

半導体物理学 第 12 回

勝本信吾

東京大学物性研究所

2011 年 7 月 4 日

2.2.2 2 端子公式

以上の散乱体がある 1 次元系での考察を一般の伝導体に広げる．ここでは，一般の伝導体を，伝導チャンネルのネットワークとして捉える．これは，散乱体がある場合の Feynman 経路の古典経路に伝導チャンネルを対応させたものと考えられる．これは，散乱体がある場合の Feynman 経路の古典経路に伝導チャンネルを対応させたものと考えられる．チャンネルの結節点は散乱中心であり，量子ドットと見ることができる（実際，強結合モデルで計算するときは量子ドットとしてモデル化する）が，結局ユニタリー性を保って複素確率密度流を位相シフトを伴いつつ分配する役目をしているだけであるから，S 行列で表すことができる．

伝導体の出入口を，それぞれ M 個， N 個の伝導チャンネルの重ねあわせで書くと，伝導体の中は多くの S 行列の結合で，全体として $M + N$ 次の S 行列で書くことができる．この大きな行列の中で，入力 → 出力の複素透過率を，入力チャンネル集合を A_i ，出力チャンネル集合を A_o と置いて $t_{ij} (i \in A_i, j \in A_o)$ と表す．結局この伝導体の電気伝導度は，ランダウアーの公式として知られる

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_i^N \sum_j^M |t_{ij}|^2 \quad (8.28)$$

で表される．

この電気伝導度は，伝導体の両側に電気化学ポテンシャル μ_1, μ_2 の粒子溜めを結合した時流れる電流を J_{12} として， $|J_{12}|/|\mu_2 - \mu_1|$ で定義される 2 端子伝導度である．

(8.28) はある伝導体の透過率を与えるが，あくまで 1 つの S 行列であるから，コヒーレント輸送現象では，例えばこのような系を直列接続した場合，古典的な直列抵抗として全体の透過率を表すことができず，合成系全体をもう 1 度量子力学的に取り扱う必要がある．S 行列の合成則はすでに与えたが，2 端子伝導度 (8.28) には含まれていない情報が必要であり，すなわち，式 (8.28) の形にまとめた瞬間に量子的な情報のほとんどが失われる．言い換えると，2 端子伝導体に接続された「電極」とは，量子的な情報を失わせ，すべて古典的な「電流」(透過率) という量に落としこむ (collapse) 熱浴と考えられている．

2.3 コヒーレント輸送の特徴

2.3.1 Onsager 相反性

電気伝導において重要な対称性の1つがオンサガー相反性である。輸送現象一般に成立する対称性であるが、S 行列形式では磁場 B に対して

$$S(\mathbf{B}) = {}^t S(-\mathbf{B}) \quad (S_{mn}(\mathbf{B}) = S_{nm}(-\mathbf{B})) \quad (8.29)$$

と表すことができる。

これは、次のように考えることで導かれる。今、考えているのが、1体の Schrödinger 方程式の散乱問題だったことを思い出そう。Schrödinger 方程式

$$\left[\frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi = E\psi \quad (8.30)$$

の複素共役をとり、 $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ とすると、

$$\left[\frac{(i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} + V \right] \psi^* = E\psi^* \quad \therefore \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (8.31)$$

すなわち、 $\psi(B)$ と $\psi^*(-B)$ は同じ解集合を形成している ($\{\dots\}$ は \dots の集合を表す)。ここで、考えている $\psi(B)$ は Schrödinger 方程式 (8.30) の散乱解だったことを思い出そう。散乱解を $\text{Sc}\{a \rightarrow b\}$ (a は S 行列の入射波、 b は散乱波) と表すと、

$$\text{Sc}\{a(B) \rightarrow b(B)\} \in \{\psi(B)\}, \quad (8.32)$$

$$i.e., \quad b(B) = S(B)a(B) \quad (8.33)$$

(8.33) の両辺の複素共役をとって

$$b^*(B) = \bar{S}(B)a^*(B). \quad (8.34)$$

一方、進行波 $\exp(\pm ikr)$ に対して複素共役をとることは、波の進行方向を逆転することになる^{*1}。つまり、複素共役を取ることで入射波と散乱波が入れ替わり

$$\text{Sc}\{b^*(B) \rightarrow a^*(B)\} \in \{\psi^*(B)\} \quad (8.35)$$

$$\therefore B \rightarrow -B \text{ とすると } \text{Sc}\{b^*(-B) \rightarrow a^*(-B)\} \in \{\psi^*(-B)\} = \{\psi(B)\} \quad (8.36)$$

$$i.e., \quad a^*(-B) = S(B)b^*(-B) \quad (8.37)$$

(8.37) より

$$b^*(B) = S^{-1}(-B)a^*(B) \quad (8.38)$$

^{*1} (8.30) は、「時間によらない」Schrödinger 方程式なので、ここで複素共役と呼ぶのは $i\omega t$ の符号はそのままにして ikr の符号のみ反転することを意味する。

であるから，(8.34) と比較して

$$\begin{aligned}\bar{S}(B) &= S^{-1}(-B) = S^*(-B) \quad (\because \text{unitarity } SS^* = S^*S = I) \\ \therefore S(B) &= {}^t S(-B)\end{aligned}\quad (8.39)$$

以上より相反性が証明された．

特に，ここまで考えてきたような2端子伝導の場合，すなわち入口と出口，およびそれに接続された電極が1つずつあって電極間の電圧降下と電流との比で電気抵抗を考える場合，電気抵抗 (ρ_{xx}) の磁場応答 (磁気抵抗) について対称性

$$\rho_{xx}(\mathbf{B}) = \rho_{xx}(-\mathbf{B}) \quad (8.40)$$

が導かれる．これは，輸送係数の線形性を仮定しているので，非線形素子では有限バイアス下で破れる．特性が正負バイアスで対称であれば，バイアス反転も含めれば回復する．

2.3.2 Landauer-Büttiker 公式

端子数には特に制限を設けず，端子を p, q などで指数付けしよう (図 8.16)．端子 p は化学ポテンシャル $\mu_p = -eV_p$ を持つ粒子溜めに接続されているとする．端子 p から試料に流れ込む電流 J_p は， p から試料へと向かうチャネルの電流から， p 以外の各端子から試料を通して p へ流れ込む電流を差し引いたものであるから，

$$J_p = -\frac{2e}{h} \sum_q [T_{q \leftarrow p} \mu_p - T_{p \leftarrow q} \mu_q] \quad (8.41)$$

と書くことができる． $T_{p \leftarrow q}$ 等を，

$$\mathcal{T}_{pq} \equiv T_{p \leftarrow q} \quad (p \neq q), \quad \mathcal{T}_{pp} \equiv -\sum_{q \neq p} T_{q \leftarrow p}$$

と，行列 \mathcal{T} の形で表すと， $\mathbf{J} = {}^t(J_1, J_2, \dots)$ ， $\boldsymbol{\mu} = {}^t(\mu_1, \mu_2, \dots)$ (いずれも列ベクトル) として，

$$\mathbf{J} = \frac{2e}{h} \mathcal{T} \boldsymbol{\mu}$$

と表すことができる．また，

$$\begin{aligned}V_q &= \frac{\mu_q}{-e}, \quad G_{pq} \equiv 2e^2 h T_{p \leftarrow q} \quad \text{とおくと} \\ J_p &= \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q]\end{aligned}\quad (8.42)$$

である．基本はこれだけであるが，以下のように様々な制限条件がつく．

まず，電流の保存から

$$\sum_q J_q = 0 \quad (8.43)$$

である．次に，全端子の電位が同じなら電流は零のはずであるから，

$$\sum_q [G_{qp} - G_{pq}] = 0 \quad (8.44)$$

となる．

更に，外部磁場 B に対して Onsager の相反定理

$$G_{qp}(B) = G_{pq}(-B) \quad (8.45)$$

が成立する．これはもちろん，S-matrix の時に成立した Onsager の相反定理からの帰結である．

4つの端子を持つ試料を考える．4つの化学ポテンシャル（電位）の内，端子4の電位を参照電位として $V_4 = 0$ とおく．すると，

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} \quad (8.46)$$

と書くことができる．

さて，カシミール (Casimir) 問題と呼ばれる，

$$J_1 = -J_3, \quad J_2 = -J_4 \quad (8.47)$$

という境界条件を考えよう．これは， $J_2 = 0$ とおけば，1-3 に電流を流して 2-4 で（電流を流さずに）電圧を測定する通常の4端子測定問題になるので，これを含んでいる．この問題の解は， $V_{ij} \equiv V_i - V_j$ において

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{13} \\ V_{24} \end{pmatrix} \quad (8.48)$$

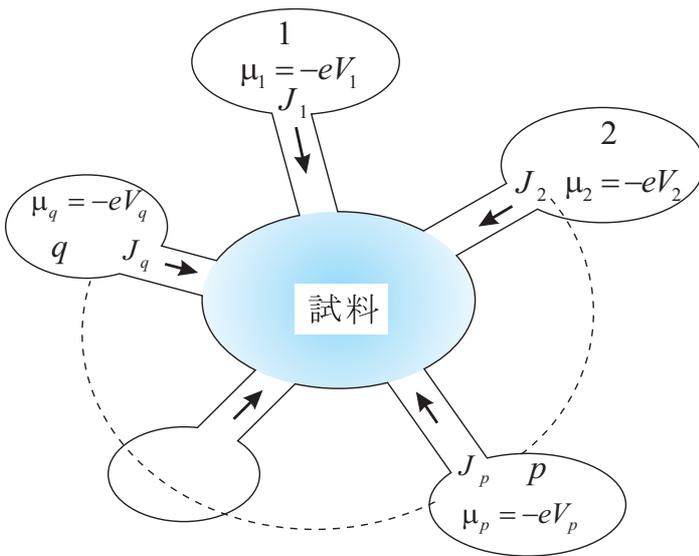


図 8.16 LB 公式を導くモデル．

という形に書くことができる．ただし，

$$\alpha_{11} = 2G_q[-\mathcal{T}_{11} - S^{-1}(\mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{12})(\mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{21})] \quad (8.49a)$$

$$\alpha_{12} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{12}\mathcal{T}_{34} - \mathcal{T}_{14}\mathcal{T}_{32}) \quad (8.49b)$$

$$\alpha_{21} = 2G_q S^{-1}(\mathcal{T}_{21}\mathcal{T}_{43} - \mathcal{T}_{23}\mathcal{T}_{41}) \quad (8.49c)$$

$$\alpha_{22} = 2G_q[-\mathcal{T}_{22} - S^{-1}(\mathcal{T}_{21} - \mathcal{T}_{23})(\mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{12})] \quad (8.49d)$$

$$S = \mathcal{T}_{12} + \mathcal{T}_{14} + \mathcal{T}_{32} + \mathcal{T}_{34} = \mathcal{T}_{21} + \mathcal{T}_{41} + \mathcal{T}_{23} + \mathcal{T}_{43} \quad (8.50)$$

である．(8.48) は電圧で電流を表す形になっているが，もちろんこれは式の上でそう書けているだけで，物理的な操作としては何らかの電気回路等のフィードバックを使用して，(8.47) の条件が満たされるように， V_1, V_2, V_3 を調整することになる．

2.3.3 4端子系の相反性

2端子伝導度における Onsager 相反性は (8.40) のように簡単な形で現れた．Landauer-Büttiker 公式を使って，4端子伝導度ではどのようなことが生じるか考える．

(8.45) が (8.48) に与える条件は，

$$\alpha_{11}(B) = \alpha_{11}(-B), \quad \alpha_{22}(B) = \alpha_{22}(-B), \quad \alpha_{12}(B) = \alpha_{21}(-B) \quad (8.51)$$

である．

通常の4端子問題に適用して，13:電流端子，24:電圧端子，とした時の LB 流「電気抵抗」を $\mathcal{R}_{13,24}$ などと書くことにすると，

$$\mathcal{R}_{13,24} = \frac{V_2 - V_4}{J_1} = \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (8.52)$$

となり，行列要素は Onsager の相反定理を満たしているが， \mathcal{R} は (8.40) のような磁場反転に対する対称性を満たさない．一方

$$\mathcal{R}_{24,13} = \frac{\alpha_{12}}{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}} \quad (8.53)$$

と，(8.51) より，電流電圧端子を入れ替えた磁気抵抗は，磁場反転に対して対称である．

一般に

$$\mathcal{R}_{mn,kl} = R_q \frac{\mathcal{T}_{km}\mathcal{T}_{ln} - \mathcal{T}_{kn}\mathcal{T}_{lm}}{D}, \quad D \equiv R_q^2(\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21})S \quad (8.54)$$

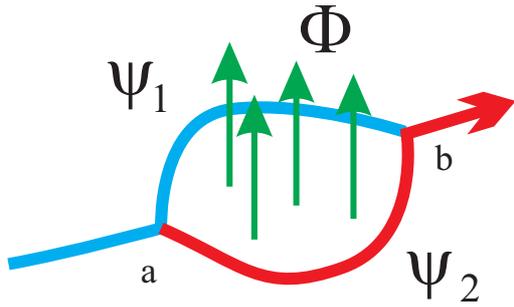
なので，相反関係

$$\mathcal{R}_{mn,kl}(B) = -\mathcal{R}_{kl,mn}(-B) \quad (8.55)$$

が成立する．負号がついたのはもちろん単なる端子の順番の問題である．

これより，実際にメソスコピック試料に対して4端子を接続して測定したとき，どのような磁気抵抗が現れるか分析する上でも重要な手がかりを与えている．すなわち，一般に4端子測定においては磁場の反転 ($B \rightarrow -B$) を行っても測定される電気抵抗の値は同じになるとは限らない．しかし，電流電圧端子を入れ替えた上で逆向きの磁場の下で抵抗を測定すると，それは同じ値になっているべきである．

2.4 Aharonov-Bohm リング



S 行列を使って透過率を計算する例として Aharonov-Bohm(AB) リングの透過率を考える。AB リングはよく知られているように、伝導チャネルを一旦二手に分けた後、合流させた構造である。経路 1, 2 を通過する波動関数をそれぞれ $\psi_{1,2}$ とし、合流点での波動関数を $\psi = \psi_1 + \psi_2$ と書くと、

$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2|\psi_1||\psi_2| \cos \varphi \quad (8.56)$$

φ は、2つの経路の行路差から来る位相差である。ここに磁場をかけるとどのような変化が起こるか? 良く知られた置き換え

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A} \quad \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right)$$

により磁場を導入すると、進行波が $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ という形式であることから、

$$\theta_{AB} = \int_a^b \mathbf{k} \cdot d\mathbf{x} \quad \therefore \Delta\theta_{AB} = \frac{e}{\hbar} \int_a^b \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \quad (8.57)$$

$$\begin{aligned} \Delta\theta &= \frac{e}{\hbar} \left[\int_a^b \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}_{(1)} - \int_a^b \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}_{(2)} \right] = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{e}{\hbar} \int_{\text{loop}} \mathbf{B} dS \\ &= 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad \Phi_0 \equiv \frac{h}{e}. \end{aligned} \quad (8.58)$$

すなわち、位相差が磁束 Φ_0 周期に対して 2π だけ回るので、(8.56) の考え方からすると、透過波動関数振幅は Φ_0 周期で振動し、伝導度もそのように振舞うと期待される。

S 行列を使って、AB リングをモデル化しよう。図のような伝導チャネル構成とし、三叉路部分の S 行列を

$$S_t = \begin{pmatrix} 0 & -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \\ -1/\sqrt{2} & -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (8.59)$$

とする*2。AB 位相については、片側の経路に

$$S_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_{AB}} \\ e^{-i\theta_{AB}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \theta \equiv 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} = \frac{e}{\hbar} \phi \quad (\phi \text{ はリングを貫く磁束}) \quad (8.60)$$

という S 行列で表される導体を挿入し、またリングの両方の腕の行路差を表す S 行列

$$S_w = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_0} \\ e^{i\theta_0} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.61)$$

*2 良く採用される形だが、完全な対称形であるためどちらかというやや特殊である。

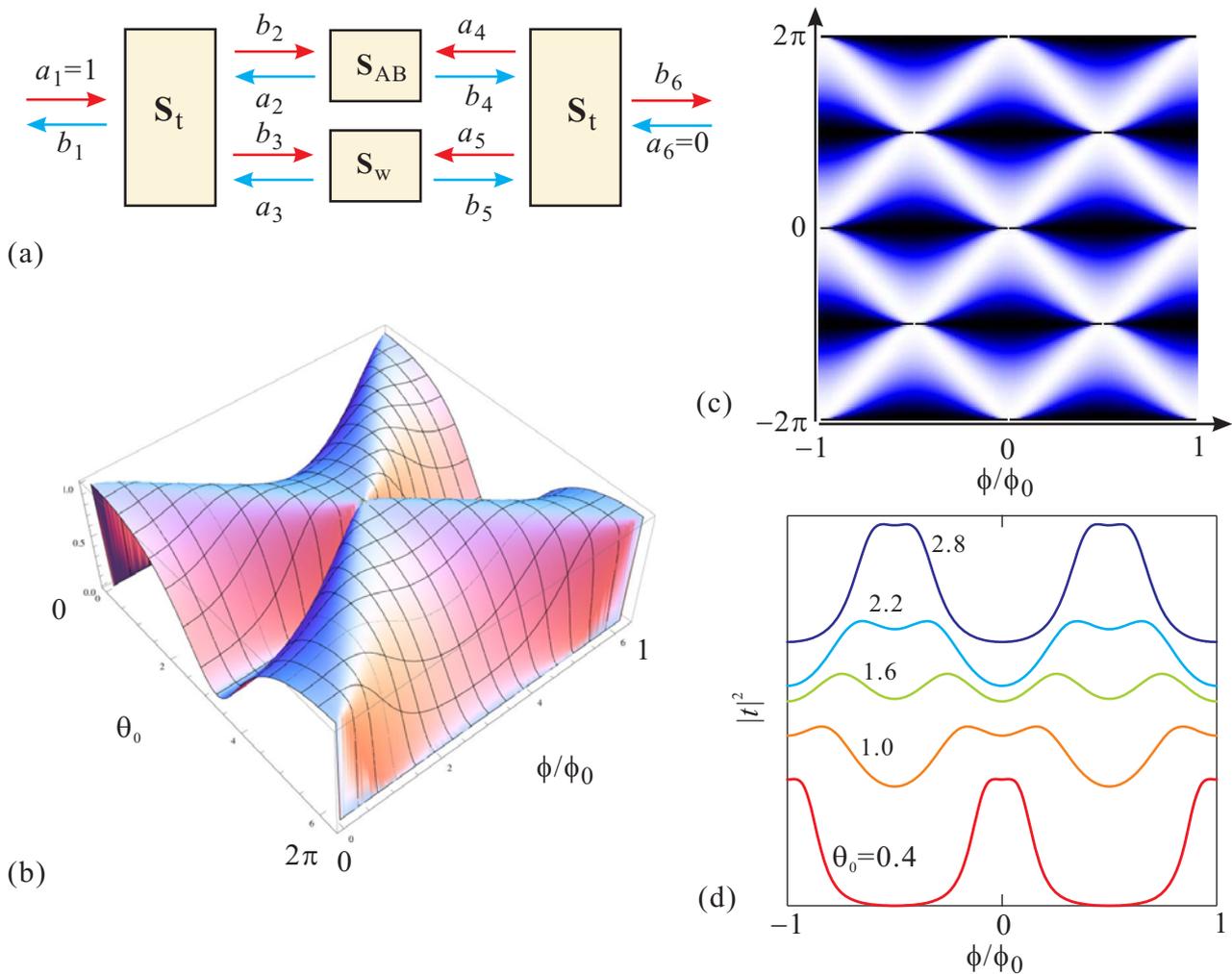


図 8.17 (a) AB リングの S 行列モデル . (b) 式 (8.62) から計算された AB リングの透過率 $|t|^2$ を行路差を位相で表したもの (θ_0) とリングを貫く磁束 ϕ/ϕ_0 の関数としてプロットした . (c) (b) と同じ計算結果を、やや広い領域で 2 次元カラープロットしたもの . (d) やはり同じ透過率を、細線部の位相シフトのいくつかの値に対して、 ϕ/ϕ_0 の関数として描いた . ϕ_0 周期の AB 振動は $\theta_0 = 1.6$ 付近で一旦消え、振動が反転、すなわち位相が π だけ飛躍することがわかる .

を、反対側の経路に挿入する . 磁場なしの行路差による位相シフト θ_0 は伝播方向によらないのに対し、 θ_{AB} は向きにより反転し、この導体のオンサガー相反性 (8.29) は、これによって満たされる .

以上の合成 S 行列より、リング全体の複素透過率は

$$t = \frac{4 \sin \theta_0}{1 + e^{i\theta_{AB}}(e^{i\theta_{AB}} + e^{i\theta_0} - 3e^{-i\theta_0})} \quad (8.62)$$

と得られる . 透過率 ((8.28) より伝導度) $T = |t|^2$ は磁束 ϕ に対して、図 8.17(b) のように ϕ_0 周期の AB 振動をしている . θ_0 を変化させても、同様に 2π 周期の振動をしている . $|t|^2$ は $\phi = 0$ 軸に対して対称であり、S 行列 (8.60) に対して導入した Onsager 相反性により、(8.62) にも相反性が成立した結果である . 周期 ϕ_0 の振動に着目すると、その振動位相は θ_0 に対して π を振

幅とする矩形波状に変化し、位相がジャンプする付近では振幅がなくなる。磁気抵抗振動が消失するわけではなく、 $\phi_0/2$ 周期を始め、高調波成分は振幅が大きくなる。このように、 θ_0 の連続変化に対して ϕ_0 周期成分の位相が 0 か π しか取り得ないことを AB 振動位相の固定 (phase rigidity) と呼ぶ。位相の固定があるため、AB リングに量子ドットを埋め込んだ系で AB 振動を測定しても振動位相から AB リングの枝上での位相シフトを検出することはできないことになる^{*3}。

最初に簡単に考えた式 (8.56), (8.60) の組み合わせとは異なり、S 行列で計算した結果 (8.62) は、単純な正弦波的振動ではなく、図 8.17(d) に見るように、多くの高調波成分を含んでいる。これは無論、リングを複数回周回する経路の寄与によるものである。現実のリングでは多数回の周回経路はデコヒーレンスのために周回数に応じてその寄与が減少し、AB 振動は正弦波にある程度近くなる。それでもヘテロ接合 2DEG を加工したリングなどでは AB 振動のフーリエスペクトルを取ると、10 周回程度の成分まで含まれていることが多い。

2.5 Green 関数と S 行列

本節は、S 行列形式を本格的に理論計算へ応用するには大変重要な最初の一步の話であるが、講義では時間の都合で省略する。ここを学び、更に Keldysh 形式まで進めば、この分野の理論の論文もかなり理解できるようになるはずである。

2.5.1 Green 関数

便利な計算法として Green 関数を使用するものがある。ここではこれまで見た S, T 行列を使用する方法と Green 関数法との関係について見ておこう。

付録 D に示したように、遅延、先進グリーン関数 G^R, G^A をそれぞれ、

$$G^R = \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\eta} \quad (\eta \rightarrow +0), \quad (8.63a)$$

$$G^A = \frac{1}{E - \mathcal{H} - i\eta} \quad (\eta \rightarrow +0) \quad (8.63b)$$

と表す。簡単のため、1 次元 (x) で考えることとする。例えば G^R は微分方程式

$$(E - \mathcal{H} + i\eta)G^R(x, x') = \delta(x - x') \quad (8.64)$$

を満たし、 x' に局所的に与えられた摂動が、 x に及ぼす影響を与える。系の基底を $|\Psi_\alpha\rangle$ 、その座標表示を $\langle x|\Psi_\alpha\rangle = \psi_\alpha(x)$ とすると、

$$G^R(x, x') = \langle x| \sum_\alpha \frac{|\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|}{E - \mathcal{H} + i\eta} |x'\rangle = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(x')}{E - \mathcal{H} + i\eta} \quad (8.65)$$

と表せる。

^{*3} 複数伝導チャネルを考え、更に磁場領域を限ると、これが破れて位相シフトが連続的に発生するようになることがある。Onsager 相反性が破れるわけではない。

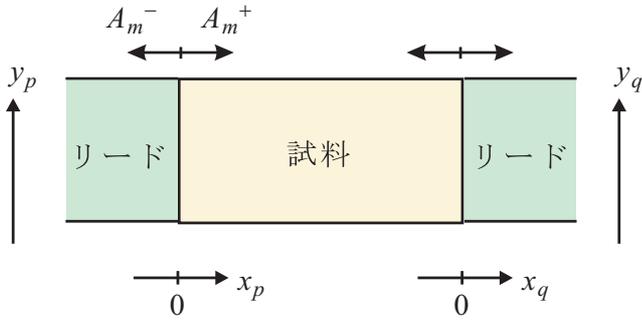


図 8.18 S 行列要素を Green 関数で表すために考える，試料とリードの境界での波の伝播．

2.5.2 量子細線のグリーン関数

完全な 1 次元の単チャンネル系のグリーン関数は付録 D の (D.10) で与えられる．これを，有限幅を持ち，チャンネルが複数ある量子細線に拡張することを考える．細線方向の x 座標と y 座標を変数分離して考える． y 方向の固有関数をのように $\varphi_n(y)$ と書くと，(8.65) より $G^R(x, y; x', y')$ は次のように表せることがわかる．

$$G^R(x, y; x', y') = \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar v_n} \right) \varphi_n(y) \varphi_n^*(y') \exp[ik_n |x - x'|]. \quad (8.66)$$

2.5.3 S 行列のグリーン関数表示

図 8.18 において，試料と 2 つの導線との境界 $x_p = 0$ ， $x_q = 0$ の間の伝播を表すグリーン関数は

$$G^R(y_q; y_p) = \sum_{n \in q, m \in p} (\delta_{nm} A_m^- + s_{nm} \sqrt{\frac{v_m}{v_n}} A_m^+) \chi_n(y_q) \quad (8.67)$$

と書くことができる． A_m^\pm は図に示したように，境界から正負方向に伝播する波動振幅， s_{nm} は S 行列要素で，各チャンネルのフェルミ速度を v_i のように表した．(8.66) より，

$$A_m^\pm = \frac{\chi_m(y_p)}{i\hbar v_m}$$

であるから，

$$G^R(y_q; y_p) = - \sum_{n \in q, m \in p} \frac{i}{\hbar \sqrt{v_n v_m}} \chi_n(y_q) (\delta_{nm} + s_{nm}) \chi_m(y_p) \quad (8.68)$$

となり，したがって，

$$s_{nm} = -\delta_{nm} + i\hbar \sqrt{v_n v_m} \iint dy_q dy_p \chi_n(y_q) G^R(y_q; y_p) \chi_m(y_p) \quad (8.69)$$

と，S 行列要素をグリーン関数を使って表すことができる．

参考文献

- [1] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).

- [2] S. Datta, “Electron Transport in Mesoscopic Systems” (Cambridge Univ. Press, 1995).
 [3] 勝本信吾 「メソスコピック系」 (朝倉書店, 2002)
 [4] K. von Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
 [5] S. Kawaji and J. Wakabayashi, in *Physics in High Magnetic Fields*, eds. S. Chikazumi and N. Miura (Springer, Berlin 1981).
 [6] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
 [7] 安藤恒也 「量子効果と磁場」 (丸善, 1995)
 [8] 吉岡大二郎 「量子ホール効果」 (岩波書店, 1998)

付録 D : Green 関数

簡単にグリーン関数の一般論を見ておく。今、系に何らかの作用 S が加わったとし、それに対する応答 R があったとすると、Green 関数作用素 (演算子) \hat{G} は

$$R = \hat{G}S \quad \text{すなわち,} \quad \hat{G} = \mathcal{D}^{-1} \quad \text{when} \quad \mathcal{D}R = S \quad (\text{D.1})$$

と定義される。今、 S として「電極からの波束の注入」のような摂動を考え、定常 Schrödinger 方程式にこのようなものが加わった形

$$[E - \mathcal{H}]\psi = S \quad (\text{D.2})$$

で問題を書き下ろす。この時 Green 関数演算子は

$$\hat{G} = [E - \mathcal{H}]^{-1} \quad (\text{D.3})$$

と書くことができる。 \hat{G} を座標表示 (簡単のため、1次元とする) で連続指数 (x, x') に対する行列要素 $G(x, x')$ で表すと、上の式 (D.3) より

$$[E - \mathcal{H}]G(x, x') = \delta(x - x') \quad (\text{D.4})$$

と書かれる。この式は、式 (D.2) の特別な場合と考えられる。すなわち、 $G(x, x')$ は x' で局所摂動が起きた時の x での系の応答を与える一種の波動関数である。

一様な 1次元系を考え、運動エネルギーを \mathcal{E} とおいて、座標表示で

$$E - \mathcal{H} = \mathcal{E} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (\text{D.5})$$

とする。 G が波動関数であるとする、 x' から決まった波数 k で広がってくる波動が x に影響するはずであるから

$$G(x, x') = A^\pm \exp[\pm ik(x - x')], \quad x \gtrless x' \quad (k = \sqrt{2m\mathcal{E}}/\hbar), \quad (\text{D.6})$$

となる。 $x = x'$ での接続条件は、まず、値自身は連続でなくてはならないから、

$$G(x \rightarrow x' + 0, x') = G(x \rightarrow x' - 0, x'). \quad (\text{D.7})$$

(D.4) に (D.5) を代入して $\partial G/\partial x$ の接続条件を考える . (D.7) より , $x = x'$ 近傍では , 接続条件を考える際に G の値自身は忘れて良いので \mathcal{E} の項は省略して

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial G}{\partial x} \right] = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(x - x')$$

と書くことができる . x' を含む微小区間で両辺を積分することで , 次の接続条件が得られる .

$$\left[\frac{\partial G}{\partial x} \right]_{x \rightarrow x'+0} - \left[\frac{\partial G}{\partial x} \right]_{x \rightarrow x'-0} = \frac{2m}{\hbar^2}. \quad (\text{D.8})$$

(D.7) , (D.8) に (D.6) を代入し ,

$$\begin{aligned} A^+ &= A^-, \quad ik[A^+ + A^-] = 2m/\hbar^2, \\ \text{すなわち, } A^+ &= A^- = \frac{1}{ik} \frac{m}{\hbar^2}, \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

であり , グリーン関数は

$$G^R(x, x') = -\frac{i}{\hbar v} \exp [ik|x - x'|], \quad v \equiv \frac{\hbar k}{m}, \quad (\text{D.10})$$

と書くことができる . これはもちろん , 原因の後で結果が生じる遅延解 (retarded solution) であり , 先進解 (advanced solution) は

$$G^A(x, x') = \frac{i}{\hbar v} \exp [-ik|x - x'|], \quad (\text{D.11})$$

で与えられる .

この境界条件を , 微分方程式中に表現する方法として無限小正数 η を使って

$$\left[\mathcal{E} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + i\eta \right] G^R(x, x') = \delta(x - x') \quad (\text{D.12})$$

と書くものがある . これを「複素波数」 k' で表すと

$$k' = k \left[1 + \frac{i\eta}{2\mathcal{E}} \right].$$

結局 , 遅延 (後進) , 先進 (前進) グリーン関数は , それぞれ

$$G^R = \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\eta} \quad (\eta \rightarrow +0), \quad (\text{D.13a})$$

$$G^A = \frac{1}{E - \mathcal{H} - i\eta} \quad (\eta \rightarrow +0) \quad (\text{D.13b})$$

と表現することができる .

付録 E : α 行列の計算

Casimir 境界条件の解を表す α 行列 (式 (8.48)) の \mathcal{I} 行列要素による表式 (8.50) の内, α_{11} , α_{21} の計算を示す.

今, Casimir 条件下で更に $V_2 = V_4 = 0$ という条件を課したとしよう.

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{2e^2}J_1 &= (\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{31} + \mathcal{I}_{41})V_1 - \mathcal{I}_{13}V_3 \\ \frac{\hbar}{2e^2}J_3 &= -\mathcal{I}_{31}V_1 + (\mathcal{I}_{13} + \mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43})V_3\end{aligned}$$

であるから, Casimir 条件 $J_1 = -J_3$ を満たすためには

$$J_1 + J_3 = (\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41})V_1 + (\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43})V_3 = 0 \quad \therefore V_3 = -\frac{\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41}}{\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}}V_1.$$

この時, $J_2 = -J_4$ も満たされている. 計算を簡単にするため, $V_1 = 1$ と置くと

$$\begin{aligned}(2G_q)^{-1}J_2 &= -\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{23}\frac{\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41}}{\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}} = \frac{\mathcal{I}_{23}\mathcal{I}_{41} - \mathcal{I}_{21}\mathcal{I}_{43}}{\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}} \\ V_{13} &= 1 + \frac{\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41}}{\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}} = \frac{\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41} + \mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}}{\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}} \\ \therefore \alpha_{21} &= -2G_q \left(\frac{\mathcal{I}_{23}\mathcal{I}_{41} - \mathcal{I}_{21}\mathcal{I}_{43}}{\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41} + \mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}} \right) = 2G_q S^{-1}(\mathcal{I}_{21}\mathcal{I}_{43} - \mathcal{I}_{23}\mathcal{I}_{41}).\end{aligned}$$

同様に,

$$(2G_q)^{-1}J_1 = \mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{31} + \mathcal{I}_{41} + \mathcal{I}_{13}\frac{\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41}}{\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}}$$

であるから,

$$\begin{aligned}\alpha_{11} &= 2G_q \left[\frac{(\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{31} + \mathcal{I}_{41})(\mathcal{I}_{23} + \mathcal{I}_{43}) + \mathcal{I}_{13}(\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41})}{S} \right] \\ &= 2G_q(\mathcal{I}_{12} + \mathcal{I}_{13} + \mathcal{I}_{14} - S^{-1}(\mathcal{I}_{14} + \mathcal{I}_{12})(\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41})) \\ &= 2G_q(-\mathcal{I}_{11} - S^{-1}(\mathcal{I}_{14} + \mathcal{I}_{12})(\mathcal{I}_{21} + \mathcal{I}_{41})).\end{aligned}$$