\ A_{-,1}(k + K_0, \omega) + A_{+,2}(k + K_0, -\omega) & \cdots k \sim -K_0 \end{cases} \quad (3.34)$$

で与えられる。このとき、フェルミ速度が v_1 のバンドからの寄与が $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ 、 $-v_2$ のバンドからの寄与が $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ 、 $-v_1$ のバンドからの寄与が $A_{-,1}(k + K_0, \omega)$ 、 v_2 のバンドからの寄与が $A_{+,2}(k + K_0, -\omega)$ であり、

$$A_{+,1}(q, \omega) = I_{+,1}(q, \omega) + I_{+,1}(-q, -\omega) \quad (3.35)$$

$$A_{-,2}(q, \omega) = I_{-,2}(q, \omega) + I_{-,2}(-q, -\omega) \quad (3.36)$$

$$A_{-,1}(q, \omega) = I_{-,1}(q, \omega) + I_{-,1}(-q, -\omega) \quad (3.37)$$

$$A_{+,2}(q, \omega) = I_{+,2}(q, \omega) + I_{+,2}(-q, -\omega) \quad (3.38)$$

と表される。ここで、 $I_{p,\nu}(k, \omega)$ は $F_{p,\nu}(x, t)$ のフーリエ変換

$$I_{p,\nu}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega t - kx)} F_{p,\nu}(x, t) \quad (3.39)$$

である。バンド構造 II では、 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ は

$$A_{\uparrow}(k, \omega) = \begin{cases} A_{+,1}(k - K_1, \omega) + A_{-,2}(k - K_2, \omega) + A_{-,3}(k - K_2, \omega) & \cdots k \sim K_1, K_2 \\ A_{-,1}(k + K_1, \omega) + A_{+,2}(k + K_2, \omega) + A_{+,3}(k + K_2, -\omega) & \cdots k \sim -K_1, -K_2 \end{cases} \quad (3.40)$$

で与えられる。このとき、フェルミ速度が v_1 のバンドからの寄与が $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、 $-v_2$ のバンドからの寄与が $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ と $A_{-,3}(k - K_2, \omega)$ 、 $-v_1$ のバンドからの寄与が $A_{-,1}(k + K_1, \omega)$ 、 v_2 のバンドからの寄与が $A_{+,2}(k + K_2, -\omega)$ と $A_{+,3}(k + K_2, \omega)$ であり、

$$A_{+,1}(q, \omega) = I_{+,1}(q, \omega) + I_{+,1}(-q, -\omega) \quad (3.41)$$

$$A_{-,2}(q, \omega) = I_{-,2}(q, \omega) + I_{-,2}(-q, -\omega) \quad (3.42)$$

$$A_{-,3}(q, \omega) = I_{-,3}(q, \omega) + I_{-,3}(-q, -\omega) \quad (3.43)$$

$$A_{-,1}(q, \omega) = I_{-,1}(q, \omega) + I_{-,1}(-q, -\omega) \quad (3.44)$$

$$A_{+,2}(q, \omega) = I_{+,2}(q, \omega) + I_{+,2}(-q, -\omega) \quad (3.45)$$

$$A_{+,3}(q, \omega) = I_{+,3}(q, \omega) + I_{+,3}(-q, -\omega) \quad (3.46)$$

と表される。なお、バンド構造 II について、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = A_{-,3}(k - K_2, \omega)$ 、 $A_{+,2}(k + K_2, \omega) = A_{+,3}(k + K_2, \omega)$ が成り立つ。

3.2 スペクトル関数の数値解析

以下の数値計算では、相互作用の行列要素を CNT の光電子分光実験の結果 [21] を再現するように、CNT のフェルミ速度 $v_0 \simeq 8.0 \times 10^5 \text{ m/s}$ を用いて $\bar{V}(0)/(\pi v_0) = 7.47$ とする。

まず、バンド構造 I の場合について述べる。フェルミ波数は $K_0\alpha = 1.0$ と定める。相互作用パラメーターを上のように定めたことから、集団励起の速度はそれぞれ $\tilde{v}_1/v_0 = v_1/v_0 = 0.851$ 、 $\tilde{v}_2/v_0 = v_2/v_0 = 0.530$ 、 $\tilde{v}_3/v_0 = v_+/v_0 = 4.60$ 、 $\tilde{v}_4/v_0 = v_-/v_0 = 0.670$ となる。すなわち、 $v_2 < v_- < v_1 < v_+$ を満たしている。外部の波数を $k\alpha = 1.25$ ($k > K_0$)、無次元化した温度 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ とした場合のスペクトル関数 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ は、図 3.1 で与えられる。図 3.1 の (a) は $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ を表し、(c) が $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ である。また、図内の矢印は励起エネルギーの位置を示している。この結果は有限温度で計算されたものであるが、十分に温度が低いためその振る舞いは付録 B.2 で計算された $T = 0$ の結果から理解できる。すなわち、(a) の $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ では、 $-v_-(k - K_0) < \omega < v_-(k - K_0)$ の領域でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $\omega = v_1(k - K_0)$ と $\omega = -v_+(k - K_0)$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れている。一方、(b) の $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ では、 $-v_2(k - K_0) < \omega < v_-(k - K_0)$ の領域でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_-(k - K_0)$ と $\omega = -v_+(k - K_0)$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れている。なお、 $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ (図 3.1(a)) は相互作用が無い場合 $A_{+,1}(k - K_0, \omega) = \delta(\omega - v_1(k - K_0))$ である。したがって、 $\omega > 0$ に現れているウェイトはこの $\delta(\omega - v_1(k - K_0))$ が相互作用のために広がったものとみなすことができる。一方、 $\omega < 0$ に現れるウェイトは相互作用によって新たに生み出されたものである。本論文では前者をメイン、後者をシャドウと呼ぶことにする。 $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ (図 3.1(b)) は相互作用が無い場合 $A_{-,2}(k - K_0, \omega) = \delta(\omega + v_2(k - K_0))$ である。したがって、 $\omega < 0$ に現れるウェイトがメイン、 $\omega > 0$ に現れるウェイトがシャドウとなる。 $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ と $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ を足し合わせたものが $A_{\uparrow}(k, \omega)$ (図 3.1(c)) であるが、フェルミ速度が v_1 のバンドからの寄与と $-v_2$ のバンドからの寄与が ω の符号を反転させると同じ程度の大きさとなることから、エネルギー ω に対して比較的対称な形状となっている。

バンド構造 I において外部の波数を $k\alpha = 0.75$ ($K_0 > k$)、無次元化した温度 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ とした場合の結果は図 3.2 となる。(a) が $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ 、(b) が $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ 、(c) が $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ である。この外部の波数はフェルミ波数との差の絶対値が $k\alpha = 1.25$ の場合と同じで、符号が逆であ

る。したがって、得られたスペクトルは $k\alpha = 1.25$ の結果を $\omega = 0$ に対して左右反転させたものとなっている。

次に、バンド構造 II について述べる。フェルミ波数は $K_1\alpha = 0.96$ 、 $K_2\alpha = 1.45$ である。集団励起の速度はそれぞれ $\tilde{v}_1/v_0 = v_1/v_0 = 0.915$ 、 $\tilde{v}_2/v_0 = \tilde{v}_3/v_0 = \tilde{v}_4/v_0 = v_2/v_0 = 0.329$ 、 $\tilde{v}_5/v_0 = v_+/v_0 = 4.91$ 、 $\tilde{v}_6/v_0 = v_-/v_0 = 0.639$ である。以下ではバンド構造 I と同様に、無次元化した温度 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ とする。したがって、得られる結果は有限温度で計算されたものであるが、十分に温度が低いためその振る舞いは付録 B.2 で計算された $T = 0$ の結果から理解できる。外部の波数を $k\alpha = 1.75$ ($k > K_2$) とした場合のスペクトル関数は図 3.3 となる。図 3.3 の (a) は $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を表し、(c) が $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ である。このとき、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = A_{-,3}(k - K_2, \omega)$ であることを用いた。付録 B.2 より、(a) の $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ では $-v_-(k - K_1) < \omega < v_-(k - K_1)$ の範囲でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = v_1(k - K_1)$ 、 $v_+(k - K_1)$ 、 $-v_+(k - K_1)$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れる。一方で、(b) の $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ では $-v_2(k - K_2) < \omega < v_-(k - K_2)$ の範囲でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = v_+(k - K_2)$ 、 $-v_+(k - K_2)$ 、 $-v_-(k - K_2)$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れる。また、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ (図 3.3(a)) は相互作用がない場合、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega) = \delta(\omega - v_1(k - K_1))$ であるため、 $\omega > 0$ でメイン、 $\omega < 0$ でシャドウが現れる。一方で、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ (図 3.3(b)) は相互作用がない場合、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = \delta(\omega + v_2(k - K_2))$ であるため、 $\omega < 0$ でメイン、 $\omega > 0$ でシャドウが現れる。 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ と $2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を足し合わせたものが $A_{\uparrow}(k, \omega)$ (図 3.3(c)) であるが、フェルミ速度 $-v_2$ のバンドが 2 重に縮退していることにより、その寄与が 2 倍となるためエネルギー ω に対して非対称な形状となる。

次に、外部の波数を $k\alpha = 1.30$ ($K_1 < k < K_2$) とした場合のスペクトル関数は図 3.4 となる。図 3.4 の (a) は $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を表し、(c) が $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ である。付録 B.2 より、(a) の $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ では $-v_-(k - K_1) < \omega < v_-(k - K_1)$ の範囲でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = v_1(k - K_1)$ 、 $v_+(k - K_1)$ 、 $-v_+(k - K_1)$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れる。一方で、(b) の $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ では $-v_-|k - K_2| < \omega < v_2|k - K_2|$ の範囲でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = -v_+|k - K_2|$ 、 $v_+|k - K_2|$ 、 $v_-|k - K_2|$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れる。また、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ (図 3.4(a)) は相互作用がない場合、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega) = \delta(\omega - v_1(k - K_1))$ であるため、 $k > K_2$ の場合と同様に $\omega > 0$ でメイン、 $\omega < 0$ でシャドウが現れる。しかしながら、 $k > K_2$ の場合と比べて $|k - K_1|$ の値が小さいため $\omega = v_1(k - K_1)$ と $\omega = v_+(k - K_1)$ 間の距離が狭まり、メインは全体として大きなウェイトとなる。一方で、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ (図 3.4(b))

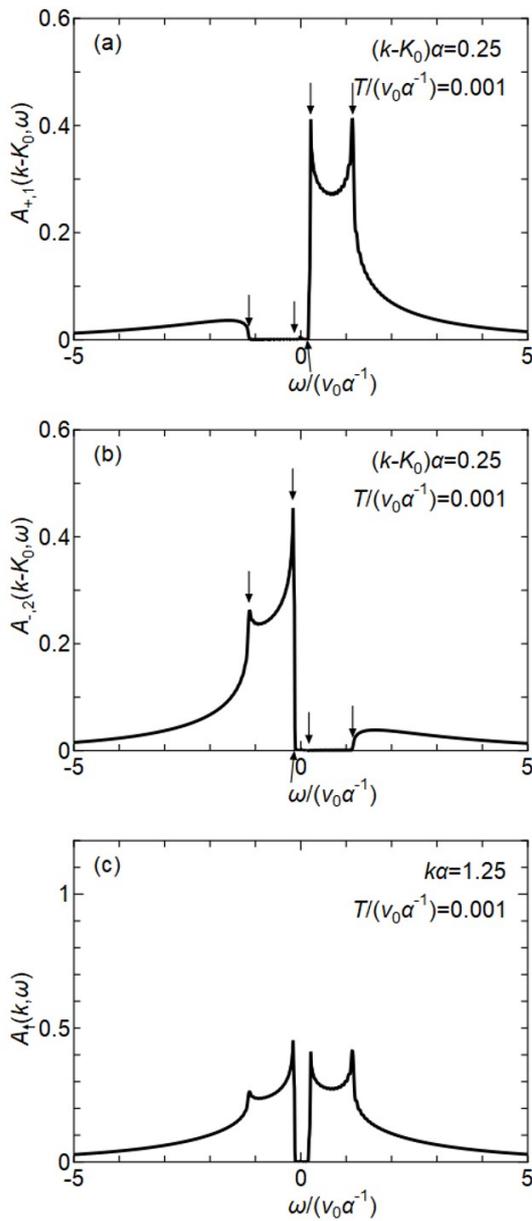


図 3.1 バンド構造 I の $k\alpha = 1.25$ 、 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ の場合のスペクトル関数。(a) は $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ を表し、(c) は $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ である。(a) において、矢印は、右から $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $\omega = v_1(k - K_0)$ 、 $\omega = v_-(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_-(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_0)$ である。一方、(b) において、矢印は、右から $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $\omega = v_-(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_2(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_-(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_0)$ である。

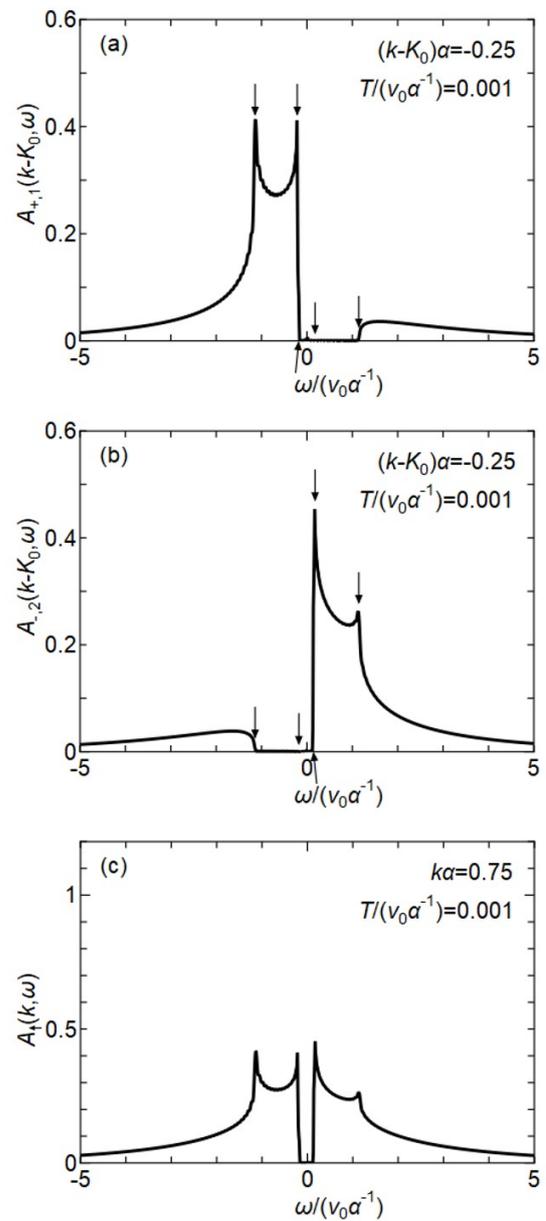


図 3.2 バンド構造 I の $k\alpha = 0.75$ 、 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ の場合のスペクトル関数。(a) は $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ を表し、(c) は $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ である。(a) において、矢印は、右から $\omega = v_+|k - K_0|$ 、 $\omega = v_-|k - K_0|$ 、 $\omega = -v_-|k - K_0|$ 、 $\omega = -v_1|k - K_0|$ 、 $\omega = -v_+|k - K_0|$ である。一方、(b) において、矢印は、右から $\omega = v_+|k - K_0|$ 、 $\omega = v_-|k - K_0|$ 、 $\omega = v_2|k - K_0|$ 、 $\omega = -v_-|k - K_0|$ 、 $\omega = -v_+|k - K_0|$ である。

は相互作用がない場合、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = \delta(\omega - v_2|k - K_2|)$ であるため、 $\omega > 0$ でメイン、 $\omega < 0$ でシャドウが現れる。 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ と $2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を足し合わせたものが $A_{\uparrow}(k, \omega)$ (図 3.4(c)) であるが、フェルミ速度 $-v_2$ のバンドが 2 重に縮退していることに加え、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ と $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ はともに $\omega > 0$ でメインが現れるためエネルギー ω に対して非対称な形状となる。

次に、外部の波数を $k\alpha = 0.66$ ($k < K_1$) とした場合のスペクトル関数は図 3.5 となる。図 3.5 の (a) は $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を表し、(c) が $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ である。付録 B.2 より、(a) の $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ では $-v_-|k - K_1| < \omega < v_-|k - K_1|$ の範囲でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = -v_1|k - K_1|$ 、 $v_+|k - K_1|$ 、 $-v_+|k - K_1|$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れる。一方で、(b) の $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ では $-v_-|k - K_2| < \omega < v_2|k - K_2|$ の範囲でスペクトルのウェイトはほぼゼロであり、 $\omega = -v_+|k - K_2|$ 、 $v_+|k - K_2|$ 、 $v_-|k - K_2|$ にショルダーやピークなどの特異な振る舞いが現れる。また、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ (図 3.5(a)) は相互作用がない場合、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega) = \delta(\omega + v_1|k - K_1|)$ であるため、 $\omega < 0$ でメイン、 $\omega > 0$ でシャドウが現れる。一方で、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ (図 3.5(b)) は相互作用がない場合、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = \delta(\omega - v_2|k - K_2|)$ であるため、 $K_1 < k < K_2$ の場合と同様に $\omega > 0$ でメイン、 $\omega < 0$ でシャドウが現れる。しかしながら、 $K_1 < k < K_2$ の場合と比べて $|k - K_2|$ の値が大きいため $\omega = v_-(k - K_2)$ と $\omega = v_+(k - K_2)$ の差が大きくなり、メインは全体として広がった形状となっている。 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ と $2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を足し合わせたものが $A_{\uparrow}(k, \omega)$ (図 3.5(c)) であり、 ω の正負でスペクトルのウェイトにあまり差はないが、上述のようにフェルミ速度 $-v_2$ のバンドからの寄与が広がったメインを持つことから、 ω に対して非対称な形状となる。

以上のことから、スペクトル関数について、バンド構造 I ではエネルギー ω に対して比較的対称な形状となる一方で、バンド構造 II では非対称な形状となるという定性的な違いが現れることが分かった。

スペクトル関数は角度分解光電子分光実験により実験的に観測可能であるが、フェルミエネルギー以下のエネルギーのウェイトしか観測できないため、エネルギーについての対称性を実験的にみることはできない。そこで、波数を変化させた場合のスペクトルの変化について考える。フェルミ波数より大きい波数 $k > K_0$ (図 3.1(c)) から小さい $K_0 > k$ (図 3.2(c)) へと変化させた際にバンド構造 I では $\omega < 0$ の領域のスペクトル関数の形状に大きな変化は見られない一方で、バンド構造 II では $k > K_2$ (図 3.3(c))、 $K_2 > k > K_1$ (図 3.4(c))、 $K_1 > k$ (図 3.5(c)) と波数を変化させると $\omega < 0$ の領域で、スペクトルの形状に大きな変化が見られる。この波数によるスペクトルの変化を見るためには、規格化された波数の分解能が $K_1\alpha = 0.96$ と $K_2\alpha = 1.45$ の差である 0.49 よりも小さい必要がある。近年、超分解能光電子分光装置が開発され、その波数分解能が 0.007 \AA^{-1}

であることから [46]、 $\alpha = 3.5 \text{ \AA}$ とすると、 $k\alpha$ が約 0.02 の波数分解能を持っていると言える。したがって、角度分解光電子分光により実験的にスペクトルの変化が観測でき、バンド構造 I とバンド構造 II の判別が可能であると考えられる。

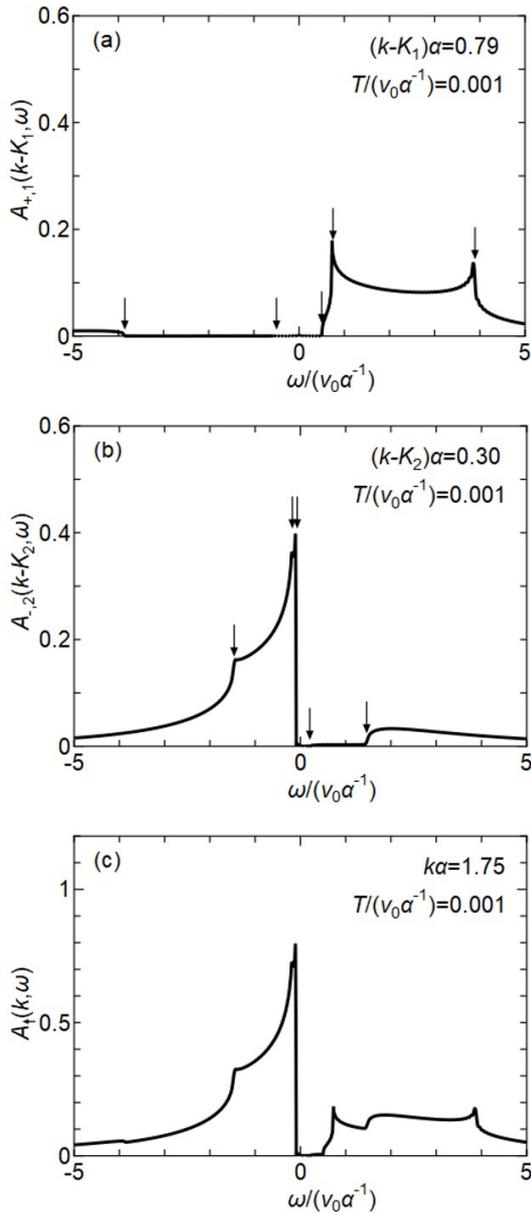


図 3.3 バンド構造 II の $k\alpha = 1.75 (K_2 < k)$ 、 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ の場合のスペクトル関数。(a) は $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を表し、(c) は $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ である。(a) において、矢印は、右から $\omega = v_+(k - K_1)$ 、 $\omega = v_1(k - K_1)$ 、 $\omega = v_-(k - K_1)$ 、 $\omega = -v_-(k - K_1)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_1)$ である。一方、(b) において、矢印は、右から $\omega = v_+(k - K_2)$ 、 $\omega = v_-(k - K_2)$ 、 $\omega = -v_2(k - K_2)$ 、 $\omega = -v_-(k - K_2)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_2)$ である。

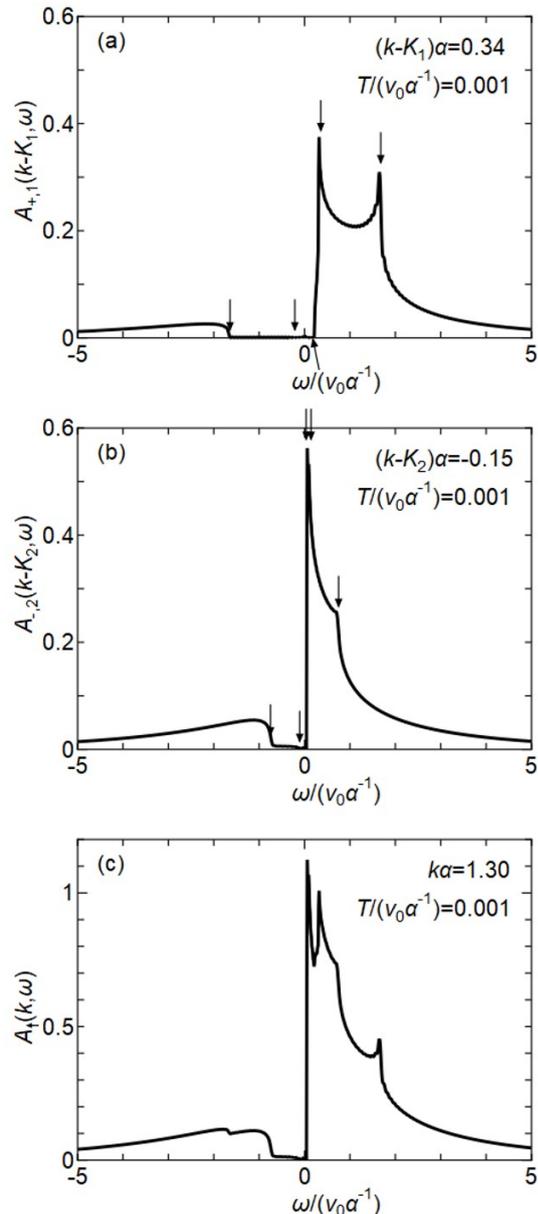


図 3.4 バンド構造 II の $k\alpha = 1.30 (K_1 < k < K_2)$ 、 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ の場合のスペクトル関数。(a) は $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を表し、(c) は $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ である。(a) において、矢印は、右から $\omega = v_+(k - K_1)$ 、 $\omega = v_1(k - K_1)$ 、 $\omega = v_-(k - K_1)$ 、 $\omega = -v_-(k - K_1)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_1)$ である。一方、(b) において、矢印は、右から $\omega = v_+|k - K_2|$ 、 $\omega = v_-(k - K_2)$ 、 $\omega = v_2|k - K_2|$ 、 $\omega = -v_-(k - K_2)$ 、 $\omega = -v_+|k - K_2|$ である。

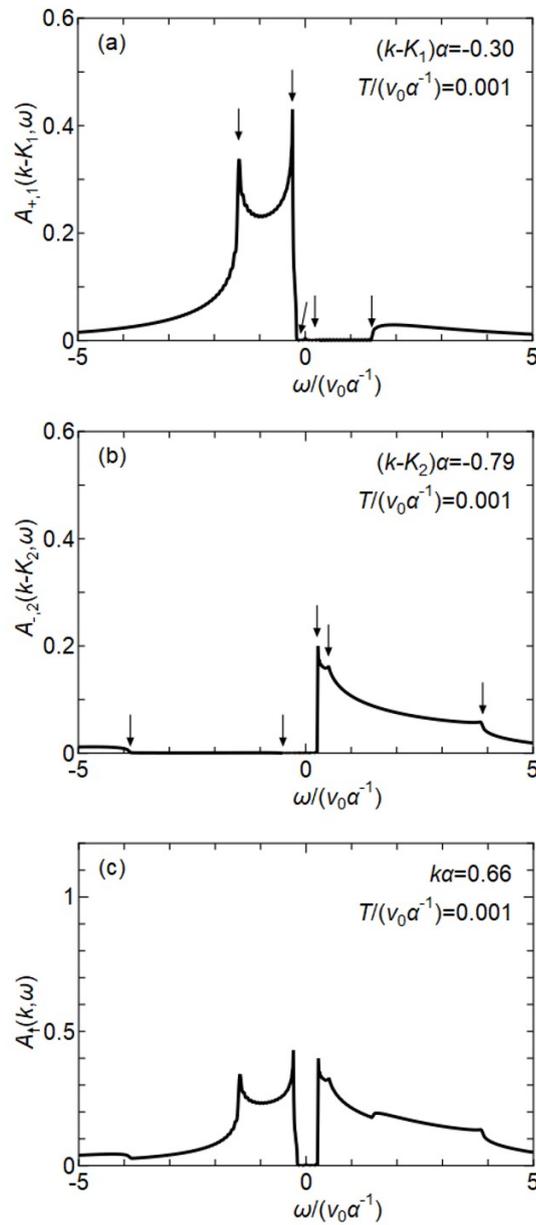


図 3.5 バンド構造 II の $k\alpha = 0.66 (K_1 > k)$ 、 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ の場合のスペクトル関数。(a) は $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ 、(b) は $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ を表し、(c) は $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ である。(a) において、矢印は、右から $\omega = v_+|k - K_1|$ 、 $\omega = v_-|k - K_1|$ 、 $\omega = -v_-|k - K_1|$ 、 $\omega = -v_+|k - K_1|$ 、 $\omega = -v_+|k - K_1|$ である。一方、(b) において、矢印は、右から $\omega = v_+|k - K_2|$ 、 $\omega = v_-|k - K_2|$ 、 $\omega = v_+|k - K_2|$ 、 $\omega = -v_-|k - K_2|$ 、 $\omega = -v_+|k - K_2|$ である。

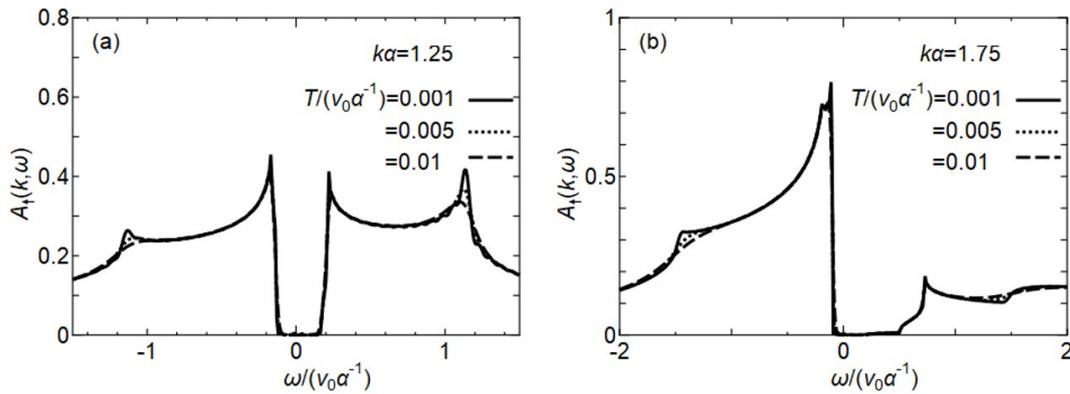


図 3.6 温度を変化させた (a) バンド構造 I、(b) バンド構造 II のスペクトル関数。バンド構造 I については $k\alpha = 1.25 (k > K_1)$ 、バンド構造 II については $k\alpha = 1.75 (K_1 < k < K_2)$ としている。実線が $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ 、点線が $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.005$ 、破線が $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.01$ である。

次に、スペクトル関数に対する温度による揺らぎについて考える。図 3.6(a) はバンド構造 I、図 3.6(b) はバンド構造 II について無次元化した温度を $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ (実線)、0.005 (点線)、0.01 (破線) と変化させた結果である。参考文献 [17] によると、スペクトル関数は温度が高くなるにつれて各ピークが融合し、相互作用が無い場合の結果に近付いていく。参考文献 [17] ではバンド幅に起因するカットオフと、相互作用のカットオフを別々に導入しているが、本研究ではそのような取り扱いをしていないため、上記の振る舞いは起こらない。しかしながら、本研究においても参考文献 [17] においてピークが融合し始める温度よりも低温を考えている限り、その結果は妥当であると考えられる。付録 B.2 より、 $T = 0$ ではバンド構造 I での $A_1(k, \omega)$ は $-v_2(k - K_0) > \omega$ 、 $v_-(k - K_0) < \omega$ で 0 でない値を持ち、 $\omega = v_1(k - K_0)$ 、 $v_+(k - K_0)$ 、 $-v_+(k - K_0)$ 、 $-v_-(k - K_0)$ で特異な振る舞いが現れる。また、バンド構造 II では $-v_2(k - K_2) > \omega$ 、 $v_-(k - K_2) < \omega$ で 0 でない値を持ち、 $\omega = v_+(k - K_2)$ 、 $-v_+(k - K_2)$ 、 $-v_-(k - K_2)$ 、 $v_1(k - K_1)$ 、 $v_+(k - K_1)$ 、 $-v_+(k - K_1)$ で特異な振る舞いが現れる。これらの振る舞いは図 3.6 より $T/(v_0\alpha^{-1})$ を変化させても見られる。したがって、温度による揺らぎはピークおよび/またはショルダー構造を不鮮明にするが、その全体的な形を変化させることはないことが分かる。すなわち、ピーク構造が消えない限り、定性的な違いは有限温度で観測できると予想される。

最後に、フラレンポリマーのスペクトル関数と金属カーボンナノチューブのスペクトル関数の比較を行う。金属カーボンナノチューブとしては、ジグザグ型に代表されるフェルミ波数がゼロとなる場合とアームチェア型に代表されるフェルミ波数がゼロではない場合の 2 種類があるが、本研究では後者を取り扱う。後者のスペクトル関数は、バンド構造 I においてフェルミ速度を $v_1 = v_2 = v_0$ とすることによっ

て得ることができる。この事実を用いて得られた金属カーボンナノチューブの結果 ($k > K_0$) を図 3.7 に示す。ここで、(a) はフェルミ速度が v_0 のバンドからの寄与 $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ 、(b) はフェルミ速度が $-v_0$ のバンドからの寄与 $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ 、(c) はその和 $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ を表す。(a) と (b) において矢印は励起エネルギーを表し、右から、 $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $\omega = v_0(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_0(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_0)$ である。カーボンナノチューブではバンドがフェルミエネルギーについて完全に対称となっているため、 $A_{+,1}(k - K_0, -\omega) = A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ を満たす。それゆえ、 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ は ω の対称関数となる。先に示したように、フラーレンポリマーではスペクトル関数は ω の対称関数とはならない。この違いは、周期的な凸凹構造が原因である。すなわち、フラーレンポリマーで現れる周期的凹凸曲面構造に起因する有効ポテンシャルによるものであると考えられる。

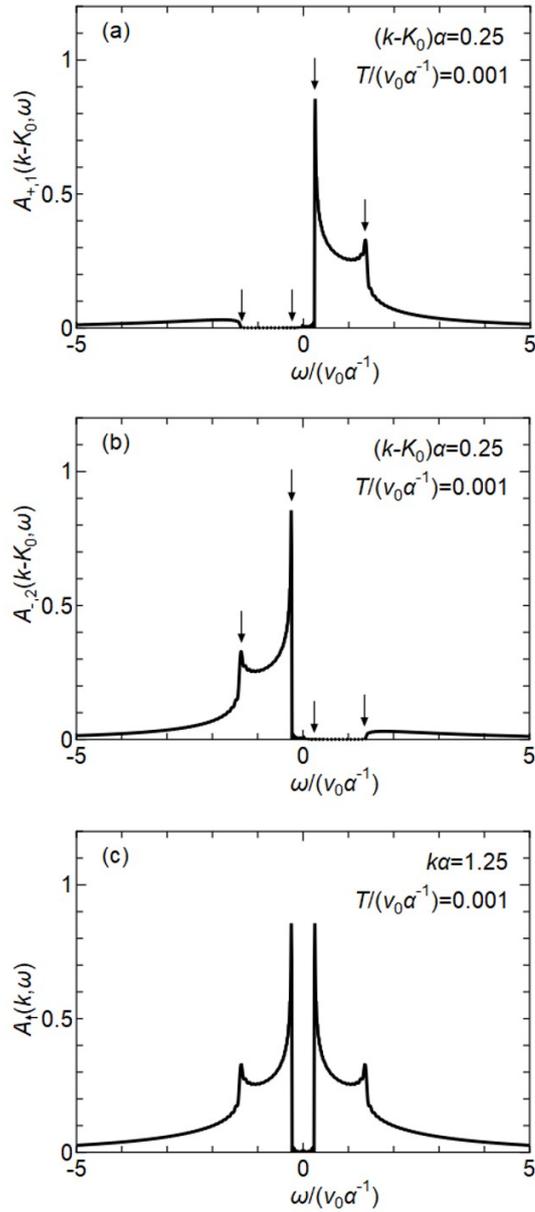


図 3.7 $k\alpha = 1.25 (k > K_0)$ での金属カーボンナノチューブのスペクトル関数。温度は $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ である。(a) は v_0 のバンドからの寄与 $A_{+,1}(k - K_0)$ 、(b) は $-v_0$ のバンドからの寄与 $A_{-,2}(k - K_0)$ 、(c) は $A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0) + A_{-,2}(k - K_0)$ である。(a) と (b) において、矢印は右から、 $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $\omega = v_0(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_0(k - K_0)$ 、 $\omega = -v_+(k - K_0)$ である。

第 4 章

電気抵抗率と光学伝導度

本章では、バンド構造 I と II のそれぞれについて、不純物散乱が存在する場合の電気抵抗率と光学伝導度について議論する [45]。また、両バンド構造とカーボンナノチューブとの比較も行う。

4.1 モデルとハミルトニアン

電気抵抗には後方散乱のみが寄与するため、図 4.1 で示される後方散乱を取り入れる。そのハミルトニアン \mathcal{H}_{imp} は以下の式によって与えられる。バンド構造 I では

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{imp}} = & \int dx \eta(x) \sum_p \left(\psi_{p,1}^\dagger \psi_{-p,2} + \psi_{p,2}^\dagger \psi_{-p,1} + \psi_{p,3}^\dagger \psi_{-p,4} + \psi_{p,4}^\dagger \psi_{-p,3} \right) \\ & + \int dx \xi(x) \left(\psi_{+,1}^\dagger \psi_{-,1} + \psi_{+,3}^\dagger \psi_{-,3} \right) + \int dx \xi^*(x) \left(\psi_{-,1}^\dagger \psi_{+,1} + \psi_{-,3}^\dagger \psi_{+,3} \right) \\ & + \int dx \lambda(x) \left(\psi_{+,2}^\dagger \psi_{-,2} + \psi_{+,4}^\dagger \psi_{-,4} \right) + \int dx \lambda^*(x) \left(\psi_{-,2}^\dagger \psi_{+,2} + \psi_{-,4}^\dagger \psi_{+,4} \right) \end{aligned} \quad (4.1)$$

となり、バンド構造 II では

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{imp}} = & \int dx \eta(x) \sum_p \left(\psi_{p,1}^\dagger \psi_{-p,2} + \psi_{p,2}^\dagger \psi_{-p,1} + \psi_{p,1}^\dagger \psi_{-p,3} + \psi_{p,3}^\dagger \psi_{-p,1} \right. \\ & \left. + \psi_{p,4}^\dagger \psi_{-p,5} + \psi_{p,5}^\dagger \psi_{-p,4} + \psi_{p,4}^\dagger \psi_{-p,6} + \psi_{p,6}^\dagger \psi_{-p,4} \right) \\ & + \int dx \left\{ \xi(x) \left(\psi_{+,1}^\dagger \psi_{-,1} + \psi_{+,4}^\dagger \psi_{-,4} \right) + \text{H.c.} \right\} \\ & + \int dx \left\{ \lambda(x) \left(\psi_{+,2}^\dagger \psi_{-,2} + \psi_{+,3}^\dagger \psi_{-,3} + \psi_{+,5}^\dagger \psi_{-,5} + \psi_{+,6}^\dagger \psi_{-,6} \right. \right. \\ & \left. \left. + \psi_{+,2}^\dagger \psi_{-,3} + \psi_{+,3}^\dagger \psi_{-,2} + \psi_{+,5}^\dagger \psi_{-,6} + \psi_{+,6}^\dagger \psi_{-,5} \right) + \text{H.c.} \right\} \end{aligned} \quad (4.2)$$

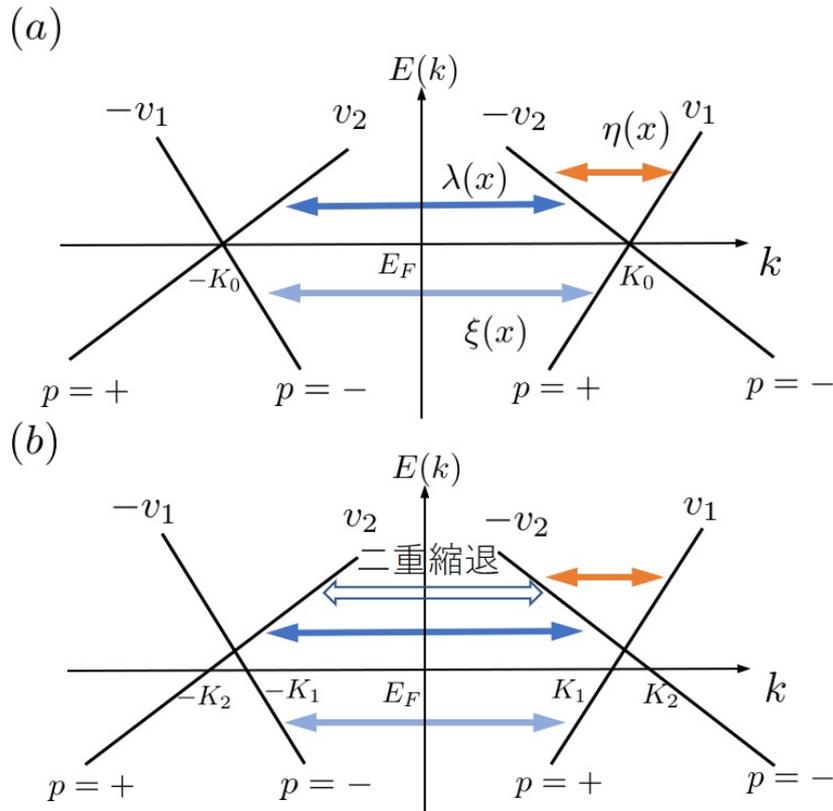


図 4.1 バンド構造 I (a) およびバンド構造 II (b) における可能な後方散乱のポテンシャル。図 (a) において、 $\eta(x)$ (橙色) は運動量移行 $q \approx 0$ に対応するバンド間散乱ポテンシャル、 $\lambda(x)$ (青色) と $\xi(x)$ (水色) は $q \sim \pm 2K_0$ に対応するバンド内散乱ポテンシャルである。一方、図 (b) において、 $\eta(x)$ は運動量移行 $q \approx \pm(K_2 - K_1)$ に対応するバンド間散乱ポテンシャル、 $\lambda(x)$ は $q \sim \pm 2K_2$ に対応する散乱ポテンシャル (バンド内およびバンド間)、 $\xi(x)$ は $q \sim \pm 2K_1$ に対応するバンド内散乱ポテンシャルを表す。

によって与えられる。式 (4.1) において、 $\eta(x)$ は運動量移行 $q \approx 0$ に対応するバンド間散乱ポテンシャル、 $\lambda(x)$ は $q \sim \pm 2K_0$ に対応するバンド 2 (バンド 4) 内の散乱ポテンシャル、 $\xi(x)$ は $q \sim \pm 2K_0$ に対応するバンド 1 (バンド 3) 内の散乱ポテンシャルである。一方、式 (4.2) において、 $\eta(x)$ は運動量移行 $q \approx \pm(K_2 - K_1)$ に対応するバンド 1 とバンド 2 (バンド 4 とバンド 5) およびバンド 1 とバンド 3 (バンド 4 とバンド 6) の間の散乱ポテンシャル、 $\lambda(x)$ は $q \sim \pm 2K_2$ に対応するバンド 2 (バンド 5) 内、バンド 3 (バンド 6) 内、およびバンド 2 と 3 (バンド 5 とバンド 6) の間の散乱ポテンシャル、 $\xi(x)$ は $q \sim \pm 2K_1$ に対応するバンド 1 (バンド 4) 内の散乱ポテンシャルである。運動量移行が十分に小さい場合のポテンシャル $\eta(x)$ は実数とみなすことができる。一方、フェルミ波数程度の大きな運動量移行に対応するポテンシャル $\lambda(x)$ および $\xi(x)$ は複素数となる。こ

これらのポテンシャルは以下のようなガウス型の確率分布に従う [47]。

$$P_\eta = \exp[-(2D_1)^{-1} \int dx \eta^2(x)] \quad (4.3)$$

$$P_\xi = \exp[-(D_2)^{-1} \int dx \xi(x) \xi^*(x)] \quad (4.4)$$

$$P_\lambda = \exp[-(D'_2)^{-1} \int dx \lambda(x) \lambda^*(x)] \quad (4.5)$$

ここで、 D_1 、 D_2 、 D'_2 はそれぞれの散乱過程の遷移確率に比例する量である。

4.2 メモリー関数

本研究では、メモリー関数の方法を用いて電気抵抗率と光学伝導度を求める [48, 49]。久保公式によると、光学伝導度は

$$\sigma(\omega) = \frac{i}{\omega} (\chi(\omega) - \chi(0)) \quad (4.6)$$

で与えられる。式 (4.6) において $\chi(\omega)$ は電流演算子 j を用いて $\chi(\omega) = \langle j; j \rangle_\omega$ と表される。ここで、任意の演算子 A に対して、

$$\langle A; A \rangle_\omega \equiv -i \int dx \int_0^\infty dt e^{(i\omega - \delta)t} \langle [A(x, t), A(0, 0)] \rangle \quad (\delta \rightarrow +0) \quad (4.7)$$

であり、 $\langle \dots \rangle$ は全ハミルトニアン $\mathcal{H} + \mathcal{H}_{\text{imp}}$ (\mathcal{H} は式 (2.27)) に関する熱平均である。電流演算子 j は連続方程式から求めることができ、

$$j = \frac{1}{2\sqrt{2\pi^2}} \sum_{j, \nu=1}^N X_{\nu j} \partial_x \Phi_j(x, t) \quad (4.8)$$

となる。 N はバンド構造 I で $N = 4$ 、バンド構造 II で $N = 6$ である。この結果から、

$$\chi(0) = - \sum_{j=1}^N \frac{(\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j})^2}{2\pi^2} \quad (4.9)$$

と求められる。式 (4.6) はメモリー関数 $M(\omega)$ を使って以下のように表すことができる。

$$\sigma(\omega) = \frac{-i\chi(0)}{\omega + M(\omega)} \quad (4.10)$$

ここで、

$$M(\omega) = \frac{\omega\chi(\omega)}{\chi(0) - \chi(\omega)} \quad (4.11)$$

である。 $M(\omega)$ は、不純物による散乱が小さいとすると、

$$M(\omega) \simeq \frac{(\langle F; F \rangle_\omega^0 - \langle F; F \rangle_{\omega=0}^0) / \omega}{-\chi(0)} \quad (4.12)$$

と近似することができる。ここで、分母については散乱がない場合に $\chi(\omega \neq 0)$ がゼロとなることから

$$\chi(0) - \chi(\omega) \simeq \chi(0) \quad (4.13)$$

と近似し、分子については

$$\omega \chi(\omega) \simeq - \frac{\langle F; F \rangle_\omega^0 - \langle F; F \rangle_{\omega=0}^0}{\omega} \quad (4.14)$$

と近似した。 F は電流演算子 j を用いて $F = [j, \mathcal{H} + \mathcal{H}_{\text{imp}}]$ によって定義される演算子であり、 $\langle F; F \rangle_\omega^0$ は式 (4.7) 内の熱平均を不純物項を除いたハミルトニアン \mathcal{H} での熱平均 $\langle \dots \rangle_0$ としたものである。この方法はボルン近似に相当し、多重散乱による局在化 (アンダーソン局在) の効果は取り入れられていない。

各バンド構造について式 (4.12) のメモリー関数は以下のように与えられる (付録 C 参照)。バンド構造 I では、

$$\begin{aligned} M(\omega) = & \left\{ \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \frac{D_1}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j} \frac{1}{2\pi T} \right. \\ & \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j \right) - B \left(\sum_{j=1}^N \frac{Y_j}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j \right) \right] \\ & + \frac{2}{K_{11}^2} \frac{D_2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \frac{1}{2\pi T} \\ & \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \right] \\ & + \frac{2}{K_{22}^2} \frac{D'_2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \frac{1}{2\pi T} \\ & \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \right] \left. \right\} / \omega \\ & \times \frac{2\pi^2}{\sum_{j'=1}^N (\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j'})^2} \quad (4.15) \end{aligned}$$

となり、

$$Y_j = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{1j} + X_{2j})^2}{2\pi \tilde{v}_j} + 2\pi \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\} \quad (4.16)$$

$$Y_j^{(1)} = \frac{X_{1j}^2}{\pi \tilde{v}_j} \quad (4.17)$$

$$Y_j^{(2)} = \frac{X_{2j}^2}{\pi \tilde{v}_j} \quad (4.18)$$

である。バンド構造 II では、

$$\begin{aligned}
& M(\omega) \\
&= \left[D_1 \frac{4}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}}}{2\pi T} \right. \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) \right] \\
&+ 4D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{1}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \right] \\
&+ 2D_2' \left\{ \frac{4}{K_{22}^2} \frac{1}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}}{2\pi T} \right. \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \right] \\
&+ 2 \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right)^2 \frac{1}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}}}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) \right] \left. \right\} / \omega \\
&\quad \times \frac{2\pi^2}{\sum_{j=1}^N (\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j})^2} \quad (4.19)
\end{aligned}$$

となり、

$$Y_j^{(12)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{1j} + X_{2j})^2}{2\pi \tilde{v}_j} + 2\pi \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\} \quad (4.20)$$

$$Y_j^{(23)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{2j} + X_{3j})^2}{2\pi \tilde{v}_j} + 2\pi \tilde{v}_j \left((KX)_{2j} - (KX)_{3j} \right)^2 \right\} \quad (4.21)$$

$$Y_j^{(1)} = \frac{X_{1j}^2}{\pi \tilde{v}_j} \quad (4.22)$$

$$Y_j^{(2)} = \frac{X_{2j}^2}{\pi \tilde{v}_j} \quad (4.23)$$

である。ここで、 α_c は α/v_0 で与えられるカットオフエネルギーの逆数である。また、 $B(x, y)$ はベータ関数でガンマ関数 $\Gamma(x)$ を用いて、 $B(x, y) = \Gamma(x)\Gamma(y)/\Gamma(x+y)$ と表される。

4.3 電気抵抗率

電気抵抗率 ρ は式 (4.10) で与えられる $\sigma(\omega)$ の $\omega = 0$ での値の逆数で表される。したがって、メモリー関数を用いて、

$$\rho = \sigma^{-1}(0) = \frac{-i\chi(0)}{M(0)} \quad (4.24)$$

で求められる。

メモリー関数について $\omega \rightarrow 0$ の極限を取ると、バンド構造 I では、

$$\begin{aligned} M(0) = & \left\{ i \frac{D_1}{\pi \alpha^2} \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j}{2}\right)}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_j)} \right. \\ & + i \frac{2}{K_{11}^2} \frac{D_2}{\pi \alpha^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}{2}\right)}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)})} \\ & \left. + i \frac{2}{K_{22}^2} \frac{D'_2}{\pi \alpha^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}{2}\right)}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)})} \right\} \\ & \times \frac{1}{\sum_{j=1}^N (\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j})^2} \end{aligned} \quad (4.25)$$

となり、電気抵抗率は

$$\begin{aligned} \rho = & 2\pi^2 \left\{ \frac{D_1}{\pi \alpha^2} \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j}{2}\right)}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_j)} \right. \\ & + \frac{2}{K_{11}^2} \frac{D_2}{\pi \alpha^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}{2}\right)}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)})} \\ & \left. + \frac{D'_2}{\pi \alpha^2} \frac{2}{K_{22}^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}{2}\right)}{\Gamma(\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)})} \right\} \\ & \times \left\{ \frac{1}{\sum_{j'=1}^N (\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j'})^2} \right\}^2 \end{aligned} \quad (4.26)$$

となる。3種類の散乱ポテンシャルに対応して、3つの温度依存性の冪、 $\sum_{j=1}^N Y_j - 2$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2$ が現れる。相互作用が無い場合には、この冪の値はいずれもゼロとなるため相互作用がない場合の電気抵抗率 ρ_0 は温度に依存しない。

一方、バンド構造 II では、 $M(0)$ と ρ は以下のように計算される。

$$\begin{aligned}
M(0) = & \left[D_1 \frac{4i}{2\pi\alpha^2} \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}\right)} \right. \\
& + 4i D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{1}{2\pi\alpha^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}\right)} \\
& + 2D_2' \left\{ \frac{4i}{K_{22}^2} \frac{1}{2\pi\alpha^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}\right)} \right. \\
& \left. \left. + 2i \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right)^2 \frac{1}{2\pi\alpha^2} \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}\right)} \right\} \right] \\
& \times \frac{1}{\sum_{j=1}^N (\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j})^2} \tag{4.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho = & 2\pi^2 \left[D_1 \frac{4}{2\pi\alpha^2} \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}\right)} \right. \\
& + 4D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{\alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}}{2\pi\alpha^2} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}\right)} \\
& + 2D_2' \left\{ \frac{4}{K_{22}^2} \frac{\alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}}{2\pi\alpha^2} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}\right)} \right. \\
& \left. \left. + 2 \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right)^2 \frac{\alpha_c^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}}}{2\pi\alpha^2} (2\pi T)^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} - 2} \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}\right)}{\Gamma\left(\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}\right)} \right\} \right] \\
& \times \left(\frac{1}{\sum_{j=1}^N (\sum_{\nu=1}^N X_{\nu j})^2} \right)^2 \tag{4.28}
\end{aligned}$$

温度依存性の冪の値は、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} - 2$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} - 2$ の4種類となるが、3番目の指数と4番目の指数は等しいので異なる値はバンド構造 I と同じく3つである。なお、相互作用が無い場合には、この冪の値はいずれもゼロとなるため相互作用がない場合の電気抵抗率 ρ_0 は温度に依存しない。

CNT の電気抵抗率は、バンド構造 I で $v_1 = v_2 = v_0$ とすることによって得られる。この時、3種類の冪の値は等しくなる。

スペクトル関数同様、 $v_0 \simeq 8.0 \times 10^5 \text{m/s}$ 、 $\bar{V}(0)/(\pi v_0) = 7.47$ を用いて数値計算を行う。 $D_1\alpha/(\pi v_0^2) = D_2\alpha/(\pi v_0^2) = D'_2\alpha/(\pi v_0^2) = 0.1$ を用いた数値計算の結果は図 4.2 で与えられる。グラフの横軸は温度を無次元化したもので、縦軸は電気抵抗率 ρ を相互作用が無い場合の抵抗率 ρ_0 で割って無次元化したものである。赤線はバンド構造 I、青線はバンド構造 II、黒線は CNT の結果を表している。

まず、バンド構造 I とバンド構造 II の比較を行う。バンド構造 I、II の両構造共に温度 T に関して冪依存性が見られる。その指数はバンド構造 I では $\sum_{j=1}^N Y_j - 2 \simeq -0.412$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2 \simeq -0.409$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2 \simeq -0.462$ である。一方、バンド構造 II では $\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} - 2 \simeq -0.248$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 2 \simeq -0.310$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 2 = \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} - 2 \simeq -0.333$ である。このように異なる 3 つの指数が存在するため、電気抵抗率は温度の変化に伴ってクロスオーバーを示すはずであるが、両構造とも指数の値の差が小さいため図 4.2 を見ると、指数が 1 種類であるように振る舞う。一方、バンド構造 I とバンド構造 II の指数の値には 0.1 ~ 0.2 程度の違いが現れ、バンド構造 I の方が小さい。相互作用がない場合には指数がゼロであることを考慮すると、バンド構造 I の方が電子相関効果が強く現れているといえる。

次に、CNT と PSFP(バンド構造 I と II) を比較する。先に述べたように、金属 CNT の指数は 1 種類でその値は約 -0.410 となる。その値はバンド構造 I の値に非常に近く、またバンド構造 II の値とも近い値である。したがって、曲面系に起因する有効ポテンシャルは、電気抵抗の温度依存性については定量的な違いとしてのみ現れると言える。

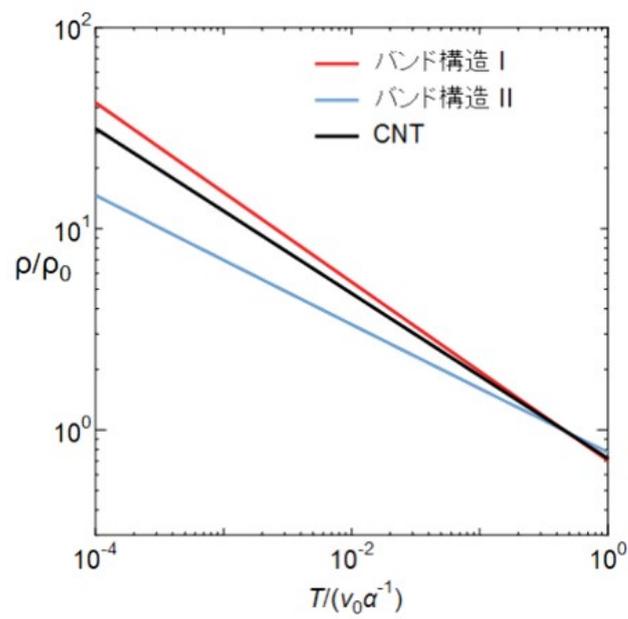


図 4.2 PSFP および金属 CNT の電気抵抗率 ρ の温度依存性。縦軸は ρ を相互作用が無い場合の電気抵抗率 ρ_0 で割って無次元化しており、横軸は温度 T を無次元化している。赤線がバンド構造 I、青線がバンド構造 II、黒線は金属 CNT の結果である。

4.4 光学伝導度

本節では、電気抵抗率と同じパラメータを用いて光学伝導度 $\sigma(\omega)$ の数値計算を行った結果を考察する。式 (4.15)、(4.19) で表されるメモリー関数を代入して得られた $\sigma(\omega)$ の実部 $\text{Re} \sigma(\omega)$ は図 4.3 である。横軸が振動数を無次元化したもので、縦軸は $\text{Re} \sigma(\omega)$ を $\sigma_0 = \rho_0^{-1}$ で無次元化したものである。赤線がバンド構造 I、青線がバンド構造 II、黒線が金属 CNT の結果（バンド構造 I で $v_1 = v_2 = v_0$ としたもの）を表す。温度は $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ に固定してある。図 4.4 は、図 4.3 を両対数プロットしたものである。

図 4.3 から明らかなように、高振動数領域で振動数の冪依存性が見られる。その指数は、バンド構造 I では $\sum_{j=1}^N Y_j - 4 \simeq -2.412$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 4 \simeq -2.409$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 4 \simeq$

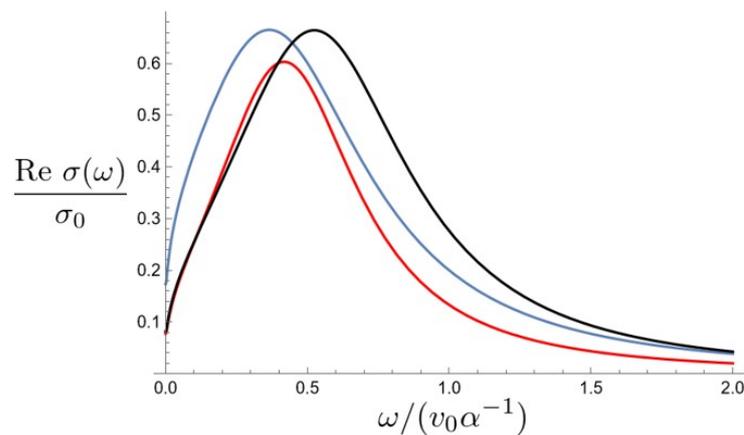


図 4.3 $T/(v_0\alpha^{-1}) = 0.001$ の場合の $\text{Re} \sigma(\omega)$ の振動数 ω 依存性。縦軸は $\sigma_0 = \rho_0^{-1}$ で無次元化しており、横軸は振動数を無次元化している。赤線がバンド構造 I、青線がバンド構造 II、黒線が金属 CNT の結果である。

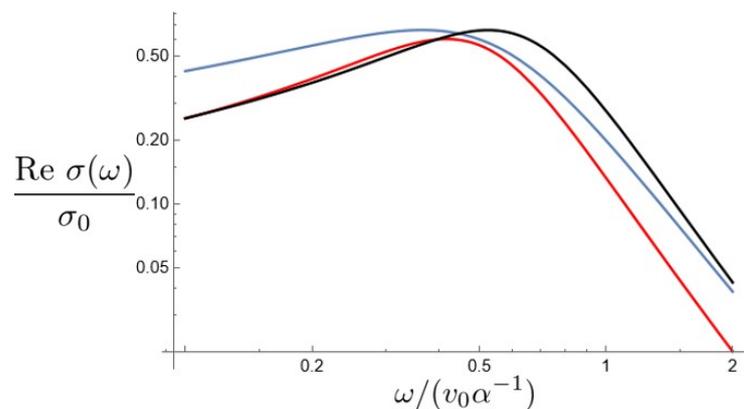


図 4.4 図 4.3 の結果を両対数プロットしたグラフ。

-2.462。一方、バンド構造 II では $\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} - 4 \simeq -2.248$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} - 4 \simeq -2.310$ 、 $\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} - 4 = \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} - 4 \simeq -2.333$ であり、両構造ともに 3 種類である。したがって光学伝導度は振動数の変化に沿ってクロスオーバーが見られるはずであるが、指数の差が小さいため図 4.4 を見ると、指数が 1 種類であるように振る舞い、その値はバンド構造 I とバンド構造 II で非常に近い。

次に $\text{Re} \sigma(\omega)$ の温度依存性について考える。図 4.5 はバンド構造 I について温度を変えて計算した結果である。実線が $T/(v_0 \alpha^{-1}) = 0.1$ 、破線が $T/(v_0 \alpha^{-1}) = 0.01$ 、一点鎖線が $T/(v_0 \alpha^{-1}) = 0.001$ の結果である。 $\omega = 0$ での光学伝導度は電気抵抗率 ρ の逆数であるため、 T を下げると小さくなる。したがって温度を下げると値が小さくなり、それにもなってピークが現れる。このピークは、振動数についての総和則を満たすために現れると考えられ、ドルーデピークに起因するものである。このような振る舞いは、バンド構造 II でも見られる。

最後に、CNT と PSFP (バンド構造 I と II) を比較する。図 4.4 を見ると、CNT、PSFP ともに高振動数の領域で振動数 ω についての冪乗則が見られ、その指数は CNT が約 -2.410 の 1 種類であるのに対して PSFP では上述した 3 種類であり、その個数に違いが現れた。しかし、PSFP では指数の差が小さいため、CNT と同様に指数が 1 種類であるように振る舞う。また、低振動数部分では、両者ともに総和則を満たすためにドルーデピークに起因するピークが見られた。したがって、曲面系に起因する有効ポテンシャルは、光学伝導度については定量的な違いとしてのみ現れると言える。

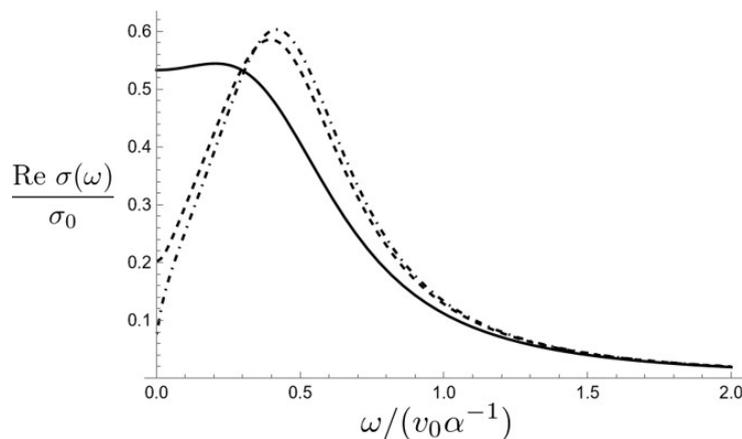


図 4.5 バンド構造 I の温度効果のグラフ。実線が $T/(v_0 \alpha^{-1}) = 0.1$ 、破線が $T/(v_0 \alpha^{-1}) = 0.01$ 、一点鎖線が $T/(v_0 \alpha^{-1}) = 0.001$ の結果である。

第5章

まとめ

本研究は、実験的に生成されたピーナツ型フラーレンポリマーがどのような原子構造を持っているかを実験的に判別する物理量を明らかにすることが目的である。T3 構造から GSW 転移により得られる 53 種類の構造異性体の内、実現する可能性が高いのはエネルギー的に安定なものであると考え、最も安定な FP5N と次に安定な FP6L を対象として、両構造が判別できるかを調べた。

上記の安定構造については第一原理計算によりバンド分散が得られているため、低エネルギーの性質に重要な役割を果たすフェルミエネルギーをよぎるバンドを取り出し、それらを線形に近似 (FP6L と FP5N の線形バンドを、それぞれバンド構造 I とバンド構造 II と記す) した。スピン自由度による縮退を除くと、バンド構造 I は 2 バンドモデル、バンド構造 II は 3 バンドモデルとなる。両構造とも 2 つのフェルミ速度 v_1 と v_2 を持つが、その差はバンド構造 II の方が大きく、また、バンド構造 II では v_2 のバンドが二重縮退している。そのため、バンド構造 I のフェルミ波数は 1 つであるが、バンド構造 II のフェルミ波数は 2 つである。その意味で、バンド構造 I に比べてバンド構造 II の方が非対称性が大きい。このようなバンドに対して電子間相互作用を導入し、一次元電子系の相関効果を合理的に取り込むことができるボゾン化法を適用して、スペクトル関数、電気抵抗率、光学伝導度の考察を行った。数値計算については、カーボンナノチューブの実験結果を再現するような相互作用パラメータを用いた。

スペクトル関数については、バンド構造 I はエネルギーに関して比較的対称であるのに対して、バンド構造 II は対称ではない形状をしている。これは、バンド構造 I に比べバンド構造 II の方が非対称性が大きいという事実を反映している。スペクトル関数には、集団励起に対応するエネルギーでピークやショルダーなどの特異な振る舞いが現れる。バンド構造 I では 4 個の集団励起があるのに対してバンド構造 II では 6 個あることに加え、バンド構造 I ではフェルミ波数が 1 種類であるのに対してバンド構造 II では 2 種類存在するため、集団励起の波数が 2 つ現れ、それぞれ値が異なることで励起エネルギーが大き

く異なる。このことにより、バンド構造 II のスペクトル関数はバンド構造 I より複雑な形状となる。このような特徴の違いから、フェルミエネルギーを跨ぐように外部の波数を変化させると、バンド構造 I ではフェルミ波数より大きい場合と小さい場合でほとんど変化が見られないのに対して、バンド構造 II ではスペクトル関数の形状が大きく変化することが分かった。このように、スペクトル関数にはバンド構造 I と II の間に定性的な違いが現れることが分かった。

電気抵抗率については、両構造共に温度に関して冪依存性が見られ、その指数はバンド構造 I では約 -0.412 、 -0.409 、 -0.462 、バンド構造 II では約 -0.248 、 -0.333 、 -0.310 であり、ともに 3 種類現れる。この指数の数は、可能な散乱過程の数を反映している。このようにバンド構造 I と II で共通した振る舞いが見られ、その違いはわずかな指数の値の定量的違いのみである。また、光学伝導度については、両者ともに高振動数の領域で振動数 ω についての冪乗則が見られ、その指数はバンド構造 I では約 -2.412 、 -2.409 、 -2.462 、バンド構造 II では約 -2.248 、 -2.333 、 -2.310 であり、ともに 3 種類であり、その値は非常に近い。低振動数部分では、両者ともに有限の振動数でピークが見られた。これは、光学伝導度は $\omega = 0$ で電気抵抗率の逆数であることから、 $\omega = 0$ の値は温度が下がると値が小さくなる。一方、光学伝導度には総和則があるため、それを満たすために低振動数部分にピークが現れる。このようにして、高振動数、低振動数ともにバンド構造 I と II で共通した振る舞いが見られた。差異は、冪の値の僅かな違いである。

以上のことから、バンド構造 I と II で、スペクトル関数に関しては定性的な差異が現れる一方で、電気抵抗率、光学伝導度に関しては定量的な差異のみが現れることが分かった。

ピーナッツ型フラレンポリマーは金属カーボンナノチューブに周期的な凸凹を付加した構造をしていることから、金属カーボンナノチューブとピーナッツ型フラレンポリマーの比較を行うと、曲面電子系に起因する有効ポテンシャルの効果を検証することができる。スペクトル関数を比較すると、金属カーボンナノチューブ（フェルミ波数がゼロではないもの）ではエネルギーに関して完全に対称な形状となる一方で、ピーナッツ型フラレンポリマーにはその対称性はない。さらに、金属カーボンナノチューブでは集団励起の個数が 4 個であるが、縮退のため異なる速度は 2 つである。一方、フラレンポリマーでは、集団励起の異なる速度は 4 つである。この事実に起因してフラレンポリマーのスペクトル関数は金属カーボンナノチューブに比べ複雑な形状を持つことが分かった。電気抵抗率については、金属カーボンナノチューブでは温度 T についての冪依存性が見られたが、その指数は CNT が約 -0.410 の 1 種類であった。一方、フラレンポリマーではバンド構造 I でも II でも上述した 3 種類であり、その個数に違いが現れた。しかしながら、フラレンポリマーの 3 種類の指数はその差が小さいため、図 4.2 で見られるようにフラレンポリマーでも金属カーボンナノチューブ同様の振る舞いが観測される。また、光学伝導度については両者ともに高振動数の領域で振動数 ω についての冪乗則が見

られ、その指数はカーボンナノチューブが約 -2.410 の 1 種類であるのに対してフラーレンポリマーでは上述した 3 種類であり、その個数に違いが現れた。しかし、電気抵抗率の場合と同じく、フラーレンポリマーでは指数の差が小さいため、金属カーボンナノチューブと同様に指数が 1 種類であるように振る舞う。低振動数部分では、両者ともに総和則を満たすためにドルーデピークに起因するピークが見られた。したがって、曲面系に起因する有効ポテンシャルは、スペクトル関数に関しては定性的な差異を引き起こす一方で、電気抵抗率、光学伝導度に関しては定量的な差異としてのみ現れることが分かった。

以上のことから、フラーレンポリマーの原子構造を判別するにあたっては、電気抵抗率や光学伝導度ではなくスペクトル関数がふさわしいと考えられる。スペクトル関数は角度分解光電子分光により観測可能であり、両構造の判別には波数を変化させた際のスペクトルの変化を見る必要がある。バンド構造 II の規格化されたフェルミ波数は $K_1\alpha = 0.96$ 、 $K_2\alpha = 1.45$ であることから、波数分解能は規格化されたフェルミ波数間の差 0.49 よりも十分小さい必要があるが、近年の超分解能光電子分光装置の開発により波数分解能が向上し規格化された値で 0.02 程度に達しているため、角度分解光電子分光により実験的にスペクトルの変化が観測でき、バンド構造 I とバンド構造 II の判別が可能であると考えられる。

付録 A

一次元スピンレスフェルミオン系とボゾン化法

本付録では、相互作用のある一次元フェルミオン系で実現する TLL 状態とそこでの様々な異常な振る舞いを紹介する。簡単のため、スピンレスフェルミオン系を考える。まず、この系を取り扱う理論手法であるボゾン化法と位相変数を用いた取扱いについて述べる。次にその手法を用いて、運動量分布関数および状態密度を議論する。

一次元スピンレスフェルミオン系のハミルトニアン¹の運動エネルギー項は一般的に

$$\mathcal{H}_0 = \sum_K (\epsilon_K - \epsilon_F) c_K^\dagger c_K \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。ここで、 ϵ_K はバンドエネルギー、 ϵ_F はフェルミエネルギー、 $c_K^\dagger (c_K)$ は波数 K の電子の生成 (消滅) 演算子であり $\{c_K, c_{K'}^\dagger\} = \delta_{KK'}$ 、 $\{c_K, c_{K'}\} = \{c_K^\dagger, c_{K'}^\dagger\} = 0$ を満たす。 ϵ_K を $K = pk_F + k$ ($p = \pm$, $k_F \gg |k|$) としてフェルミ波数 $\pm k_F$ 近傍で図 1.2 のように線形に近似すると、

$$\begin{aligned} \epsilon_K &\simeq \epsilon_F + \left. \frac{\partial \epsilon_K}{\partial K} \right|_{K=pk_F} k \\ &= \epsilon_F + pv_F k \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

となる。ここで、 v_F はフェルミ速度である。また、 p はフェルミオンの運動方向を表す記号であり、これを用いて演算子を $c_{pk_F+k} \rightarrow c_{k,p}$ と書き換えると、 $c_{k,+}$ は速度 v_F で動くフェルミオン、 $c_{k,-}$ は速度 $-v_F$ で動くフェルミオンの消滅演算子であることを意味する。これらを用いると式 (A.1) のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{p=\pm} \sum_k pv_F k c_{k,p}^\dagger c_{k,p} \quad (\text{A.3})$$

と書き換えられる。ボゾン化法では、このように線形化されたバンドを持つ系を取り扱う。

A.1 ボゾン化法

フェルミエネルギーまで完全に電子が詰まった状態からの電子-ホール対励起を記述するために、密度演算子

$$\begin{aligned}\rho_p(q) &= \sum_k : c_{k+q,p}^\dagger c_{k,p} : \\ &= \begin{cases} \sum_k c_{k+q,p}^\dagger c_{k,p} & \cdots q \neq 0 \\ \sum_k : c_{k,p}^\dagger c_{k,p} : \equiv N_p & \cdots q = 0 \end{cases} \quad (\text{A.4})\end{aligned}$$

を導入する。ここで、 $:\cdots:$ はノーマル積で

$$: c_{k+q,p}^\dagger c_{k,p} : := c_{k+q,p}^\dagger c_{k,p} - \delta_{q,0} \langle c_{k,p}^\dagger c_{k,p} \rangle_0 \quad (\text{A.5})$$

で定義される。また、 k についての和は、カットオフ K_c を用いて $-K_c < k < K_c$ の範囲に限られているものとする。 $\langle \cdots \rangle_0$ は相互作用のない場合の基底状態での平均値であることから右辺第 2 項は絶対零度でのフェルミ分布関数 $\langle c_{k,p}^\dagger c_{k,p} \rangle_0 = \theta(-pk)$ ($\theta(x)$: 階段関数) を差し引くことを意味している。また、 $\rho_p^\dagger(q) = \rho_p(-q)$ を満たす。この密度演算子の交換関係は、

$$[\rho_p(-q), \rho_{p'}(q')] = \frac{pqL}{2\pi} \delta_{q,q'} \delta_{p,p'} \quad (\text{A.6})$$

となる。ここで、 L は系の長さである。この交換関係は、密度演算子 $\rho_p(q)$ が、 $[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'}$ ($q, q' \neq 0$) を満たすボゾンの生成消滅演算子 a_q, a_q^\dagger を用いて

$$\rho_p(q) = N_p \delta_{0,q} + \sqrt{\frac{|q|L}{2\pi}} \left(\theta(pq) a_q^\dagger + \theta(-pq) a_{-q} \right) \quad (\text{A.7})$$

表されることを意味する。このように、ハミルトニアンやフェルミオンの場の演算子などすべての演算子をこの密度演算子で表すことをボゾン化という。

まず、式 (A.3) のハミルトニアンをボゾン化することを考える。 $q \neq 0$ の場合を考えると、ハミルトニアンと密度演算子との交換関係は、

$$[\mathcal{H}_0, \rho_p(q)] = pv_F q \rho_p(q) \quad (\text{A.8})$$

となる。この交換関係は、ハミルトニアンが $\rho_p(q)$ を用いて

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\pi v_F}{L} \sum_{p=\pm} \sum_{q \neq 0} \rho_p(q) \rho_p(-q) \quad (\text{A.9})$$

と表現されていても成り立つ関係である。一方で、 $q = 0$ の成分は保存量であることから交換関係からは求まらない。代わりに、ブランチ $p = +$ 、 $p = -$ の粒子数がそれぞれ

N_+ 、 N_- 増えたときのエネルギーの増加を表す $\Delta E(N_+, N_-) = (\pi v_F/L) \sum_{p=\pm} N_p^2$ を $q=0$ の場合のハミルトニアンとみなすことができるので、結局ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0^B &= \frac{\pi v_F}{L} \sum_{p=\pm} N_p^2 + \frac{\pi v_F}{L} \sum_{p=\pm} \sum_{q \neq 0} \rho_p(q) \rho_p(-q) \\ &= \frac{\pi v_F}{L} \sum_{p=\pm} \sum_q \rho_p(q) \rho_p(-q) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

と表すことができる。このように同じハミルトニアンが、式 (A.3) ではフェルミオンによって表現され、式 (A.10) ではボゾンで表現される。

次に、フェルミオンの場の演算子をボゾン化することを考える。ブランチ p の粒子を一つ増やす演算子 U_p を導入すると、 U_p は

$$[N_p, U_p] = U_p \quad (\text{A.11})$$

$$[\rho_p(q), U_p] = 0 \quad \dots q \neq 0 \quad (\text{A.12})$$

の交換関係を満たさなければならない。この U_p を

$$\begin{aligned} U_p &= \sum_k c_{k,p}^\dagger \delta(pk - (\frac{\pi}{L}(2N_p + 1))) \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L e^{-i\phi_p^\dagger(x)} \psi_p^\dagger(x) e^{-i\phi_p(x)} dx \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

とおくとする。ここで、 $c_{k,p}^\dagger = (1/\sqrt{L}) \int_0^L e^{ikx} \psi_p^\dagger(x) dx$ 、 $\phi_p(x) = -(\pi px/L)N_p$ である。この U_p は式 (A.11) は満たすが、式 (A.12) は満たさない。これは、 $\phi_p(x)$ を

$$\phi_p(x) = -\frac{\pi px}{L} N_p + \frac{2\pi i}{L} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{q \neq 0} \frac{e^{iqx - \alpha|q|/2}}{|q|} \theta(pq) \rho_p(-q) \quad (\text{A.14})$$

と書き換えることで解決する。ここで、 α は、その逆数が短波長のカットオフになる量である。式 (A.13) を逆に解くことで、

$$\psi_p^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\phi_p^\dagger(x)} U_p e^{i\phi_p(x)} \quad (\text{A.15})$$

が得られる。これがフェルミオン演算子のボゾンによる表現である。

さらに、この後での計算のためにさらに変形を行う。異なるブランチ間の生成演算子が反交換するために、 $\{\eta_p, \eta_{p'}\} = 2\delta_{pp'}$ 、 $\eta_p^\dagger = \eta_p$ を満たすマヨラナ演算子 η_p を導入し、 U_p を

$$U_p = \eta_p e^{iQ_p} \quad (\text{A.16})$$

と表す。ここで、 $Q_p^\dagger = Q_p$ であり、

$$\left[Q_p, N_{p'} \right] = i\delta_{pp'} \quad (\text{A.17})$$

の交換関係を満たす。これらを用いると、フェルミオン演算子は、

$$\psi_p(x) = \frac{\eta_p}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i(Q_p + \phi_p^\dagger(x) + \phi_p(x))} \quad (\text{A.18})$$

と書き換えられる。これは、フェルミオン演算子の反交換関係

$$\left\{ \psi_p(x), \psi_{p'}(x') \right\} = 0 \quad (\text{A.19})$$

$$\left\{ \psi_p(x), \psi_{p'}^\dagger(x') \right\} = \delta_{pp'} \delta(x - x') \quad (\text{A.20})$$

を満たす。

全電子数 N を

$$N = N_0 + \sum_p N_p \quad (\text{A.21})$$

電流 J を

$$J = \sum_p p N_p \quad (\text{A.22})$$

と書く。 p についての和を実行すると、 $N - N_0 = N_+ + N_-$ 、 $J = N_+ - N_-$ であるので、これらを連立して解くと、 $N_+ = \frac{1}{2}(N - N_0 + J)$ 、 $N_- = \frac{1}{2}(N - N_0 - J)$ となる。まとめると、

$$N_p = \frac{1}{2}(N - N_0 + pJ) \quad (\text{A.23})$$

である。

A.1.1 相互作用の導入

次に、前方散乱の相互作用として、反対向きに運動する電子同士の散乱振幅 g_2 と同じ向きに運動する電子の散乱振幅 g_4 を取り入れた場合のハミルトニアンを考える。ハミルトニアンの相互作用部分 \mathcal{H}_{int} は、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2L} \sum_{k, k', q, p} \left(g_2 c_{k+q, p}^\dagger c_{k'-q, -p}^\dagger c_{k', -p} c_{k, p} + g_4 c_{k+q, p}^\dagger c_{k'-q, p}^\dagger c_{k', p} c_{k, p} \right) \\ &= \frac{1}{2L} \sum_p \left(g_2 N_p N_{-p} + g_4 N_p^2 \right) + \sum_{q \neq 0} \left\{ \frac{g_2 |q|}{4\pi} \left(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_{-q} a_q \right) + \frac{g_4 |q|}{2\pi} a_q^\dagger a_q \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

と表される。この時、式 (A.7) を用いた。したがって全体のハミルトニアン $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0^B + \mathcal{H}_{\text{int}}$ は、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{\pi v_F}{L} \sum_p N_p^2 + \frac{1}{2L} \sum_p \left(g_2 N_p N_{-p} + g_4 N_p^2 \right) \\ & + \sum_{q \neq 0} \left\{ |q| \left(v_F + \frac{g_4}{2\pi} \right) a_q^\dagger a_q + \frac{g_2 |q|}{4\pi} \left(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_{-q} a_q \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

と表せる。ここで、ゼロモード (波数ゼロ) からの寄与を

$$\mathcal{H}_{B,\text{zero}} = \frac{\pi v_F}{L} \sum_p N_p^2 + \frac{1}{2L} \sum_p \left(g_2 N_p N_{-p} + g_4 N_p^2 \right) \quad (\text{A.26})$$

とおき、揺らぎの寄与を

$$\mathcal{H}_{B,\text{fluc}} = \sum_{q \neq 0} \left\{ |q| \left(v_F + \frac{g_4}{2\pi} \right) a_q^\dagger a_q + \frac{g_2 |q|}{4\pi} \left(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_{-q} a_q \right) \right\} \quad (\text{A.27})$$

とおく。このとき、この $\mathcal{H}_{B,\text{zero}}$ に対して式 (A.23) を用いると

$$\mathcal{H}_{B,\text{zero}} = \frac{\pi v_N}{2L} (N - N_0)^2 + \frac{\pi v_J}{2L} J^2 \quad (\text{A.28})$$

が得られる。ここで、

$$v_N = v_F + \frac{g_4 + g_2}{2\pi} \quad (\text{A.29})$$

$$v_J = v_F + \frac{g_4 - g_2}{2\pi} \quad (\text{A.30})$$

とおいた。次に $\mathcal{H}_{B,\text{fluc}}$ を

$$b_q^\dagger = \cosh(\varphi) a_q^\dagger - \sinh(\varphi) a_{-q} \quad (\text{A.31})$$

$$b_q = \cosh(\varphi) a_q - \sinh(\varphi) a_{-q}^\dagger \quad (\text{A.32})$$

を用いて対角化する。ここで b_q^\dagger 、 b_q は、 $[b_q, b_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}$ 、 $[b_q, b_{q'}] = [b_q^\dagger, b_{q'}^\dagger] = 0$ の関係を満たすボゾン演算子である。これらの演算子を代入して対角項 $b_q^\dagger b_q$ 以外が 0 になるように φ を決めると、 $\mathcal{H}_{B,\text{fluc}}$ は

$$\mathcal{H}_{B,\text{fluc}} = \sum_q v_s |q| b_q^\dagger b_q \quad (\text{A.33})$$

となり、 φ は

$$e^{2\varphi} = \sqrt{\frac{v_F + \frac{1}{2\pi}(g_4 - g_2)}{v_F + \frac{1}{2\pi}(g_4 + g_2)}} \equiv K \quad (\text{A.34})$$

により求まる。ここで、

$$\begin{aligned} v_s &= \sqrt{\left(v_F + \frac{1}{2\pi}(g_4 + g_2)\right)\left(v_F + \frac{1}{2\pi}(g_4 - g_2)\right)} \\ &= \sqrt{v_N v_J} \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

とおいた。以上のことから、前方散乱の相互作用として、 g_2 と g_4 を取り入れた場合のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \frac{\pi}{2L} \left\{ v_N (N - N_0)^2 + v_J J^2 \right\} + \sum_q |q| v_s b_q^\dagger b_q \quad (\text{A.36})$$

である。

A.1.2 位相ハミルトニアン

ボゾン演算子で表されたフェルミオンの場の演算子 (式 (A.18)) を位相変数 $\theta_+(x)$ 、 $\theta_-(x)$ を用いて

$$\psi_p(x) = \frac{\eta_p}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\frac{p}{\sqrt{2}}(\theta_+(x) + p\theta_-(x))} \quad (\text{A.37})$$

と書き換える。ここで、

$$\theta_+(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_p p \left\{ -Q_p - \left(\phi_p^\dagger(x) + \phi_p(x) \right) \right\} \quad (\text{A.38})$$

$$\theta_-(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_p \left\{ -Q_p - \left(\phi_p^\dagger(x) + \phi_p(x) \right) \right\} \quad (\text{A.39})$$

であり、

$$i\frac{p}{\sqrt{2}}(\theta_+(x) + p\theta_-(x)) = -iQ_p - i(\phi_p^\dagger(x) + \phi_p(x)) \quad (\text{A.40})$$

を満たすように決定した。これらの位相変数は

$$\left[\theta_+(x), \theta_-(x') \right] = i\pi \text{sgn}(x - x') \quad (\text{A.41})$$

の交換関係を満たすことから、 $\theta_+(x)$ に共役な運動量 $\Pi_+(x)$ は

$$\Pi_+(x) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \theta_-(x) \quad (\text{A.42})$$

で与えられ、 $\theta_-(x)$ に対する運動量 $\Pi_-(x)$ は

$$\Pi_-(x) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \theta_+(x) \quad (\text{A.43})$$

で与えられる。

また、 $\theta_+(x)$ の微分は、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\theta_+(x) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_p p \left\{ -Q_p - \left(\phi_p^\dagger(x) + \phi_p(x) \right) \right\} \\ &= \frac{\sqrt{2}\pi}{L} \sum_{p,q} e^{iqx} \rho_p(-q)\end{aligned}\tag{A.44}$$

となり、これを密度揺らぎと呼ぶ。さらに、 $\theta_-(x)$ の微分は、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\theta_-(x) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_p \left\{ -Q_p - \left(\phi_p^\dagger(x) + \phi_p(x) \right) \right\} \\ &= \frac{\sqrt{2}\pi}{L} \sum_{p,q} e^{iqx} p \rho_p(-q)\end{aligned}\tag{A.45}$$

となり、これを電流揺らぎと呼ぶ。このとき、式 (A.14) より、

$$\begin{aligned}\partial_x \left(\phi_p(x) + \phi_p^\dagger(x) \right) &= -\frac{2\pi p}{L} N_p - \frac{2\pi p}{L} \sum_{q \neq 0} e^{iqx} \rho_p(-q) \\ &= -\frac{2\pi p}{L} \sum_q e^{iqx} \rho_p(-q)\end{aligned}\tag{A.46}$$

となることを用いた。さらに、位相変数の微分を連立することにより、

$$\partial_x \theta_+(x) + \partial_x \theta_-(x) = \frac{2\sqrt{2}\pi}{L} \sum_q e^{iqx} \rho_+(-q)\tag{A.47}$$

$$\partial_x \theta_+(x) - \partial_x \theta_-(x) = \frac{2\sqrt{2}\pi}{L} \sum_q e^{iqx} \rho_-(-q)\tag{A.48}$$

が得られる。これらをフーリエ変換することにより、

$$\rho_p(q) = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \int dx e^{iqx} \left(\partial_x \theta_+(x) + p \partial_x \theta_-(x) \right)\tag{A.49}$$

が得られる。この密度演算子を式 (A.25) のハミルトニアンに代入すると、

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \int dx \frac{v_s}{4\pi} \left\{ \frac{1}{K} \left(\partial_x \theta_+(x) \right)^2 + K \left(\partial_x \theta_-(x) \right)^2 \right\} \\ &= \int dx \left\{ \frac{v_s}{4\pi K} \left(\partial_x \theta_+(x) \right)^2 + v_s K \pi \Pi_+^2(x) \right\} \\ &= \int dx \left\{ \frac{\pi v_s}{K} \left(\partial_x \theta_-(x) \right)^2 + \frac{v_s K}{4\pi} \Pi_-^2(x) \right\}\end{aligned}\tag{A.50}$$

が得られる。これが位相ハミルトニアンと呼ばれるものである。さらに、

$$\tilde{\Pi}_+(x, t) = \sqrt{2\pi v_s K} \Pi_+(x, t) \quad (\text{A.51})$$

$$\tilde{\theta}_+(x, t) = \frac{\theta_+(x, t)}{\sqrt{2\pi v_s K}} \quad (\text{A.52})$$

$$\tilde{\theta}_-(x, t) = \sqrt{2\pi v_s K} \theta_-(x, t) \quad (\text{A.53})$$

とおくことにより式 (A.50) のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \int dx \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\Pi}_+^2(x, t) + v_s^2 \left(\partial_x \tilde{\theta}_+(x, t) \right)^2 \right\} \quad (\text{A.54})$$

と書き換えられ、式 (A.37) の場の演算子は

$$\psi_p(x, t) = \frac{\eta_p}{\sqrt{2\pi\alpha}} \exp \left[i \frac{p}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{2\pi v_s K} \tilde{\theta}_+(x, t) + p \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} \tilde{\theta}_-(x, t) \right) \right] \quad (\text{A.55})$$

と書き換えられる。さらに、参考文献 [44] に基づいて以下のようにモード展開を行う。ボゾンの生成消滅演算子 a_q^\dagger 、 a_q を用いて位相変数は

$$\tilde{\theta}_+(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_q \left(a_q e^{iqx - iv_s |q|t} + a_q^\dagger e^{-iqx + iv_s |q|t} \right) \sqrt{\frac{1}{2v_s |q|}} \quad (\text{A.56})$$

$$\tilde{\Pi}_+(x, t) = \frac{-i}{\sqrt{L}} \sum_q \left(a_q e^{iqx - iv_s |q|t} - a_q^\dagger e^{-iqx + iv_s |q|t} \right) \sqrt{\frac{v_s |q|}{2}} \quad (\text{A.57})$$

と表される。上記の展開において、 q についての和は $\exp(-\alpha|q|)$ によって紫外部でカットオフされる。これらの式をハミルトニアン (式 (A.54)) に代入すると、以下のようなモード展開されたハミルトニアンが得られる。

$$\mathcal{H} = \sum_q v_s |q| a_q^\dagger a_q \quad (\text{A.58})$$

この式を式 (A.36) と比較すると、ここで導入したモード展開はゆらぎのモードは正しく表現しているが、ゼロモードは再現できていない。ゼロモードからの寄与は N_p/L が無視できない場合には重要になってくるが、それ以外は無視できる。本研究ではそのような場合を議論する。なお、 $\tilde{\Pi}_+(x) = -\frac{1}{2\pi} \partial_x \tilde{\theta}_-(x)$ であることを用いると、 $\tilde{\theta}_-(x, t)$ のモード展開は

$$\tilde{\theta}_-(x, t) = \frac{2\pi}{\sqrt{L}} \sum_q \frac{1}{q} \left(a_q e^{iqx - iv_s |q|t} + a_q^\dagger e^{-iqx + iv_s |q|t} \right) \sqrt{\frac{v_s |q|}{2}} \quad (\text{A.59})$$

である。

A.2 分布関数

温度 $T = 0$ での分布関数を求める。ブランチ $p = +$ のフェルミ波数付近の分布関数 $n_+(k)$ は、

$$n_+(k) = \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{ikx} e^{-ik_F x} \langle \psi_+^\dagger(x) \psi_+(0) \rangle \quad (\text{A.60})$$

で与えられる。ここで、期待値部分は式 (A.55) を代入すると、

$$\begin{aligned} & \langle \psi_+^\dagger(x) \psi_+(0) \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\alpha} \left\langle e^{-i\frac{1}{\sqrt{2}} \{ \sqrt{2\pi v_s K} (\tilde{\theta}_+(x) - \tilde{\theta}_+(0)) + \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} (\tilde{\theta}_-(x) - \tilde{\theta}_-(0)) \}} \right. \\ & \quad \left. \times e^{\frac{1}{4} [\sqrt{2\pi v_s K} \tilde{\theta}_+(x) + \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} \tilde{\theta}_-(x), \sqrt{2\pi v_s K} \tilde{\theta}_+(0) + \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} \tilde{\theta}_-(0)]} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\alpha} \exp \left[-\frac{1}{4} \left\langle \left\{ \sqrt{2\pi v_s K} (\tilde{\theta}_+(x) - \tilde{\theta}_+(0)) + \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} (\tilde{\theta}_-(x) - \tilde{\theta}_-(0)) \right\}^2 \right\rangle \right] \\ & \quad \times \exp \left[\frac{1}{4} \left[\sqrt{2\pi v_s K} \tilde{\theta}_+(x) + \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} \tilde{\theta}_-(x), \sqrt{2\pi v_s K} \tilde{\theta}_+(0) + \frac{1}{\sqrt{2\pi v_s K}} \tilde{\theta}_-(0) \right] \right] \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

となる。ここで、 $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$ である場合に成り立つ、ハウスドルフの公式

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]} \quad (\text{A.62})$$

を用いた。exp の肩の期待値部分および交換関係部分に対して、

$$\left\langle \left(\tilde{\theta}_+(x) - \tilde{\theta}_+(0) \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{L} \sum_q \frac{e^{-\alpha|q|}}{2v_s|q|} \left(2 - e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \quad (\text{A.63})$$

$$\left\langle \left(\tilde{\theta}_-(x) - \tilde{\theta}_-(0) \right)^2 \right\rangle = \frac{4\pi^2}{L} \sum_q \frac{v_s}{2|q|} e^{-\alpha|q|} \left(2 - e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \quad (\text{A.64})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\tilde{\theta}_+(x) - \tilde{\theta}_+(0) \right) \left(\tilde{\theta}_-(x) - \tilde{\theta}_-(0) \right) \right\rangle &= \left\langle \left(\tilde{\theta}_-(x) - \tilde{\theta}_-(0) \right) \left(\tilde{\theta}_+(x) - \tilde{\theta}_+(0) \right) \right\rangle \\ &= \frac{\pi}{L} \sum_q \frac{e^{-\alpha|q|}}{q} \left(2 - e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.65})$$

$$\left[\tilde{\theta}_+(x), \tilde{\theta}_-(0) \right] = \frac{2\pi}{L} \sum_{q>0} \frac{e^{-\alpha|q|}}{q} \left(e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \quad (\text{A.66})$$

$$\left[\tilde{\theta}_+(0), \tilde{\theta}_-(x) \right] = -\frac{2\pi}{L} \sum_{q>0} \frac{e^{-\alpha|q|}}{q} \left(e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \quad (\text{A.67})$$

であることを用いると、

$$\left\langle \psi_+^\dagger(x) \psi_+(0) \right\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{x + i\alpha} \frac{1}{\left\{ 1 + \left(\frac{x}{\alpha} \right)^2 \right\}^{\frac{1}{4}(K + \frac{1}{K} - 2)}} \quad (\text{A.68})$$

が得られる。したがって分布関数は、

$$\begin{aligned} n_+(k) &= \frac{1}{L} \int_0^\infty dx e^{i(k-k_F)x} \left\langle \psi_+^\dagger(x) \psi_+(0) \right\rangle \\ &\simeq \frac{1}{2} - \frac{\text{sgn}(k - k_F)}{\pi} \left(|k - k_F| \alpha \right)^A \frac{\pi}{\Gamma(1 + A) 2 \cos(\frac{A}{2}\pi)} \end{aligned} \quad (\text{A.69})$$

となる。ここで、 $A = (K + 1/K - 2)/2$ とおいた。このように、TLL 状態では、フェルミ波数で連続であり、図 1.1(b) のような冪的な振る舞いが現れる。これは、フェルミ波数で不連続となるフェルミ流体 (図 1.1(a)) と大きく異なる点である。また、この指数 A は K を含むことから相互作用の強さに依存する。

A.3 状態密度

位置に関する情報を取り入れた一粒子状態密度は局所状態密度と呼ばれ、

$$\begin{aligned} D(\omega, x) &= \sum_n \delta(\omega - \epsilon_n - \mu) |\varphi_n(x)|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left\{ \psi^\dagger(x), \psi(x, t) \right\} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

と表される。ここで、 μ は化学ポテンシャルであり、 $\varphi_n(x)$ は状態 n 、位置 x での波動関数であることから $|\varphi_n(x)|^2$ は確率密度を表している。

$\psi(x, t)$ は場の演算子であり、A.1.1 で導入した相互作用がある場合を考えると、フェルミエネルギー付近で線形近似したバンドを考えているので

$$\psi(x, t) = e^{ik_F x} \psi_+(x, t) + e^{-ik_F x} \psi_-(x, t) \quad (\text{A.71})$$

である。これを式 (A.70) に代入することで、ブランチ p についての状態密度は

$$D_p(\omega, T, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left\{ \psi_p^\dagger(x, 0), \psi_p(x, t) \right\} \right\rangle \quad (\text{A.72})$$

と得られる。ここで、 T は温度であり、 $\psi_p(x, t)$ は式 (A.55) をハイゼンベルグ表示にしたものである。この式は、 $p = +$ 、 $p = -$ のどちらでも等しい値となり、 x にも依存しない。以下では、 $D_p(\omega, T, x)$ を改めて $D(\omega, T)$ と書く。

式 (A.72) に対して式 (A.55) と式 (A.56)、式 (A.59) を用いて計算すると、

$$D(\omega, T) = \frac{1}{4\pi^2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \left(\frac{\sinh(\pi T t)}{\pi T t} \right)^{-(A+1)} \left\{ \left(1 - \frac{iv_s t}{\alpha} \right)^{-(A+1)} + \left(1 + \frac{iv_s t}{\alpha} \right)^{-(A+1)} \right\} \quad (\text{A.73})$$

が得られる。ここで、 $A = (K + 1/K)/2 - 1$ である。 $D(0, 0) = 0$ と分かるので、 $D(\omega, T) = D(\omega, T) - 0 = D(\omega, T) - D(0, 0)$ とすることができ、

$$D(\omega, T) = \frac{1}{4\pi^2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ \left(1 - \frac{iv_s t}{\alpha} \right)^{-(A+1)} + \left(1 + \frac{iv_s t}{\alpha} \right)^{-(A+1)} \right\} \left\{ e^{i\omega t} \left(\frac{\sinh(\pi T t)}{\pi T t} \right)^{-(A+1)} - 1 \right\} \quad (\text{A.74})$$

の表式が得られる。この式に対して $T = 0$ を考えると、

$$D(\omega, 0) = \frac{1}{2\pi\alpha} \left(\frac{\alpha}{v_s} \right)^{A+1} \frac{\omega^A}{\Gamma(1+A)} \quad (\text{A.75})$$

となる。ここで、 $\Gamma(x)$ はガンマ関数である。また、 $\omega = 0$ についても考えると、

$$D(0, T) = \frac{1}{2\pi^2 v_s} \frac{\Gamma^2(\frac{A+1}{2})}{\Gamma(A+1)} \left(\frac{2\pi T \alpha}{v_s} \right)^A \quad (\text{A.76})$$

となる。以上のことから、状態密度は $D(\omega, 0) \propto \omega^A$ 、 $D(0, T) \propto T^A$ のように指数 $A = (K + 1/K)/2 - 1$ の冪乗則が見られることが分かる。これは TLL 状態における特徴的な振る舞いである。

A.4 スペクトル関数

スペクトル関数とは、多体効果がある場合のエネルギーバンドに対応する量であり、

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int dx dt e^{-ikx+i\omega t} G^{\text{R}}(x, t) \quad (\text{A.77})$$

と表される。ここで、 $G^{\text{R}}(x, t)$ は遅延グリーン関数で

$$G^{\text{R}}(x, t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ \psi(x, t), \psi^\dagger(0, 0) \right\} \right\rangle \quad (\text{A.78})$$

である。また、場の演算子 $\psi(x, t)$ は式 (A.71) である。したがってスペクトル関数 $A(k, \omega)$ は、

$$\begin{aligned}
& A(k, \omega) \\
&= \frac{1}{2\pi^2\alpha} \text{Im} \int dx dt e^{-i(k-k_F)x+i\omega t} i\theta(t) \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x-v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x-v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2)} \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x+v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x+v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2)} \\
&\quad \times \left\{ \left(1 - i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2)} \left(1 + i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2)} \right. \\
&\quad \quad \left. + \left(1 - i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2)} \left(1 + i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2)} \right\} \\
&+ \frac{1}{2\pi^2\alpha} \text{Im} \int dx dt e^{-i(k+k_F)x+i\omega t} i\theta(t) \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x-v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x-v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2)} \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x+v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x+v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2)} \\
&\quad \times \left\{ \left(1 - i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2)} \left(1 + i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2)} \right. \\
&\quad \quad \left. + \left(1 - i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2)} \left(1 + i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2)} \right\} \\
&= A_+(k - k_F, \omega) + A_-(k + k_F, \omega) \tag{A.79}
\end{aligned}$$

となり、ブランチ $p = +$ からの寄与 A_+ とブランチ $p = -$ からの寄与 A_- の和として表される。しかしながら、外部の波数 k を $+k_F$ 付近に取った場合、 $p = -$ からの寄与 A_- はこのモデルで考慮しているフェルミエネルギー付近から外れるため、無視することができる (k を $-k_F$ 付近にとった場合の $p = +$ からの寄与 A_+ も同様)。したがって、 k が $+k_F$ 付近の場合

$$A(k, \omega) \simeq A_+(k - k_F, \omega) \tag{A.80}$$

となり、 k が $-k_F$ 付近の場合

$$A(k, \omega) \simeq A_-(k + k_F, \omega) \tag{A.81}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
& A_p(k - pk_F, \omega) \\
&= \text{Im} \frac{i}{2\pi^2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(k-pk_F)x+i\omega t} \theta(t) \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x-v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x-v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2p)} \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x+v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x+v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2p)} \\
&\quad \times \left\{ \left(1 - i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2p)} \left(1 + i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2p)} \right. \\
&\quad \quad \left. + \left(1 - i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2p)} \left(1 + i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2p)} \right\} \\
&= \text{Im} \frac{i}{2\pi^2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(k-pk_F)x+i\omega t} \theta(t) \left\{ F_p(x, t) + F_p(-x, -t) \right\} \quad (\text{A.82})
\end{aligned}$$

であり、

$$\begin{aligned}
F_p(x, t) &= \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x-v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x-v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2p)} \\
&\quad \times \left\{ \frac{\beta v_s}{\pi(x+v_st)} \sinh\left(\pi \frac{x+v_st}{\beta v_s}\right) \right\}^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2p)} \\
&\quad \times \left(1 - i \frac{x-v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}+2p)} \left(1 + i \frac{x+v_st}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{4}(K+\frac{1}{K}-2p)} \quad (\text{A.83})
\end{aligned}$$

である。 $F_p(x, t)$ と $F_p(-x, -t)$ は複素共役の関係であるので、 $F_p(x, t) + F_p(-x, -t)$ は実数となる。このことから、 $A_p(k - pk_F, \omega)$ 内の全体としての虚部は \exp の肩のみに含まれている。したがって、

$$\begin{aligned}
& A_p(k - pk_F, \omega) \\
&= \frac{1}{4\pi^2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(k-pk_F)x+i\omega t} \left\{ F_p(x, t) + F_p(-x, -t) \right\} \\
&= I_p(k - pk_F, \omega) + I_p(-k + pk_F, -\omega) \quad (\text{A.84})
\end{aligned}$$

ここで、

$$I_p(q, \omega) = \frac{1}{4\pi^2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-iqx+i\omega t} F_p(x, t) \quad (\text{A.85})$$

である。特に $T = 0$ での $A_+(k - k_F)$ は

$$\begin{aligned}
& A_+(k - k_F) \\
&= \frac{\alpha^{(K+1/K)/2-1}}{v_s \Gamma((K+1/K-2)/4) \Gamma((K+1/K+2)/4)} \\
&\times \left\{ \left(\frac{\omega - v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s} \right)^{(K+1/K-2)/4-1} e^{-\alpha \frac{\omega - v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s}} \theta(\omega - v_s(k - k_F)) \right. \\
&\quad \times \left(\frac{\omega + v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s} \right)^{(K+1/K+2)/4-1} e^{-\alpha \frac{\omega + v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s}} \theta(\omega + v_s(k - k_F)) \\
&\quad + \left(\frac{-\omega + v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s} \right)^{(K+1/K-2)/4-1} e^{\alpha \frac{\omega - v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s}} \theta(-\omega + v_s(k - k_F)) \\
&\quad \left. \times \left(\frac{-\omega - v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s} \right)^{(K+1/K+2)/4-1} e^{\alpha \frac{\omega + v_s(k - k_F)}{\sqrt{2}v_s}} \theta(-\omega - v_s(k - k_F)) \right\}
\end{aligned} \tag{A.86}$$

と計算される。 $k - k_F = q > 0$ での結果を図 A.1 に記す。 $\omega > 0$ では $\omega = v_s q$ で指数 $(K+1/K-2)/4-1$ の冪依存性を示し、 $\omega < 0$ では $\omega = -v_s q$ で指数 $(K+1/K+2)/4-1$ の冪依存性を示す。一方、相互作用がない $K = 1$ 、 $v_s = v_F$ の場合を考えると、

$$\begin{aligned}
& A_p(k - pk_F, \omega) \\
&= \frac{1}{4\pi^2 \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(k - pk_F)x + i\omega t} \\
&\times \left\{ \left(1 - i \frac{x - v_F t}{\alpha} \right)^{-\frac{1}{2}(1+p)} \left(1 + i \frac{x + v_F t}{\alpha} \right)^{-\frac{1}{2}(1-p)} \right. \\
&\quad \left. + \left(1 + i \frac{x - v_F t}{\alpha} \right)^{-\frac{1}{2}(1+p)} \left(1 - i \frac{x + v_F t}{\alpha} \right)^{-\frac{1}{2}(1-p)} \right\}
\end{aligned} \tag{A.87}$$

となるので、ブランチ $p = +, -$ でのスペクトル関数は

$$\begin{aligned}
& A_+(k - k_F, \omega) \\
&= \frac{1}{4\pi^2 \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx dt e^{-i(k - k_F)x + i\omega t} \left\{ \left(1 - i \frac{x - v_F t}{\alpha} \right)^{-1} + \left(1 + i \frac{x - v_F t}{\alpha} \right)^{-1} \right\} \\
&= \delta(\omega - v_F(k - k_F))
\end{aligned} \tag{A.88}$$

$$\begin{aligned}
& A_-(k + k_F, \omega) \\
&= \frac{1}{4\pi^2 \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx dt e^{-i(k + k_F)x + i\omega t} \left\{ \left(1 + i \frac{x + v_F t}{\alpha} \right)^{-1} + \left(1 - i \frac{x + v_F t}{\alpha} \right)^{-1} \right\} \\
&= \delta(\omega + v_F(k + k_F))
\end{aligned} \tag{A.89}$$

である。ここで、

$$\frac{1}{x + i\alpha} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi \delta(x) \tag{A.90}$$

を用いた。したがって、相互作用が無い場合にはスペクトル関数はデルタ関数となる。式 (A.82) の指数に現れる K が式 (A.34) で表されることから、異なるブランチ間の散乱を表す相互作用 g_2 が加わると K が 1 からずれ、デルタ関数であったスペクトルウェイトは図 A.1 のように $\omega = v_s q$ で冪依存性を持ったピーク (メイン) になることに加え、 $\omega = -v_s q$ でショルダー形状のウェイト (シャドウ) が現れる。さらに、スピンを含む場合を考えると、スピンと電荷の励起がそれぞれ異なる値を持つことから、図 1.3 のようにメインのピークはスピン励起と電荷励起で分離する。

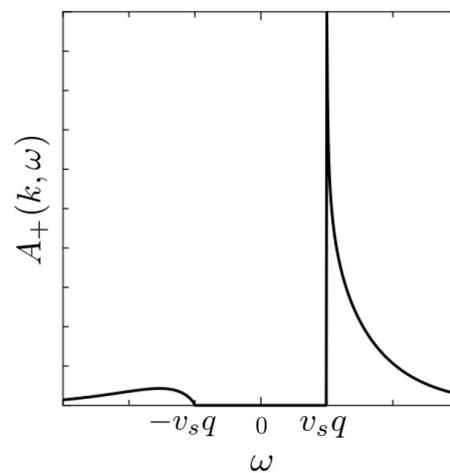


図 A.1 k が k_F 付近 ($q = k - k_F > 0$) でのスペクトル関数 $A_+(k, \omega)$ 。 $\omega > v_s q$ (メイン) と $\omega < -v_s q$ (シャドウ) に冪依存性をもつウェイトが現れる。

付録 B

ピーナッツ型フラレンポリマーにおけるスペクトル関数

B.1 遅延グリーン関数 $G_{p,\nu}^R(x,t)$ の計算

式 (3.1) で表されるスペクトル関数を求めるにあたって、遅延グリーン関数 $G_{p,\nu}^R(x,t)$ を計算する。期待値部分は

$$\left\langle \left\{ \psi_{p,\nu}(x,t), \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0) \right\} \right\rangle = \left\langle \psi_{p,\nu}(x,t) \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0) \right\rangle + \left\langle \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0) \psi_{p,\nu}(x,t) \right\rangle \quad (\text{B.1})$$

であるので、各項を求める。なお、 $\psi_{p,\nu}(x,t)$ は式 (2.28) である。1 項目は、

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_{p,\nu}(x,t) \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0) \right\rangle \\ &= \frac{\eta_{p,\nu}^2}{2\pi\alpha} \left\langle \exp \left[i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j=1}^N \left(X_{\nu j} \Theta_j(x,t) + p(KX)_{\nu j} \Phi_j(x,t) \right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left(X_{\nu j'} \Theta_{j'}(0,0) + p(KX)_{\nu j'} \Phi_{j'}(0,0) \right) \right] \right\rangle \\ & \quad \times \exp \left(\frac{1}{4} \sum_{j,j'=1}^N \left[X_{\nu j} \Theta_j(x,t) + p(KX)_{\nu j} \Phi_j(x,t), X_{\nu j'} \Theta_{j'}(0,0) + p(KX)_{\nu j'} \Phi_{j'}(0,0) \right] \right) \\ &= \frac{1}{2\pi\alpha} A \times B \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

とおくと、 A は

$$\begin{aligned}
A &= \left\langle \exp \left[i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j=1}^N \left(X_{\nu j} \Theta_j(x, t) + p(KX)_{\nu j} \Phi_j(x, t) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left(X_{\nu j'} \Theta_{j'}(0, 0) + p(KX)_{\nu j'} \Phi_{j'}(0, 0) \right) \right] \right\rangle \\
&= \exp \left[-\frac{1}{8L} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{\nu j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 p^2 (KX)_{\nu j}^2 \tilde{v}_j \right\} \right. \\
&\quad \times \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left\{ 4 - \left(e^{iqx} + e^{-iqx} \right) \left(e^{i\tilde{v}_j q t} + e^{-i\tilde{v}_j q t} \right) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{8L} \sum_{j=1}^N 4\pi p (KX)_{\nu j} X_{\nu j} \\
&\quad \left. \times \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left(e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) \left(e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \right] \quad (\text{B.3})
\end{aligned}$$

となる。ここで、 $g(\tilde{v}_j q)$ は

$$\begin{aligned}
g(\tilde{v}_j q) &= \frac{1}{e^{\tilde{v}_j q/T} - 1} \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} e^{-m\tilde{v}_j q/T} \quad (\text{B.4})
\end{aligned}$$

で表されるボーズ分布関数である。次に B は

$$\begin{aligned}
B &= \exp \left(\frac{1}{4} \sum_{j, j'=1}^N \left[X_{\nu j} \Theta_j(x, t) + p(KX)_{\nu j} \Phi_j(x, t), X_{\nu j'} \Theta_{j'}(0, 0) + p(KX)_{\nu j'} \Phi_{j'}(0, 0) \right] \right) \\
&= \exp \left[\frac{1}{8L} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{\nu j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 p^2 (KX)_{\nu j}^2 \tilde{v}_j \right\} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(e^{iqx} + e^{-iqx} \right) \left(e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{8L} \sum_{j=1}^N 4\pi p X_{\nu j} (KX)_{\nu j} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \left(e^{-i\tilde{v}_j q t} + e^{i\tilde{v}_j q t} \right) \right] \quad (\text{B.5})
\end{aligned}$$

である。したがって、

$$\begin{aligned}
& A \times B \\
&= \exp \left[-\frac{1}{8L} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{\nu j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 p^2 (KX)_{\nu j}^2 \tilde{v}_j \right\} \right. \\
&\quad \times \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left\{ 4 - \left(e^{iqx} + e^{-iqx} \right) \left(e^{i\tilde{v}_j qt} + e^{-i\tilde{v}_j qt} \right) \right\} \\
&\quad \left. + p \frac{\pi}{2L} \sum_{j=1}^N (KX)_{\nu j} X_{\nu j} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left(e^{-i\tilde{v}_j qt} - e^{i\tilde{v}_j qt} \right) \left(e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \right] \\
&\quad \times \exp \left[\frac{1}{8L} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{\nu j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 p^2 (KX)_{\nu j}^2 \tilde{v}_j \right\} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(e^{iqx} + e^{-iqx} \right) \left(e^{-i\tilde{v}_j qt} - e^{i\tilde{v}_j qt} \right) \right. \\
&\quad \left. + p \frac{\pi}{2L} \sum_{j=1}^N X_{\nu j} (KX)_{\nu j} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left(e^{iqx} - e^{-iqx} \right) \left(e^{-i\tilde{v}_j qt} + e^{i\tilde{v}_j qt} \right) \right] \\
&= \prod_{j=1}^N \left\{ \left(1 + i \frac{x + \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x + \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x + \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(-p)} \\
&\quad \times \left\{ \left(1 - i \frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x - \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x - \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(p)} \tag{B.6}
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\int_0^\infty dq q^{l-1} e^{-\alpha q} = \frac{(l-1)!}{\alpha^l} \tag{B.7}$$

$$\sinh(\pi x) = \pi x \prod_{n=1}^\infty \left(1 + \frac{x^2}{n^2} \right) \tag{B.8}$$

の関係を用いた。また、

$$A_{\nu,j}(p) = \frac{1}{8\pi\tilde{v}_j} \left(X_{\nu j} + 2\pi p (KX)_{\nu j} \tilde{v}_j \right)^2 \tag{B.9}$$

$$\beta \tilde{v}_j = \xi_j(T) \tag{B.10}$$

とおいた。以上のことから、

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{p,\nu}(x,t) \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0) \rangle &= \frac{1}{2\pi\alpha} \prod_{j=1}^N \left\{ \left(1 + i \frac{x + \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x + \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x + \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(-p)} \\
&\quad \times \left\{ \left(1 - i \frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x - \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x - \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(p)} \tag{B.11}
\end{aligned}$$

である。次に、 $\langle \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0)\psi_{p,\nu}(x,t) \rangle$ についても同様の計算を行うことで、

$$\begin{aligned} \langle \psi_{p,\nu}^\dagger(0,0)\psi_{p,\nu}(x,t) \rangle &= \frac{1}{2\pi\alpha} \prod_{j=1}^N \left\{ \left(1 - i \frac{x + \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x + \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x + \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(-p)} \\ &\quad \times \left\{ \left(1 + i \frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x - \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x - \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(p)} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

が得られる。これらを用いることで遅延グリーン関数 $G_{p,\nu}^R(x,t)$ は、

$$\begin{aligned} G_{p,\nu}^R(x,t) &= -i\theta(t) \frac{1}{2\pi\alpha} \left[\prod_{j=1}^N \left\{ \left(1 + i \frac{x + \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x + \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x + \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(-p)} \right. \\ &\quad \times \left\{ \left(1 - i \frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x - \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x - \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(p)} \\ &\quad + \prod_{j=1}^N \left\{ \left(1 - i \frac{x + \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x + \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x + \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(-p)} \\ &\quad \left. \times \left\{ \left(1 + i \frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha} \right) \frac{\xi_j(T)}{\pi(x - \tilde{v}_j t)} \sinh \left(\pi \frac{x - \tilde{v}_j t}{\xi_j(T)} \right) \right\}^{-A_{\nu,j}(p)} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

となる。

B.2 $T = 0$ でのスペクトル関数

$T = 0$ でのスペクトル関数について考える。まず、バンド構造 I についてスペクトル関数 $A_\uparrow(k, \omega)$ の外部の波数 k が $k \sim K_0$ の場合を考えると、 $A_\uparrow(k, \omega)$ は

$$A_\uparrow(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_0, \omega) + A_{-,2}(k - K_0, \omega) \quad (\text{B.14})$$

で与えられる。速度 v_1 のバンドからの寄与 $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ は $A_{+,1}(k - K_0, \omega) = I_{+,1}(k - K_0, \omega) + I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega)$ である。 $T = 0$ のとき、式 (3.8) は

$$W_j(x,t) = \frac{1}{1 - i \frac{x - \tilde{v}_j t}{\alpha}} = \frac{\alpha}{\alpha - i(x - \tilde{v}_j t)} \quad (\text{B.15})$$

と書き換えられることを用いると、 $I_{+,1}(k - K_0, \omega)$ は

$$\begin{aligned}
& I_{+,1}(k - K_0, \omega) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega t - (k - K_0)x)} F_{+,1}(x, t) \\
&= \frac{1}{4\pi^2 \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega t - (k - K_0)x)} \\
&\quad \times W_1^{\frac{1}{2}}(x, t) W_3^{A_{13}(+)}(x, t) W_3^{A_{13}(-)}(-x, t) W_4^{A_{14}(+)}(x, t) W_4^{A_{14}(-)}(-x, t) \\
&= \frac{\alpha^{\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+) + A_{13}(-) + A_{14}(-)}}{4\pi^2 \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega t - (k - K_0)x)} \\
&\quad \times \frac{1}{\{\alpha - i(x - \tilde{v}_1 t)\}^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{\{\alpha - i(x - \tilde{v}_3 t)\}^{A_{13}(+)}} \frac{1}{\{\alpha - i(x - \tilde{v}_4 t)\}^{A_{14}(+)}} \\
&\quad \times \frac{1}{\{\alpha + i(x + \tilde{v}_3 t)\}^{A_{13}(-)}} \frac{1}{\{\alpha + i(x + \tilde{v}_4 t)\}^{A_{14}(-)}} \tag{B.16}
\end{aligned}$$

となる。ここで、被積分関数について、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{A_1^{\alpha_1} \cdots A_N^{\alpha_N}} &= \frac{\Gamma(\alpha_1 + \cdots + \alpha_N)}{\Gamma(\alpha_1) \cdots \Gamma(\alpha_N)} \int_0^1 \prod_{i=1}^N dx_i \delta(1 - \sum_{j=1}^N x_j) \\
&\quad \times \frac{x_1^{\alpha_1 - 1} x_2^{\alpha_2 - 1} \cdots x_N^{\alpha_N - 1}}{(A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_N x_N)^{\alpha_1 + \alpha_2 + \cdots + \alpha_N}} \tag{B.17}
\end{aligned}$$

であること [50] を用いると、

$$\begin{aligned}
& I_{+,1}(k - K_0, \omega) \\
&= \frac{\alpha^{\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+) + A_{13}(-) + A_{14}(-)}}{4\pi^2 \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega t - (k - K_0)x)} \\
&\quad \times \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+))}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{13}(+))\Gamma(A_{14}(+))} \int_0^1 du_1 du_2 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) \\
&\quad \times \frac{u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{13}(+) - 1} u_3^{A_{14}(+) - 1}}{\{\alpha + i(u_1 \tilde{v}_1 + u_2 \tilde{v}_3 + u_3 \tilde{v}_4)t - ix\}^{\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+)}} \\
&\quad \times \frac{\Gamma(A_{13}(-) + A_{14}(-))}{\Gamma(A_{13}(-))\Gamma(A_{14}(-))} \int_0^1 dw_1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) \\
&\quad \times \frac{w_1^{A_{13}(-) - 1} w_2^{A_{14}(-) - 1}}{\{\alpha + i(w_1 \tilde{v}_3 + w_2 \tilde{v}_4)t + ix\}^{A_{13}(-) + A_{14}(-)}} \tag{B.18}
\end{aligned}$$

となり、 x と t についての積分を実行すると、

$$\begin{aligned}
& I_{+,1}(k - K_0, \omega) \\
&= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+) + A_{13}(-) + A_{14}(-)}}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{13}(+))\Gamma(A_{14}(+))\Gamma(A_{13}(-))\Gamma(A_{14}(-))} \\
&\times \int_0^1 du_1 du_2 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{13}(+) - 1} u_3^{A_{14}(+) - 1} \\
&\times \int_0^1 dw_1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{13}(-) - 1} w_2^{A_{14}(-) - 1} \frac{1}{V_+ + V_-} \\
&\times \left(\frac{\omega + V_-(k - K_0)}{V_+ + V_-} \right)^{-\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+)} e^{-\alpha \frac{\omega + V_-(k - K_0)}{V_+ + V_-}} \theta(\omega + V_-(k - K_0)) \\
&\times \left(\frac{\omega - V_+(k - K_0)}{V_+ + V_-} \right)^{A_{13}(-) + A_{14}(-) - 1} e^{-\alpha \frac{\omega - V_+(k - K_0)}{V_+ + V_-}} \theta(\omega - V_+(k - K_0)) \quad (\text{B.19})
\end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $V_+ = u_1 \tilde{v}_1 + u_2 \tilde{v}_3 + u_3 \tilde{v}_4$ 、 $V_- = w_1 \tilde{v}_3 + w_2 \tilde{v}_4$ とおいた。その結果を用いると、 $I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega)$ は

$$\begin{aligned}
& I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega) \\
&= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+) + A_{13}(-) + A_{14}(-)}}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{13}(+))\Gamma(A_{14}(+))\Gamma(A_{13}(-))\Gamma(A_{14}(-))} \\
&\times \int_0^1 du_1 du_2 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{13}(+) - 1} u_3^{A_{14}(+) - 1} \\
&\times \int_0^1 dw_1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{13}(-) - 1} w_2^{A_{14}(-) - 1} \frac{1}{V_+ + V_-} \\
&\times \left(\frac{-\omega - V_-(k - K_0)}{V_+ + V_-} \right)^{-\frac{1}{2} + A_{13}(+) + A_{14}(+)} e^{\alpha \frac{\omega + V_-(k - K_0)}{V_+ + V_-}} \theta(-\omega - V_-(k - K_0)) \\
&\times \left(\frac{-\omega + V_+(k - K_0)}{V_+ + V_-} \right)^{A_{13}(-) + A_{14}(-) - 1} e^{\alpha \frac{\omega - V_+(k - K_0)}{V_+ + V_-}} \theta(-\omega + V_+(k - K_0)) \quad (\text{B.20})
\end{aligned}$$

となる。

$k - K_0 > 0$ の場合、階段関数の引数より、 $I_{+,1}(k - K_0, \omega)$ は $\omega > v_-(k - K_0)$ 、 $I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega)$ は $\omega < -v_-(k - K_0)$ のみ 0 でない値を持つことがわかる。このとき、 V_+ と V_- の最小値はそれぞれ積分範囲の下限を代入することにより v_- となることに注意する。また、 $I_{+,1}(k - K_0, \omega)$ では、 $\omega = v_1(k - K_0)$ 、 $v_+(k - K_0)$ で、 $I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega)$ では $\omega = -v_+(k - K_0)$ で特異な振る舞いが現れる。すなわち、これらの和で表される $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ は $k - K_0 > 0$ において $\omega > v_-(k - K_0)$ 、 $\omega < -v_-(k - K_0)$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = v_1(k - K_0)$ 、 $v_+(k - K_0)$ 、 $-v_+(k - K_0)$ に特異点を持つ。また、相互作用が無い場合は $A_{+,1}(k - K_0, \omega) = \delta(\omega - v_1(k - K_0))$

であることから、 $I_{+,1}(k - K_0, \omega)$ がメイン、 $I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega)$ がシャドウに寄与すると言える。一方で、 $k - K_0 < 0$ の場合には、 $A_{+,1}(k - K_0, \omega)$ は $\omega > v_-|k - K_0|$ 、 $\omega < -v_-|k - K_0|$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = -v_+|k - K_0|$ 、 $-v_+|k - K_0|$ 、 $v_+|k - K_0|$ に特異点を持つ。また、 $I_{+,1}(-(k - K_0), -\omega)$ がメイン、 $I_{+,1}(k - K_0, \omega)$ がシャドウに寄与すると言える。

次に、速度 $-v_2$ のバンドからの寄与 $A_{-,2}(k - K_0, \omega) = I_{-,2}(k - K_0, \omega) + I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega)$ について考える。 $I_{-,2}(k - K_0, \omega)$ 、 $I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega)$ は $I_{+,1}(k - K_0, \omega)$ と同様の方法で、

$$\begin{aligned}
& I_{-,2}(k - K_0, \omega) \\
&= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2} + A_{23}(+) + A_{24}(+) + A_{23}(-) + A_{24}(-)}}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{23}(+))\Gamma(A_{24}(+))\Gamma(A_{23}(-))\Gamma(A_{24}(-))} \\
&\times \int_0^1 du_1 du_2 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{23}(+) - 1} u_3^{A_{24}(+) - 1} \\
&\times \int_0^1 dw_1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{23}(-) - 1} w_2^{A_{24}(-) - 1} \frac{1}{V'_+ + V_-} \\
&\times \left(\frac{\omega - V_-(k - K_0)}{V'_+ + V_-} \right)^{-\frac{1}{2} + A_{23}(+) + A_{24}(+)} e^{-\alpha \frac{\omega - V_-(k - K_0)}{V'_+ + V_-}} \theta(\omega - V_-(k - K_0)) \\
&\times \left(\frac{\omega + V'_+(k - K_0)}{V'_+ + V_-} \right)^{A_{23}(-) + A_{24}(-) - 1} e^{-\alpha \frac{\omega + V'_+(k - K_0)}{V'_+ + V_-}} \theta(\omega + V'_+(k - K_0)) \quad (\text{B.21})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega) \\
&= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2} + A_{23}(+) + A_{24}(+) + A_{23}(-) + A_{24}(-)}}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{23}(+))\Gamma(A_{24}(+))\Gamma(A_{23}(-))\Gamma(A_{24}(-))} \\
&\times \int_0^1 du_1 du_2 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{23}(+) - 1} u_3^{A_{24}(+) - 1} \\
&\times \int_0^1 dw_1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{23}(-) - 1} w_2^{A_{24}(-) - 1} \frac{1}{V'_+ + V_-} \\
&\times \left(\frac{-\omega + V_-(k - K_0)}{V'_+ + V_-} \right)^{-\frac{1}{2} + A_{23}(+) + A_{24}(+)} e^{\alpha \frac{\omega - V_-(k - K_0)}{V'_+ + V_-}} \theta(-\omega + V_-(k - K_0)) \\
&\times \left(\frac{-\omega - V'_+(k - K_0)}{V'_+ + V_-} \right)^{A_{23}(-) + A_{24}(-) - 1} e^{\alpha \frac{\omega + V'_+(k - K_0)}{V'_+ + V_-}} \theta(-\omega - V'_+(k - K_0)) \quad (\text{B.22})
\end{aligned}$$

と求められる。ここで、 $V'_+ = u_1 \tilde{v}_2 + u_2 \tilde{v}_3 + u_3 \tilde{v}_4$ とおいた。

$k - K_0 > 0$ の場合、階段関数の引数より、 $I_{-,2}(k - K_0, \omega)$ は $\omega > v_-(k - K_0)$ 、 $I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega)$ は $\omega < -v_2(k - K_0)$ のみ 0 でない値を持つことがわかる。このと

き、 V_- の最小値は v_- 、 V'_+ の最小値は v_2 となることに注意する。また、 $I_{-,2}(k - K_0, \omega)$ では、 $\omega = v_+(k - K_0)$ で、 $I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega)$ では $\omega = -v_+(k - K_0)$ 、 $-v_-(k - K_0)$ で特異な振る舞いが現れる。すなわち、これらの和で表される $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ は $k - K_0 > 0$ において $\omega > v_-(k - K_0)$ 、 $\omega < -v_2(k - K_0)$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = v_+(k - K_0)$ 、 $-v_+(k - K_0)$ 、 $-v_-(k - K_0)$ に特異点を持つ。また、相互作用が無い場合は $A_{-,2}(k - K_0, \omega) = \delta(\omega + v_2(k - K_0))$ であることから、 $I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega)$ がメイン、 $I_{-,2}(k - K_0, \omega)$ がシャドウに寄与すると言える。一方で、 $k - K_0 < 0$ の場合には、 $A_{-,2}(k - K_0, \omega)$ は $\omega > v_2|k - K_0|$ 、 $\omega < -v_-|k - K_0|$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = v_+|k - K_0|$ 、 $v_-|k - K_0|$ 、 $-v_+|k - K_0|$ に特異点を持つ。また、 $I_{-,2}(k - K_0, \omega)$ がメイン、 $I_{-,2}(-(k - K_0), -\omega)$ がシャドウに寄与すると言える。

次にバンド構造 II について考える。スペクトル関数 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ の外部の波数 k が $k \sim K_1, K_2$ の場合を考えると、 $A_{\uparrow}(k, \omega)$ は

$$A_{\uparrow}(k, \omega) = A_{+,1}(k - K_1, \omega) + 2A_{-,2}(k - K_2, \omega) \quad (\text{B.23})$$

となる。速度 v_1 のバンドからの寄与 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ は $A_{+,1}(k - K_1, \omega) = I_{+,1}(k - K_1, \omega) + I_{+,1}(-(k - K_1), -\omega)$ であり、各項は、

$$\begin{aligned} & I_{+,1}(k - K_1, \omega) \\ &= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2} + A_{15}(+) + A_{16}(+) + A_{15}(-) + A_{16}(-)}}{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{15}(+))\Gamma(A_{16}(+))\Gamma(A_{15}(-))\Gamma(A_{16}(-))} \\ & \times \int_0^1 du_1 \int_0^1 du_2 \int_0^1 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{15}(+) - 1} u_3^{A_{16}(+) - 1} \\ & \times \int_0^1 dw_1 \int_0^1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{15}(-) - 1} w_2^{A_{16}(-) - 1} \frac{1}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \\ & \times \left(\frac{\omega + V_-^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{-\frac{1}{2} + A_{15}(+) + A_{16}(+)} e^{-\alpha \left(\frac{\omega + V_-^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(\omega + V_-^{\text{II}}(k - K_1)) \\ & \times \left(\frac{\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{A_{15}(-) + A_{16}(-) - 1} e^{-\alpha \left(\frac{\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_1)) \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

$$\begin{aligned}
& I_{+,1}(-(k - K_1), -\omega) \\
& \quad \alpha^{-\frac{1}{2} + A_{15}(+) + A_{16}(+) + A_{15}(-) + A_{16}(-)} \\
& = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(A_{15}(+))\Gamma(A_{16}(+))\Gamma(A_{15}(-))\Gamma(A_{16}(-))}{\alpha^{-\frac{1}{2} + A_{15}(+) + A_{16}(+) + A_{15}(-) + A_{16}(-)}} \\
& \quad \times \int_0^1 du_1 \int_0^1 du_2 \int_0^1 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{2}} u_2^{A_{15}(+) - 1} u_3^{A_{16}(+) - 1} \\
& \quad \times \int_0^1 dw_1 \int_0^1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{15}(-) - 1} w_2^{A_{16}(-) - 1} \frac{1}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \\
& \quad \times \left(\frac{-\omega - V_-^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{-\frac{1}{2} + A_{15}(+) + A_{16}(+)} e^{\alpha \left(\frac{\omega + V_+^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(-\omega - V_-^{\text{II}}(k - K_1)) \\
& \quad \times \left(\frac{-\omega + V_+^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{A_{15}(-) + A_{16}(-) - 1} e^{\alpha \left(\frac{-\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_1)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(-\omega + V_+^{\text{II}}(k - K_1))
\end{aligned} \tag{B.25}$$

と求められる。ここで、 $V_+^{\text{II}} = u_1 \tilde{v}_1 + u_2 \tilde{v}_5 + u_3 \tilde{v}_6$ 、 $V_-^{\text{II}} = w_1 \tilde{v}_5 + w_2 \tilde{v}_6$ である。

$k - K_1 > 0$ の場合、階段関数の引数より、 $I_{+,1}(k - K_1, \omega)$ は $\omega > v_-(k - K_1)$ 、 $I_{+,1}(-(k - K_1), -\omega)$ は $\omega < -v_-(k - K_1)$ のみ 0 でない値を持つことがわかる。このとき、 V_+^{II} と V_-^{II} の最小値はそれぞれ積分範囲の下限を代入することにより v_- となることに注意する。また、 $I_{+,1}(k - K_1, \omega)$ では、 $\omega = v_1(k - K_1)$ 、 $v_+(k - K_1)$ で、 $I_{+,1}(-(k - K_1), -\omega)$ では $\omega = -v_+(k - K_1)$ で特異な振る舞いが現れる。すなわち、これらの和で表される $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ は $k - K_1 > 0$ において $\omega > v_-(k - K_1)$ 、 $\omega < -v_-(k - K_1)$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = v_1(k - K_1)$ 、 $v_+(k - K_1)$ 、 $-v_+(k - K_1)$ に特異点を持つ。また、相互作用が無い場合は $A_{+,1}(k - K_1, \omega) = \delta(\omega - v_1(k - K_1))$ であることから、 $I_{+,1}(k - K_1, \omega)$ がメイン、 $I_{+,1}(-(k - K_1), -\omega)$ がシャドウに寄与すると言える。一方で、 $k - K_1 < 0$ の場合には、 $A_{+,1}(k - K_1, \omega)$ は $\omega > v_-|k - K_1|$ 、 $\omega < -v_-|k - K_1|$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = -v_1|k - K_1|$ 、 $-v_+|k - K_1|$ 、 $v_+|k - K_1|$ に特異点を持つ。また、 $I_{+,1}(-(k - K_1), -\omega)$ がメイン、 $I_{+,1}(k - K_1, \omega)$ がシャドウに寄与すると言える。

次に、速度 $-v_2$ のバンドからの寄与 $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = I_{-,2}(k - K_2, \omega) + I_{-,2}(-(k -$

$K_2), -\omega)$ について考える。各項は

$$\begin{aligned}
& I_{-,2}(k - K_2, \omega) \\
&= \frac{\alpha^{-\frac{1}{4} + A_{25}(+) + A_{26}(+) + A_{25}(-) + A_{26}(-)}}{\Gamma(\frac{3}{4})\Gamma(A_{25}(+))\Gamma(A_{26}(+))\Gamma(A_{25}(-))\Gamma(A_{26}(-))} \\
&\times \int_0^1 du_1 \int_0^1 du_2 \int_0^1 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{4}} u_2^{A_{25}(+)-1} u_3^{A_{26}(+)-1} \\
&\times \int_0^1 dw_1 \int_0^1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{25}(-)-1} w_2^{A_{26}(-)-1} \frac{1}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \\
&\times \left(\frac{\omega - V_-^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{-\frac{1}{4} + A_{25}(+) + A_{26}(+)} e^{-\alpha \left(\frac{\omega - V_-^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(\omega - V_-^{\text{II}}(k - K_2)) \\
&\times \left(\frac{\omega + V_+^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{A_{25}(-) + A_{26}(-) - 1} e^{-\alpha \left(\frac{\omega + V_+^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(\omega + V_+^{\text{II}}(k - K_2))
\end{aligned} \tag{B.26}$$

$$\begin{aligned}
& I_{-,2}(-(k - K_2), -\omega) \\
&= \frac{\alpha^{-\frac{1}{4} + A_{25}(+) + A_{26}(+) + A_{25}(-) + A_{26}(-)}}{\Gamma(\frac{3}{4})\Gamma(A_{25}(+))\Gamma(A_{26}(+))\Gamma(A_{25}(-))\Gamma(A_{26}(-))} \\
&\times \int_0^1 du_1 \int_0^1 du_2 \int_0^1 du_3 \delta(1 - u_1 - u_2 - u_3) u_1^{-\frac{1}{4}} u_2^{A_{25}(+)-1} u_3^{A_{26}(+)-1} \\
&\times \int_0^1 dw_1 \int_0^1 dw_2 \delta(1 - w_1 - w_2) w_1^{A_{25}(-)-1} w_2^{A_{26}(-)-1} \frac{1}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \\
&\times \left(\frac{-\omega + V_-^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{-\frac{1}{4} + A_{25}(+) + A_{26}(+)} e^{\alpha \left(\frac{-\omega + V_-^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(-\omega + V_-^{\text{II}}(k - K_2)) \\
&\times \left(\frac{-\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)^{A_{25}(-) + A_{26}(-) - 1} e^{\alpha \left(\frac{-\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_2)}{V_+^{\text{II}} + V_-^{\text{II}}} \right)} \theta(-\omega - V_+^{\text{II}}(k - K_2))
\end{aligned} \tag{B.27}$$

ここで、 $V_+^{\text{II}} = u_1 \tilde{v}_2 + u_2 \tilde{v}_5 + u_3 \tilde{v}_6$ とおいた。 $k - K_2 > 0$ の場合、階段関数の部分を見ると、 $I_{-,2}(k - K_2, \omega)$ は $\omega > v_-(k - K_2)$ 、 $I_{-,2}(-(k - K_2), -\omega)$ は $\omega < -v_2(k - K_2)$ のみ 0 でない値を持つことがわかる。このとき、 V_+^{II} の最小値は v_2 で、 V_-^{II} の最小値が v_- となることに注意する。また、 $I_{-,2}(k - K_2, \omega)$ では、 $\omega = v_+(k - K_2)$ で、 $I_{-,2}(-(k - K_2), -\omega)$ では $\omega = -v_+(k - K_2)$ 、 $-v_-(k - K_2)$ で特異な振る舞いが現れる。すなわち、これらの和で表される $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ は $k - K_2 > 0$ において $\omega > v_-(k - K_2)$ 、 $\omega < -v_2(k - K_2)$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = v_+(k - K_2)$ 、 $-v_+(k - K_2)$ 、 $-v_-(k - K_2)$ に特異点を持つ。また、相互作用が無い場合は $A_{-,2}(k - K_2, \omega) = \delta(\omega + v_2(k - K_2))$ であることから、 $I_{-,2}(-(k - K_2), -\omega)$ がメイン、 $I_{-,2}(k - K_2, \omega)$ がシャドウに寄与すると言える。

一方で、 $k - K_2 < 0$ の場合には、 $A_{-,2}(k - K_2, \omega)$ は $\omega > v_2|k - K_2|$ 、 $\omega < -v_-|k - K_2|$ の範囲でのみ 0 でない値を持ち、 $\omega = -v_+|k - K_2|$ 、 $v_+|k - K_2|$ 、 $v_-|k - K_2|$ に特異点を持つ。また、 $I_{-,2}(k - K_2, \omega)$ がメイン、 $I_{-,2}(-(k - K_2), -\omega)$ がシャドウに寄与すると言える。

付録 C

メモリー関数の計算の詳細

メモリー関数 $M(\omega)$ は式 (4.12) で表される。メモリー関数を求める際に必要となる $F = [j, \mathcal{H} + \mathcal{H}_{\text{imp}}]$ は、

$$F = [j, \mathcal{H} + \mathcal{H}_{\text{imp}}] = [j, \mathcal{H}_k + \mathcal{H}_{\text{int}}] + [j, \mathcal{H}_{\text{imp}}] \quad (\text{C.1})$$

である。第 1 項は

$$\begin{aligned} [j, \mathcal{H}_k + \mathcal{H}_{\text{int}}] &= \left[j, \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \int dx \left\{ \Xi_j^2 + \tilde{v}_j^2 (\partial_x \Theta_j)^2 \right\} \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

となる。

一方、第 2 項 $[j, \mathcal{H}_{\text{imp}}]$ は、有限の値で残る。まず、バンド構造 I の結果を紹介する。

$$\begin{aligned}
F &= [j, \mathcal{H}_{\text{imp}}] \\
&= \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p1} \eta_{-p2}}{4\pi^2 \alpha} \\
&\quad \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{1j'} + X_{2j'}) \Theta_{j'}(x, t) + p \left((KX)_{1j'} - (KX)_{2j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
&\quad + \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p2} \eta_{-p1}}{4\pi^2 \alpha} \\
&\quad \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{1j'} + X_{2j'}) \Theta_{j'}(x, t) - p \left((KX)_{1j'} - (KX)_{2j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
&\quad + \left(\frac{1}{K_{33}} + \frac{1}{K_{44}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p3} \eta_{-p4}}{4\pi^2 \alpha} \\
&\quad \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{3j'} + X_{4j'}) \Theta_{j'}(x, t) + p \left((KX)_{3j'} - (KX)_{4j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
&\quad + \left(\frac{1}{K_{33}} + \frac{1}{K_{44}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p4} \eta_{-p3}}{4\pi^2 \alpha} \\
&\quad \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{3j'} + X_{4j'}) \Theta_{j'}(x, t) - p \left((KX)_{3j'} - (KX)_{4j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
&\quad + \frac{1}{K_{11}} \xi(x) \frac{\eta_{+,1} \eta_{-,1}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{1j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad + \frac{1}{K_{33}} \xi(x) \frac{\eta_{+,3} \eta_{-,3}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{3j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad - \frac{1}{K_{11}} \xi^*(x) \frac{\eta_{-,1} \eta_{+,1}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{1j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad - \frac{1}{K_{33}} \xi^*(x) \frac{\eta_{-,3} \eta_{+,3}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{3j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad + \frac{1}{K_{22}} \lambda(x) \frac{\eta_{+,2} \eta_{-,2}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{2j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad + \frac{1}{K_{44}} \lambda(x) \frac{\eta_{+,4} \eta_{-,4}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{4j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad - \frac{1}{K_{22}} \lambda^*(x) \frac{\eta_{-,2} \eta_{+,2}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{2j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
&\quad - \frac{1}{K_{44}} \lambda^*(x) \frac{\eta_{-,4} \eta_{+,4}}{2\pi^2 \alpha} \exp \left[i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{4j'} \Theta_{j'}(x, t) \right]
\end{aligned} \tag{C.3}$$

となる。ここで、演算子 \hat{A} 、 \hat{B} の交換関係が $[\hat{A}, \hat{B}] = c$ (c は定数) であるとき、 $[e^{\hat{A}}, \hat{B}]$ は

$$[e^{\hat{A}}, \hat{B}] = ce^{\hat{A}} \quad (\text{C.4})$$

であること、行列 X と K には $\sum_j X_{\nu j} X_{\lambda j} = \delta_{\nu\lambda}/K_{\lambda\lambda}$ の関係があることを用いた。

次に、この $F(x, t)$ を用いて式 (4.12) に現れる $\langle F; F \rangle_\omega^0$ は、

$$\begin{aligned} & \langle F; F \rangle_\omega^0 \\ &= -i \int dx \int_0^\infty dt e^{(i\omega - \eta)t} \left\langle [F(x, t), F(0, 0)] \right\rangle_0 \\ &= -i \int_0^\infty dt e^{(i\omega - \eta)t} \\ & \quad \times \left\{ -2 \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 D_1 \frac{i}{2\pi^4 \alpha^2} \text{Im} \right. \\ & \quad \times \exp \left[-\frac{1}{2L} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{1j} + X_{2j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\} \right. \\ & \quad \times \left. \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left\{ g(\tilde{v}_j q) \left(2 - e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) + \left(1 - e^{-i\tilde{v}_j q t} \right) \right\} \right] \\ & \quad - 4D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{i}{2\pi^4 \alpha^2} \text{Im} \\ & \quad \times \exp \left[-\sum_{j=1}^N \frac{X_{1j}^2}{\tilde{v}_j} \frac{1}{L} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left\{ \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left(2 - e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) + e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right\} \right] \\ & \quad - 4D_2' \frac{1}{K_{22}^2} \frac{i}{2\pi^4 \alpha^2} \text{Im} \\ & \quad \times \left. \exp \left[-\sum_{j=1}^N \frac{X_{2j}^2}{\tilde{v}_j} \frac{1}{L} \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left\{ \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left(2 - e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) + e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right\} \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

ここで、式 (2.16) より $K_{11} = K_{33}$ 、 $K_{22} = K_{44}$ であり、式 (2.43)、式 (2.44) より、

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{1j} + X_{2j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\} \\ &= \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{3j} + X_{4j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 \tilde{v}_j \left((KX)_{3j} - (KX)_{4j} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{X_{1j}^2}{\tilde{v}_j} = \sum_{j=1}^N \frac{X_{3j}^2}{\tilde{v}_j} \quad (\text{C.7})$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{X_{2j}^2}{\tilde{v}_j} = \sum_{j=1}^N \frac{X_{4j}^2}{\tilde{v}_j} \quad (\text{C.8})$$

であることを用いた。また、期待値を取る際に $\langle \dots \rangle_{\text{imp}}$ で表される確率場についての平均が現れるが、例えば、 $\eta(x)\eta(y)$ については

$$\langle \eta(x)\eta(y) \rangle_{\text{imp}} = \frac{\int \mathcal{D}\eta P_\eta \eta(x)\eta(y)}{\int \mathcal{D}\eta P_\eta} \quad (\text{C.9})$$

と表される。 $\eta(x)$ は実数より $\eta(x) = \eta^*(x)$ であるので、フーリエ変換 $\eta(x) = \sum_q \eta_q e^{iqx}$ で与えられる η_q は $\eta_q = \eta_{-q}^*$ となり、複素数であることがわかる。 η_q を実部と虚部に分けて $\eta_q = \eta'_q + i\eta''_q$ と書くと、複素共役をとって $\eta_q^* = \eta'_q - i\eta''_q \rightarrow \eta_{-q}^* = \eta'_{-q} - i\eta''_{-q} \rightarrow \eta_q = \eta'_{-q} - i\eta''_{-q}$ と書き換えることができる。したがって、 $\eta'_q = \eta'_{-q}$ 、 $\eta''_q = -\eta''_{-q}$ の関係があることがわかる。このことを用いると、確率分布は、

$$\begin{aligned} P_\eta &= \exp \left[-\frac{1}{2D_1} \int dx \eta^2(x) \right] \\ &= \exp \left[-\frac{L}{D_1} \sum_{q>0} (\eta_q'^2 + \eta_q''^2) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

となる。 η'_q 、 η''_q は $q > 0$ の範囲のみを考えればよいので η についての経路積分は

$$\int \mathcal{D}\eta = \int \left(\prod_{q>0} d\eta'_q d\eta''_q \right) \quad (\text{C.11})$$

である。これらを用いると $\langle \eta(x)\eta(y) \rangle_{\text{imp}}$ の分母は、

$$\int \mathcal{D}\eta P_\eta = \prod_{q>0} \frac{\pi D_1}{L} \quad (\text{C.12})$$

となる。次に分子は、

$$\int \mathcal{D}\eta P_\eta \eta(x)\eta(y) = \frac{D_1}{L} \sum_{q>0} \left(e^{iq(x-y)} + e^{-iq(x-y)} \right) \prod_{q'>0} \frac{\pi D_1}{L} \quad (\text{C.13})$$

ここで、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{C.14})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n} e^{-ax^2} = \frac{(2n-1)!!}{2^n a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{C.15})$$

を用いた。したがって、

$$\begin{aligned}\langle \eta(x)\eta(y) \rangle_{\text{imp}} &= \frac{D_1}{L} \sum_{q>0} \left(e^{iq(x-y)} + e^{-iq(x-y)} \right) \\ &= D_1 \delta(x-y)\end{aligned}\quad (\text{C.16})$$

である。次に、

$$\langle \xi(x)\xi^*(y) \rangle_{\text{imp}} = \frac{\int \mathcal{D}\xi P_\xi \xi(x)\xi^*(y)}{\int \mathcal{D}\xi P_\xi} \quad (\text{C.17})$$

について考える。 $\xi(x)$ のフーリエ変換 $\xi(x) = \sum_q \xi_q e^{iqx}$ で与えられる ξ_q を実部と虚部にわけて $\xi_q = \xi'_q + i\xi''_q$ と書くと、複素共役をとって $\xi_q^* = \xi'_q - i\xi''_q$ となる。このことを用いると、 η についての平均と同様の計算を行うことで、

$$\langle \xi(x)\xi^*(y) \rangle_{\text{imp}} = D_2 \delta(x-y) \quad (\text{C.18})$$

となる。また、 λ についても同様に考えて、

$$\begin{aligned}\langle \lambda(x)\lambda^*(y) \rangle_{\text{imp}} &= \frac{\int \mathcal{D}\lambda P_\lambda \lambda(x)\lambda^*(y)}{\int \mathcal{D}\lambda P_\lambda} \\ &= D'_2 \delta(x-y)\end{aligned}\quad (\text{C.19})$$

となる。次に期待値部分を考える。例えばある関数 f について、

$$\langle [f(0,t), f(0,0)] \rangle = 2i \text{Im} \langle f(0,t)f(0,0) \rangle \quad (\text{C.20})$$

の関係があることから、交換関係を含む期待値の計算を行うためには、交換関係を含まない期待値の計算をすればよいことがわかる。

次に、 q の和については、

$$\begin{aligned}& \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left\{ g(\tilde{v}_j q) \left(2 - e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) + \left(1 - e^{-i\tilde{v}_j q t} \right) \right\} \\ & \simeq \frac{L}{2\pi} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(1 + \left(\frac{t}{m\beta} \right)^2 \right) + \log \left(1 + \frac{it}{\alpha_c} \right) \right\}\end{aligned}\quad (\text{C.21})$$

$$\begin{aligned}& \sum_{q>0} \frac{1}{q} \left\{ \left(2g(\tilde{v}_j q) + 1 \right) \left(2 - e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right) + e^{-i\tilde{v}_j q t} - e^{i\tilde{v}_j q t} \right\} \\ & \simeq 2 \frac{L}{2\pi} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \log \left(1 + \left(\frac{t}{m\beta} \right)^2 \right) + \log \left(1 - \frac{it}{\alpha_c} \right) \right\}\end{aligned}\quad (\text{C.22})$$

となる。ここで、 $\beta = 1/T$ であり、 $\alpha_c = \alpha/v_0$ で表されるエネルギーカットオフを導入した。したがって、

$$\begin{aligned}
& \langle F; F \rangle_\omega^0 \\
&= -i \int_0^\infty dt e^{(i\omega - \eta)t} \\
& \times \left\{ 2 \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 D_1 \frac{i}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{\sinh(\pi T t)}{\pi T t} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j} \left(\frac{t}{\alpha_c} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j \right) \right. \\
& \quad + 4D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{i}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{\sinh(\pi T t)}{\pi T t} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \left(\frac{t}{\alpha_c} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \\
& \quad \left. + 4D_2' \frac{1}{K_{22}^2} \frac{i}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{\sinh(\pi T t)}{\pi T t} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \left(\frac{t}{\alpha_c} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \right\} \\
&= 2 \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 D_1 \frac{1}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j} \frac{1}{2\pi T} \\
& \quad \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j \right) \\
& \quad + 4D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{1}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \frac{1}{2\pi T} \\
& \quad \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \\
& \quad + 4D_2' \frac{1}{K_{22}^2} \frac{1}{2\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \frac{1}{2\pi T} \\
& \quad \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \tag{C.23}
\end{aligned}$$

が得られる。ここで、

$$\sinh(\pi x) = \pi x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x^2}{n^2} \right) \tag{C.24}$$

であること、極形式で $\alpha_c \rightarrow 0$ とした際に偏角が $\theta \rightarrow \pi/2$ となることから

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{it}{\alpha_c}\right)^{-\frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{1j}+X_{2j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\}} \\ &= \left(\frac{t}{\alpha_c}\right)^{-\frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{1j}+X_{2j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\}} \\ & \quad \times e^{-\frac{i}{8} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{(X_{1j}+X_{2j})^2}{\tilde{v}_j} + 4\pi^2 \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\}} \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{it}{\alpha_c}\right)^{-\sum_{j=1}^N \frac{X_{1j}^2}{\pi \tilde{v}_j}} \\ &= \left(\frac{t}{\alpha_c}\right)^{-\sum_{j=1}^N \frac{X_{1j}^2}{\pi \tilde{v}_j}} e^{-i \sum_{j=1}^N \frac{X_{1j}^2}{2\tilde{v}_j}} \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

であることを用いた。さらに、

$$Y_j = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{1j} + X_{2j})^2}{2\pi \tilde{v}_j} + 2\pi \tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\} \quad (\text{C.27})$$

$$Y_j^{(1)} = \frac{X_{1j}^2}{\pi \tilde{v}_j} \quad (\text{C.28})$$

$$Y_j^{(2)} = \frac{X_{2j}^2}{\pi \tilde{v}_j} \quad (\text{C.29})$$

とおいた。さらに最後の変形では、

$$\int_0^\infty dt e^{i\omega t} \left(\sinh(\pi T t) \right)^{-Y} = 2^Y \frac{1}{2\pi T} B\left(\frac{\pi Y T - i\omega}{2\pi T}, 1 - Y \right) \quad (\text{C.30})$$

の関係を用いた。

以上のことから、バンド構造 I の場合、メモリー関数の分子に現れる $\langle F; F \rangle_\omega^0 - \langle F; F \rangle_{\omega=0}^0$

は

$$\begin{aligned}
& \langle F; F \rangle_{\omega}^0 - \langle F; F \rangle_{\omega=0}^0 \\
&= \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \frac{D_1}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j} \frac{1}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j \right) \right] \\
&+ \frac{2}{K_{11}^2} \frac{D_2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \frac{1}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \right] \\
&+ \frac{2}{K_{22}^2} \frac{D'_2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) 2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \frac{1}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \right]
\end{aligned} \tag{C.31}$$

となる。

一方、バンド構造 II については、同様の詳細な計算を行うと

$$\begin{aligned}
& F \\
= & \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p1} \eta_{-p2}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{1j'} + X_{2j'}) \Theta_{j'}(x, t) + p \left((KX)_{1j'} - (KX)_{2j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p2} \eta_{-p1}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{2j'} + X_{1j'}) \Theta_{j'}(x, t) - p \left((KX)_{1j'} - (KX)_{2j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{33}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p1} \eta_{-p3}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{1j'} + X_{3j'}) \Theta_{j'}(x, t) + p \left((KX)_{1j'} - (KX)_{3j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{33}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p3} \eta_{-p1}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{3j'} + X_{1j'}) \Theta_{j'}(x, t) - p \left((KX)_{1j'} - (KX)_{3j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{44}} + \frac{1}{K_{55}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p4} \eta_{-p5}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{4j'} + X_{5j'}) \Theta_{j'}(x, t) + p \left((KX)_{4j'} - (KX)_{5j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{44}} + \frac{1}{K_{55}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p5} \eta_{-p4}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{5j'} + X_{4j'}) \Theta_{j'}(x, t) - p \left((KX)_{4j'} - (KX)_{5j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{44}} + \frac{1}{K_{66}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p4} \eta_{-p6}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{4j'} + X_{6j'}) \Theta_{j'}(x, t) + p \left((KX)_{4j'} - (KX)_{6j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{44}} + \frac{1}{K_{66}} \right) \eta(x) \sum_p p \frac{\eta_{p6} \eta_{-p4}}{4\pi^2 \alpha} \\
& \times \exp \left[-i \frac{p}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{6j'} + X_{4j'}) \Theta_{j'}(x, t) - p \left((KX)_{4j'} - (KX)_{6j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{K_{11}} \xi(x) \frac{\eta_{+,1}\eta_{-,1}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{1j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& + \frac{1}{K_{44}} \xi(x) \frac{\eta_{+,4}\eta_{-,4}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{4j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& - \frac{1}{K_{11}} \xi^*(x) \frac{\eta_{-,1}\eta_{+,1}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{1j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& - \frac{1}{K_{44}} \xi^*(x) \frac{\eta_{-,4}\eta_{+,4}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{4j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& + \frac{1}{K_{22}} \lambda(x) \frac{\eta_{+,2}\eta_{-,2}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{2j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& + \frac{1}{K_{33}} \lambda(x) \frac{\eta_{+,3}\eta_{-,3}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{3j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right) \lambda(x) \frac{\eta_{+2}\eta_{-3}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp \left[-i\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{2j'} + X_{3j'}) \Theta_{j'}(x, t) + \left((KX)_{2j'} - (KX)_{3j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right) \lambda(x) \frac{\eta_{+3}\eta_{-2}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp \left[-i\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{3j'} + X_{2j'}) \Theta_{j'}(x, t) - \left((KX)_{2j'} - (KX)_{3j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \frac{1}{K_{55}} \lambda(x) \frac{\eta_{+,5}\eta_{-,5}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{5j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& + \frac{1}{K_{66}} \lambda(x) \frac{\eta_{+,6}\eta_{-,6}}{2\pi^2\alpha} \exp \left[-i\sqrt{2} \sum_{j'=1}^N X_{6j'} \Theta_{j'}(x, t) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{55}} + \frac{1}{K_{66}} \right) \lambda(x) \frac{\eta_{+5}\eta_{-6}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp \left[-i\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{5j'} + X_{6j'}) \Theta_{j'}(x, t) + \left((KX)_{5j'} - (KX)_{6j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right] \\
& + \left(\frac{1}{K_{55}} + \frac{1}{K_{66}} \right) \lambda(x) \frac{\eta_{+6}\eta_{-5}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp \left[-i\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j'=1}^N \left((X_{6j'} + X_{5j'}) \Theta_{j'}(x, t) - \left((KX)_{5j'} - (KX)_{6j'} \right) \Phi_{j'}(x, t) \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{K_{22}}\lambda^*(x)\frac{\eta_{-,2}\eta_{+,2}}{2\pi^2\alpha}\exp\left[i\sqrt{2}\sum_{j'=1}^N X_{2j'}\Theta_{j'}(x,t)\right] \\
& -\frac{1}{K_{33}}\lambda^*(x)\frac{\eta_{-,3}\eta_{+,3}}{2\pi^2\alpha}\exp\left[i\sqrt{2}\sum_{j'=1}^N X_{3j'}\Theta_{j'}(x,t)\right] \\
& -\left(\frac{1}{K_{22}}+\frac{1}{K_{33}}\right)\lambda^*(x)\frac{\eta_{-3}\eta_{+2}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp\left[i\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{j'=1}^N\left((X_{2j'}+X_{3j'})\Theta_{j'}(x,t)+\left((KX)_{2j'}-(KX)_{3j'}\right)\Phi_{j'}(x,t)\right)\right] \\
& -\left(\frac{1}{K_{22}}+\frac{1}{K_{33}}\right)\lambda^*(x)\frac{\eta_{-2}\eta_{+3}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp\left[i\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{j'=1}^N\left((X_{3j'}+X_{2j'})\Theta_{j'}(x,t)-\left((KX)_{2j'}-(KX)_{3j'}\right)\Phi_{j'}(x,t)\right)\right] \\
& -\frac{1}{K_{55}}\lambda^*(x)\frac{\eta_{-,5}\eta_{+,5}}{2\pi^2\alpha}\exp\left[i\sqrt{2}\sum_{j'=1}^N X_{5j'}\Theta_{j'}(x,t)\right] \\
& -\frac{1}{K_{66}}\lambda^*(x)\frac{\eta_{-,6}\eta_{+,6}}{2\pi^2\alpha}\exp\left[i\sqrt{2}\sum_{j'=1}^N X_{6j'}\Theta_{j'}(x,t)\right] \\
& -\left(\frac{1}{K_{55}}+\frac{1}{K_{66}}\right)\lambda^*(x)\frac{\eta_{-6}\eta_{+5}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp\left[i\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{j'=1}^N\left((X_{5j'}+X_{6j'})\Theta_{j'}(x,t)+\left((KX)_{5j'}-(KX)_{6j'}\right)\Phi_{j'}(x,t)\right)\right] \\
& -\left(\frac{1}{K_{55}}+\frac{1}{K_{66}}\right)\lambda^*(x)\frac{\eta_{-5}\eta_{+6}}{4\pi^2\alpha} \\
& \times \exp\left[i\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{j'=1}^N\left((X_{6j'}+X_{5j'})\Theta_{j'}(x,t)-\left((KX)_{5j'}-(KX)_{6j'}\right)\Phi_{j'}(x,t)\right)\right]
\end{aligned} \tag{C.32}$$

であり、これを用いて、

$$\begin{aligned}
& \langle F; F \rangle_\omega^0 \\
&= \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \frac{4D_1}{2\pi^4\alpha^2} \left(\frac{1}{\pi\alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}}}{2\pi T} \\
&\quad \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) \\
&+ 4D_2 \frac{1}{K_{11}^2} \frac{1}{2\pi^4\alpha^2} \left(\frac{1}{\pi\alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}}{2\pi T} \\
&\quad \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \\
&+ 2D_2' \left\{ \frac{4}{K_{22}^2} \frac{1}{2\pi^4\alpha^2} \left(\frac{1}{\pi\alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}}{2\pi T} \right. \\
&\quad \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \\
&\quad \left. + 2 \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right)^2 \frac{1}{2\pi^4\alpha^2} \left(\frac{1}{\pi\alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}}}{2\pi T} \right. \\
&\quad \left. \times B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) \right\} \tag{C.33}
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$Y_j^{(12)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{1j} + X_{2j})^2}{2\pi\tilde{v}_j} + 2\pi\tilde{v}_j \left((KX)_{1j} - (KX)_{2j} \right)^2 \right\} \tag{C.34}$$

$$Y_j^{(23)} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(X_{2j} + X_{3j})^2}{2\pi\tilde{v}_j} + 2\pi\tilde{v}_j \left((KX)_{2j} - (KX)_{3j} \right)^2 \right\} \tag{C.35}$$

$$Y_j^{(1)} = \frac{X_{1j}^2}{\pi\tilde{v}_j} \tag{C.36}$$

$$Y_j^{(2)} = \frac{X_{2j}^2}{\pi\tilde{v}_j} \tag{C.37}$$

とおいた。以上のことから、バンド構造 II の場合、メモリー関数の分子に現れる $\langle F; F \rangle_\omega^0 -$

$\langle F; F \rangle_{\omega=0}^0$ は

$$\begin{aligned}
& \langle F; F \rangle_{\omega}^0 - \langle F; F \rangle_{\omega=0}^0 \\
&= D_1 \left(\frac{1}{K_{11}} + \frac{1}{K_{22}} \right)^2 \frac{2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}}}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(12)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(12)} \right) \right] \\
&+ \frac{1}{K_{11}^2} \frac{2D_2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}}{2\pi T} \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(1)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(1)} \right) \right] \\
&+ 2D_2' \left\{ \frac{1}{K_{22}^2} \frac{2}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}}{2\pi T} \right. \\
&\quad \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(2)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(2)} \right) \right] \\
&\quad + \left(\frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{33}} \right)^2 \frac{1}{\pi^4 \alpha^2} \left(\frac{1}{\pi \alpha_c T} \right)^{-\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) \frac{2^{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}}}{2\pi T} \\
&\quad \left. \times \left[B \left(\frac{\pi \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} T - i\omega}{2\pi T}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) - B \left(\frac{\sum_{j=1}^N Y_j^{(23)}}{2}, 1 - \sum_{j=1}^N Y_j^{(23)} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{C.38}$$

となる。

参考文献

- [1] L. D. Landau, Soviet Phys. JETP **3**, 920 (1957).
- [2] D. Pines and P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids I* (Benjamin, 1966).
- [3] E. M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics Part 2* (Pergamon, 1980).
- [4] A. A. Abrikozov and I. M. Khlatnikov, Rept. Prog. Phys. **22**, 329 (1959).
- [5] C. Hodges, H. Smith, and J. W. Wilkins, Phys. Rev. B **4**, 302 (1971).
- [6] 三宅和正, 固体物理 **33**, 285 (1998).
- [7] 斯波弘行, 「新版 固体の電子論」(和光システム研究所, 2010) p.43.
- [8] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 349 (1950).
- [9] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
- [10] D. C. Mattis and E. H. Lieb, J. Math. Phys. **6**, 304, (1965).
- [11] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
- [12] J. Sólyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- [13] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **57**, 977 (1994).
- [14] V. von Delft and H. Schoeller, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 225 (1998).
- [15] V. Meden and K. Schönhammer, Phys. Rev. B **46**, 15753 (1992).
- [16] J. Voit, Phys. Rev. B **47**, 6740 (1993).
- [17] N. Nakamura and Y. Suzumura, Prog. Theor. Phys. **98**, 29 (1997).
- [18] E. Orignac, M. Tsuchiizu, and Y. Suzumura, Phys. Rev B **84**, 165128 (2011)
- [19] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford, 2004) p.200.
- [20] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).
- [21] H. Ishii, H. Kataura, H. Shiozawa, H. Yoshioka, H. Otsubo, Y. Takayama, T. Miyahara, S. Suzuki, Y. Achiba, M. Nakatake, T. Narimura, M. Higashiguchi, K. Shimada, H. Namatame, and M. Taniguchi, Nature **426**, 540 (2003).
- [22] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, Nature **318**, 162 (1985).
- [23] A. M. Rao, P. Zhou, K.-A. Wang, G. T. Hager, J. M. Holden, Y. Wang, W.-T.

- Lee, X.-X. Bi, P. C. Eklund, D. S. Cornett, M. A. Duncan, and I. J. Amster, *Science* **259**, 955 (1993).
- [24] J. Onoe and K. Takeuchi, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2987 (1997) .
- [25] J. Onoe, A. Nakao, and K. Takeuchi, *Phys. Rev. B* **55**, 10051 (1997).
- [26] T. Nakayama, J. Onoe, K. Nakatsuji, J. Nakamura, K. Takeuchi, and M. Aono, *Surf. Rev. Lett.* **6**, 1073 (1999).
- [27] J. Onoe, T. Nakayama, M. Aono, and T. Hara, *J. Appl. Phys.* **96**, 443 (2004).
- [28] J. Onoe, T. Nakayama, M. Aono, and T. Hara, *J. Phys. Chem. Solids*, **65**, 343 (2004).
- [29] J. Onoe, T. Nakayama, M. Aono, and T. Hara, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 595 (2003).
- [30] A. Takashima, J. Onoe, T. Nishii, *J. Appl. Phys.* **108**, 033514 (2010).
- [31] J. Onoe, A. Takashima, Y. Toda, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 241911 (2010).
- [32] J. Onoe, A. Takashima, S. Ono, H. Shima, T. Nishii, *J. Phys.: Condens. Matter.* **24**, 175405 (2012).
- [33] S. Ryuzaki and J. Onoe, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 113301 (2014).
- [34] A. J. Stone and D. J. Wales, *Chem. Phys. Lett.* **128**, 501 (1986).
- [35] H. Ueno, S. Osawa, E. Osawa, and K. Takeuchi, *Fullerene Sci. Technol.* **6**, 319 (1998).
- [36] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka and S. Kimura, *Europhys. Lett.* **98**, 27001 (2012).
- [37] H. Shima, H. Yoshioka, and J. Onoe, *Phys. Rev. B* **79**, 201401(R) (2009).
- [38] B. S. DeWitt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957).
- [39] 尾上順, *分光研究* **56**, 159 (2007).
- [40] G. Wang, Y. Li, Y. Huang, *J. Phys. Chem. B* **109**, 10957 - 10961 (2005).
- [41] Y. Noda, S. Ono, and K. Ohno, *J. Phys. Chem. A* **119**, 3048 (2015).
- [42] H. Yoshioka, H. Shima, Y. Noda, S. Ono, and K. Ohno, *Phys. Rev. B* **93**, 165431 (2016).
- [43] H. Yoshioka and H. Shima, *Phys. Rev. B* **84**, 075443 (2011).
- [44] 高橋康, 「物性研究者のための場の量子論入門 I」 (培風館, 1974) p.32.
- [45] 本章の結果の一部は以下の論文で公表済みである。 M. Nishimoto, H. Yoshioka, and H. Shima, *JPS Conf. Proc.* (印刷中)
- [46] 佐藤宇史, 高橋隆, *固体物理* **39**, 469 (2004).
- [47] A. A. Abrikosov and I. A. Ryzhkin, *Adv. Phys.* **27**, 147 (1978).
- [48] W. Götze and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **6**, 1126 (1972).
- [49] H. Yoshioka, *Phys. Rev. B* **61**, 7316 (2000).

[50] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory* (Oxford, 1992) p.571.

謝辞

本研究を成し遂げるにあたり、終始適切な助言を賜り、また丁寧に指導してくださった吉岡英生教授に深く感謝申し上げます。多くのご迷惑をおかけしましたが、最後まで熱心にご指導いただき、時にやさしく励ましてくださいました。また、国際会議や学会などにも積極的に参加させてくださったことで、たくさんの研究者と交流することができました。山梨大学の島弘幸教授とは、議論を通して多くの学びと気づきを与えていただき、研究内容をより深めることができました。奈良女子大学の高橋智彦教授、狐崎創教授、永廣秀子准教授には本論文作成にあたり多くの助言、ご指摘をいただきました。岐阜大学の小野頌太助教には学会発表時に議論していただき、岡山県立大学の野田祐輔准教授には、本研究を行う上で必要となる数値計算のパラメータを教えてくださいました。奈良女子大学の金井友希美特任助教や研究室の方々には様々な相談にのっていただいたり、普段の生活のなかでたくさんお世話になりました。私を支えてくださった多くの研究者の方々に感謝いたします。最後に、ここまで私を支え、応援してくれた家族に心より感謝いたします。

本研究は、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JPMJSP2115 の支援を受けたものです。