

# Green 関数のノート

Ryota Mizuno

2025 年 10 月 14 日

## 概要

グリーン関数のダイアグラム展開の方法に関するノート。ダイアグラム展開に関するテキストは多数あるけど [1-5]、1 軌道での説明になってて、多軌道の定式化がちゃんと書いてあるテキストはない気がする<sup>\*1</sup>。なので、それなりに真面目に多軌道の場合の定式化のノートを作ってみた。割と愚直に計算してる。もしかしたらもっとエレガントな説明の仕方とかあるかも...

## 目次

<b>1</b>	<b>定義やらなんやら</b>	<b>3</b>
1.1	ハミルトニアン	3
1.1.1	定義	3
1.1.2	crossing symmetry	3
1.2	実時間グリーン関数	3
1.2.1	定義	3
1.2.2	運動方程式	4
1.2.3	スペクトル表示	5
1.3	虚時間グリーン関数	7
1.3.1	定義	7
1.3.2	運動方程式	8
1.3.3	実時間グリーン関数との関係	9
<b>2</b>	<b>ダイアグラム展開</b>	<b>9</b>
2.1	相互作用表示	10
2.2	Wick の定理, Bloch-de Deominicis の定理	11
2.3	グリーン関数の Wick 分解	12
2.3.1	時間順序	12
2.3.2	全体の符号	13
2.4	ファインマンダイアグラム (Feynman diagram)	14
2.4.1	描き方	14
2.4.2	外線とつながったダイアグラム	15
2.5	既約性	16
2.6	骨格ダイアグラム	17

---

\*1 嘘だったらごめんなさい。

<b>3</b>	<b>2体グリーン関数</b>	<b>18</b>
3.1	定義やら . . . . .	18
3.2	2体グリーン関数のダイアグラム構造 . . . . .	19
3.2.1	時空変数を含む crossing symmetry . . . . .	19
3.2.2	2つの2体バーテックスの繋ぎ方 . . . . .	20
3.2.3	pp 表現? . . . . .	21
3.2.4	高次のバーテックスの作り方 . . . . .	23
3.2.5	parquet 方程式 . . . . .	24
3.3	感受率 . . . . .	25
3.4	自己エネルギー . . . . .	27
<b>4</b>	<b>超伝導</b>	<b>29</b>
4.1	南部表示 . . . . .	29
4.2	エリアシュベルグ方程式 . . . . .	30
4.3	U(1) 対称性 . . . . .	33
<b>5</b>	<b>SU(2) symmetric case</b>	<b>36</b>
5.1	相関関数 . . . . .	36
5.1.1	charge correlation function . . . . .	36
5.1.2	spin correlation function . . . . .	36
5.1.3	singlet pair correlation function . . . . .	37
5.1.4	triplet pair correlation function . . . . .	38
5.2	charge, spin, even, odd channels . . . . .	39
5.3	感受率 . . . . .	40
5.4	自己エネルギー . . . . .	42
<b>6</b>	<b>近似</b>	<b>43</b>
6.1	parquet 近似 . . . . .	43
6.2	揺らぎ交換近似 . . . . .	44
6.2.1	general case . . . . .	44
6.2.2	SU(2) symmetric case . . . . .	45
<b>A</b>	<b>ハミルトニアンとか</b>	<b>47</b>
A.1	ホッピング項・相互作用項と生成・消滅演算子の交換関係 . . . . .	47
<b>B</b>	<b>ハイゼンベルグ表示に関するなんたらかんたら</b>	<b>48</b>
B.1	虚時間の定義域を拡張する際の注意 . . . . .	48
B.2	実時間・虚時間のハイゼンベルグの運動方程式 . . . . .	48
B.3	cyclic 則 . . . . .	49
<b>C</b>	<b>ダイアグラムのなんたらかんたら</b>	<b>49</b>
C.1	繋がっていない項が分母とキャンセルするやつ . . . . .	49
C.2	2体グリーン関数の頂点の入れ替えによる変数の変化 . . . . .	49

# 1 定義やなんやら

## 1.1 ハミルトニアン

### 1.1.1 定義

ハミルトニアンは

$$H = \underbrace{\sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}',\alpha\beta} t_{\mathbf{r}\mathbf{r}',\alpha\beta} c_{\mathbf{r}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{r}'\beta}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} U_{\alpha\beta\gamma\lambda} c_{\mathbf{r}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{r}\lambda}^\dagger c_{\mathbf{r}\gamma} c_{\mathbf{r}\beta}}_{H_{\text{int}}} \quad (1.1)$$

$$= \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} \epsilon_{\mathbf{k}\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} U_{\alpha\beta\gamma\lambda} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\lambda}^\dagger c_{\mathbf{k}'\gamma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\beta}}_{H_{\text{int}}} \quad (1.2)$$

の形をとるとする. ここで,  $\mathbf{r}$  はユニットセルの位置を表し, ギリシャ文字 ( $\alpha, \beta, \dots$ ) はユニットセル内の内部自由度 (スピン, 軌道, 副格子, 等々) を識別する添え字である.  $c, c^\dagger$  はそれぞれ消滅・生成演算子である.  $U_{\alpha\beta\gamma\lambda}$  はオンサイトクーロン相互作用で,  $t_{\mathbf{r}\mathbf{r}',\alpha\beta}$  はホッピング積分で, それを波数空間へフーリエ変換したものが  $\epsilon_{\mathbf{k}\alpha\beta}$  である<sup>※2</sup>. 1 体 (ホッピング) 部分を  $H_0$ 、2 体 (相互作用) 部分を  $H_{\text{int}}$  と書くことにする.

### 1.1.2 crossing symmetry

(1.1) の相互作用部分において,  $\beta$  と  $\gamma$  の添え字を入れ替えると、

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} c_{\mathbf{r}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{r}\lambda}^\dagger c_{\mathbf{r}\beta} c_{\mathbf{r}\gamma} \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} c_{\mathbf{r}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{r}\lambda}^\dagger c_{\mathbf{r}\gamma} c_{\mathbf{r}\beta} \end{aligned} \quad (1.4)$$

1 行目から 2 行目への変形は生成演算子の反交換性を用いた. (1.1) と (1.4) を比較すると、

$$U_{\alpha\beta\gamma\lambda} = -U_{\alpha\gamma\beta\lambda} \quad (1.5)$$

のように、相互作用  $U$  には、生成演算子に対応する添え字同士、もしくは、消滅演算子に対応する添え字同士の入れ替えに対して符号が反転するという性質があることがわかる. これを **crossing symmetry** という.

## 1.2 実時間グリーン関数

### 1.2.1 定義

実時間グリーン関数は、遅延 (Retarded)、先進 (Advanced)、因果 (Causal) グリーン関数の 3 種類があり、それぞれ

$$G_{\alpha\beta}^{\text{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -i\theta(t - t') \langle c_{\mathbf{r}\alpha}(t) c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(t') + c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}\alpha}(t) \rangle \quad (1.6)$$

$$G_{\alpha\beta}^{\text{A}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = i\theta(t' - t) \langle c_{\mathbf{r}\alpha}(t) c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(t') + c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}\alpha}(t) \rangle \quad (1.7)$$

※2 ここでは空間の並進対称性は仮定することにする. 並進対称性がない場合は、

$$H = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\alpha\beta} \epsilon_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}'\beta}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} U_{\alpha\beta\gamma\lambda} c_{\mathbf{k}_1\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\lambda}^\dagger c_{\mathbf{k}_3\gamma} c_{\mathbf{k}_2\beta}}_{H_{\text{int}}} \quad (1.3)$$

$$G_{\alpha\beta}^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -i\langle T_t c_{\mathbf{r}\alpha}(t) c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(t') \rangle \quad (1.8)$$

$$= G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') + G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$$

で定義される<sup>※3</sup>。ここで、 $\theta(t)$  は階段関数、

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & (t > 0) \\ 0 & (t < 0) \end{cases} \quad (1.9)$$

$T_t$  は時間順序演算子と呼ばれる演算子で、後続く生成消滅演算子を右から時間の古い順番に並び替える操作を表す。この際、順序の入れ替えのたびに Fermion ではマイナス、Boson ではプラスの符号がつく。また、

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt} \quad (1.10)$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \quad (1.11)$$

は実時間のハイゼンベルグ表示である。

遅延グリーン関数  $G^R$  は時間の流れに沿って、時刻  $t'$  での事象 (粒子の生成および消滅) がそれより未来 ( $t > t'$ ) の事象 (粒子の消滅および生成) とどのような相関を持つかを記述する。一方、先進グリーン関数  $G^A$  は、時間の流れを遡る様に、時刻  $t'$  での事象 (粒子の生成および消滅) とそれより過去 ( $t' > t$ ) の事象 (粒子の消滅および生成) との相関を記述する。因果グリーン関数はこれら2つのグリーン関数の和となっており、過去から未来までの因果を表すような関数となっている<sup>※4</sup>。

物理系の性質を調べたい場合、系に擾乱を与え、その後の時刻での応答を観測するという手段が用いられる。この手続きに最も近いのが遅延グリーン関数であり、実際の解析においても遅延グリーン関数が最もよく用いられる。しかし、数学的な性質上、先進グリーン関数や因果グリーン関数が必要になる場合もある。以下で実時間グリーン関数と言った時、特に明示されていない場合は遅延グリーン関数を指すと思ってほしい。

## 1.2.2 運動方程式

trace の cyclic 則と  $H$  同士が交換することを考慮すると、グリーン関数は  $t - t'$  にのみ依存することがわかる。そこで、 $t - t'$  を改めて  $t$  と書くと、

$$G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -i\theta(t)\langle c_{\mathbf{r}\alpha}(t) c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger + c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger c_{\mathbf{r}\alpha}(t) \rangle \quad (1.12)$$

と変形できる。消滅演算子の微分は、

$$i\frac{\partial}{\partial t} c_{\mathbf{r}\alpha}(t) = [c_{\mathbf{r}\alpha}(t), H] = \sum_{\mathbf{r}''\gamma} (t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \mu\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''}\delta_{\alpha\gamma}) c_{\mathbf{r}''\gamma} + e^{iHt} [c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-iHt} \quad (1.13)$$

となるので、グリーン関数の運動方程式は、

$$i\frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{\mathbf{r}''\gamma} (t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \mu\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''}\delta_{\alpha\gamma}) G_{\gamma\beta}^R(\mathbf{r}'', \mathbf{r}, t) + (-i\langle T e^{iHt} [c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-iHt} c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger \rangle) + \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}\delta_{\alpha\beta}\delta(t) \quad (1.14)$$

となる。ここで、天下り的ではあるが、

$$(-i\langle T e^{iHt} [c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-iHt} c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger \rangle) = \sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int dt' \Sigma_{\alpha\gamma}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t - t') G_{\gamma\beta}^R(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t') \quad (1.15)$$

※3  $\hbar = 1$  を単位系を用いる。

※4 たいそうな言い方をしているが、あまり深淵な意味を求めすぎると訳がわからなくなるかも..? 単に数学的な方便で導入されているものであると思ってるくらいの方がいいかも?

によって自己エネルギー  $\Sigma$  を導入すると、

$$\sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int dt' \left[ \left( i \frac{\partial}{\partial t} + \mu \right) \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''} \delta(t-t') \delta_{\alpha\gamma} - t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} \delta(t-t') - \Sigma_{\alpha\gamma}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t-t') \right] G_{\gamma\beta}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', t') = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta(t) \quad (1.16)$$

が得られる。

$$G_{\alpha\beta}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \int d\omega G_{\alpha\beta}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) e^{-i\omega t} \quad (1.17)$$

を代入して整理すると、

$$\sum_{\mathbf{r}''\gamma} \left[ \left( (\omega + \mu) \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''} \delta_{\alpha\gamma} - t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \Sigma_{\alpha\gamma}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \omega) \right) \right] G_{\gamma\beta}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \omega) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (1.18)$$

空間の並進対称性を仮定すれば、以下のように空間変数もフーリエ変換することができて、

$$\sum_{\gamma} \left[ \left( (\omega + \mu) \delta_{\alpha\gamma} - \epsilon_{\mathbf{k}\alpha\gamma} - \Sigma_{\alpha\gamma}^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) \right) \right] G_{\gamma\beta}^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.19)$$

行列的に書けば

$$[(\omega + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega)] G^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) = I \quad \rightarrow \quad G^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) = [(\omega + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} \quad (1.20)$$

が得られる。相互作用がない場合 ( $U = 0$ ) は

$$G^{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) = [(\omega + i\delta + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}}]^{-1} \quad (1.21)$$

となる。ここで、 $\delta$  は正の微小量である<sup>※5</sup>。同様の手続きにより、先進グリーン関数は、

$$G^{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{cases} [(\omega - i\delta + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}}]^{-1} & (U = 0) \\ [(\omega + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} & (U \neq 0) \end{cases} \quad (1.22)$$

となる。

### 1.2.3 スペクトル表示

ハミルトニアンの固有方程式  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$  を用いると、遅延グリーン関数は、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= -i\theta(t) \sum_{mn} e^{\beta(\Omega - E_m)} \langle m|c_{\mathbf{r}\alpha}|n\rangle \langle n|c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}|m\rangle e^{i(E_m - E_n)t} + \langle m|c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}|n\rangle \langle n|c_{\mathbf{r}\alpha}|m\rangle e^{i(E_m - E_n)t} \\ &= -i\theta(t) \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}}{e^{-\beta\Omega}} \langle m|c_{\mathbf{r}\alpha}|n\rangle \langle n|c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}|m\rangle e^{i(E_m - E_n)t} \end{aligned} \quad (1.23)$$

となる。1行目で  $m$  と  $n$  を入れ替えてうまく整理すれば2行目に変形できる。空間の並進対称性を仮定して Fourier 変換を行うと、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{r} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) e^{i(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{k}} e^{i\omega t} \\ &= -i \sum_{mn} \frac{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}}{e^{-\beta\Omega}} \langle m|c_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle \langle n|c_{\mathbf{k}\beta}^{\dagger}|m\rangle \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega - E_n + E_m)t} \end{aligned} \quad (1.24)$$

※5 この  $\delta$  の出所は Sec.1.2.3 で。

を得る。しかし、このまま積分を実行すると、 $t = \infty$  の値が不定となってしまう。それを避けるために、正の微小量  $\delta$  を導入し<sup>\*6</sup>、時間積分の部分を

$$\int_0^\infty e^{-\delta t + i(\omega - E_n + E_m)t} dt \quad (1.25)$$

と置き換えて、積分を実行すると、

$$G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})}{e^{-\beta\Omega}} \langle m | c_{\mathbf{k}\alpha} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\beta}^\dagger | m \rangle \frac{1}{\omega + i\delta - (E_n - E_m)} \quad (1.26)$$

が得られる。先進グリーン関数も同様に計算できるが、時間積分の範囲が  $[-\infty : 0]$  であるので、遅延グリーン関数の場合と  $\delta$  の前の符号が逆になり、

$$G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})}{e^{-\beta\Omega}} \langle m | c_{\mathbf{k}\alpha} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\beta}^\dagger | m \rangle \frac{1}{\omega - i\delta - (E_n - E_m)} \quad (1.27)$$

となる。Sec.1.2.2 では、自己エネルギー  $\Sigma^R, \Sigma^A$  を天下り的に導入したので、これらの関係は不明であったが、(1.26)(1.27) より、 $\Sigma^R \leftrightarrow \Sigma^A$  の変換は  $i\delta$  の符号を変えれば良いだけであることがわかる。ここで

$$A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{mn} \frac{(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})}{e^{-\beta\Omega}} \langle m | c_{\mathbf{k}\alpha} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\beta}^\dagger | m \rangle \delta(\omega - (E_n - E_m)) \quad (1.28)$$

を導入すると、グリーン関数は、

$$G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{k}, \omega) = \int d\omega' \frac{A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + i\delta - \omega'} \quad (1.29)$$

$$G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}, \omega) = \int d\omega' \frac{A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - i\delta - \omega'} \quad (1.30)$$

とかけることがわかる。(1.28) は  $E_m - E_n$  のエネルギー励起を統計力学的な重み  $(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})/e^{-\beta\Omega}$  と量子力学的な重み  $\langle m | c_{\mathbf{k}\alpha} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\beta}^\dagger | m \rangle$  をかけて足し上げるという形になっており、1 粒子の励起スペクトルを表している。(1.28) をスペクトル関数、(1.29) (1.30) をスペクトル表示と呼ぶ。複素関数論の公式  $\frac{1}{x \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$  を用いれば

$$G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{P} \int d\omega' \frac{A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'} - i\pi A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.31)$$

$$G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{P} \int d\omega' \frac{A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'} + i\pi A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) \quad (1.32)$$

と変形できる。ここで  $\mathcal{P}$  は主値積分を表す。(1.31), (1.32) より、スペクトル関数は、遅延・先進グリーン関数がわかっていれば、

$$A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} [G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}, \omega) - G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{k}, \omega)] \quad (1.33)$$

のように求めることができる。また、(1.28) より、スペクトル関数の対角成分  $A_{\alpha\alpha}$  は実数であるので、軌道対角成分だけに関してはグリーン関数の虚部を取るだけで計算できて、

$$\begin{aligned} A_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha\alpha}^R(\mathbf{k}, \omega) \\ &= \begin{cases} \delta(\omega + \mu - \epsilon_{\alpha\alpha}(\mathbf{k})) & (U = 0) \\ \frac{-\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)/\pi}{\{\omega + \mu - \epsilon_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)\}^2 + \{\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)\}^2} & (U \neq 0) \end{cases} \end{aligned} \quad (1.34)$$

のようになる。これを描いたのが図 1(a) であり、 $U = 0$  の時は  $\epsilon(\mathbf{k}) - \mu$  のエネルギーにデルタ関数のピークが立っていて、 $U \neq 0$  となると、自己エネルギーの実部によってエネルギーがシフトし、虚部によってデルタ関数がボケてローレンツ関数型になる。これをバンド図で見ると図 1(b) のようになる。 $U = 0$  で (b) の左図の紫色のバンドの線の各点に紙面の裏から表に向かってデルタ関数のピークが立っており、 $U \neq 0$  となると (b) 右図のようにピーク位置がずれてボケる。

<sup>\*6</sup> この微小量は、物理的には、無限の未来ではグリーン関数がゼロ、すなわち、時刻  $t = 0$  での事象と時刻  $t = \infty$  の事象は独立であるという仮定を意味する。

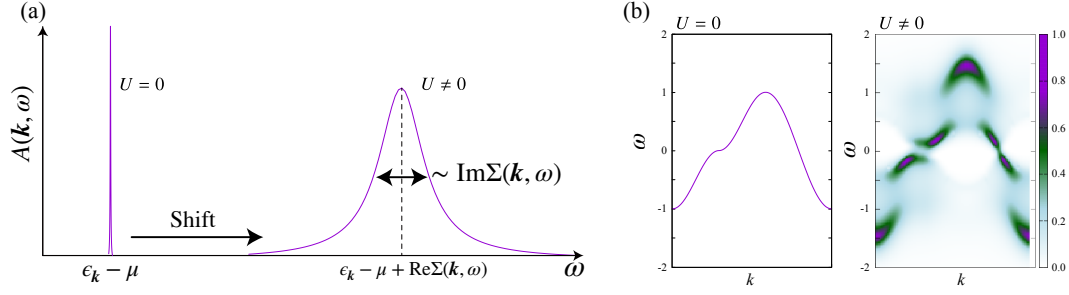


図 1:

### 1.3 虚時間グリーン関数

#### 1.3.1 定義

虚時間グリーン関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\langle T_{\tau} c_{r\alpha}(\tau) c_{r'\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle \quad (1.35)$$

のように定義される。ここで、時間順序積  $T_{\tau}$  は時間変数が大きいものを左に持ってきて、その際にフェルミオンであれば  $-1$ 、ボソンであれば  $+1$  をかける、という演算子である。 $\tau$  は逆温度  $\beta = 1/T$  と関連する変数であり、 $0 \leq \tau, \tau' \leq \beta$  である。また、

$$A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H} \quad (1.36)$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \quad (1.37)$$

は虚時間のハイゼンベルグ表示である<sup>※7</sup>。実時間の時と同様、trace の cyclic 則と  $H$  同士が可換であることから

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = -\langle T_{\tau} c_{r\alpha}(\tau) c_{r'\beta}^{\dagger} \rangle \quad (1.38)$$

と変形が可能である。このとき、 $\tau - \tau' \rightarrow \tau$  と置き換えているので、新しい  $\tau$  の定義域は  $-\beta \leq \tau \leq \beta$  となる。 $-\beta < \tau < 0$  として、虚時間が  $\beta$  だけ進んだ場合を考えると、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau + \beta) &= -\text{Tr}(e^{-\beta H} e^{(\beta+\tau)H} c_{r\alpha} e^{-(\tau+\beta)H} c_{r'\beta}^{\dagger}) \\ &= -\text{Tr}(e^{-\beta H} c_{r'\beta}^{\dagger} e^{\tau H} c_{r\alpha} e^{-\tau H}) \\ &= -G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) \end{aligned} \quad (1.39)$$

が得られる。時間順序に関して  $\tau = \beta$  を  $\tau = -\beta$  と同一視すると約束した上<sup>※8</sup>で  $\tau$  の定義域を  $-\beta \leq \tau \leq \beta$  の外に拡張すると、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau + 2\beta) = G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) \quad (1.40)$$

とを得ることができ、グリーン関数は  $2\beta$  の周期関数となる。 $-\beta \leq \tau \leq \beta$  の範囲で  $G(\tau)$  をフーリエ級数に展開すると、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, n) e^{-i \frac{\pi n}{\beta} \tau} \quad (1.41)$$

※7 実時間の場合と違って、 $A^{\dagger}(\tau) \neq (A(\tau))^{\dagger} = A^{\dagger}(-\tau)$  であることに注意。

※8 もう少し正確に言うと、時間順序としては  $\beta + \delta$  ( $\delta$  は正の微小量) は  $-\beta + \delta$  として扱われると約束するということである。このように虚時間が  $\beta$  を超えると、 $-\beta$  に戻ってくるとしておかないと、時間順序演算子の定義と衝突してしまい、周期  $2\beta$  の周期関数として拡張できない。虚時間グリーン関数の計算において、 $\tau$  に関する積分域が  $-\beta \leq \tau \leq \beta$  から外にでることはないが、 $G(\tau)$  等の定義域を一般化するときには、時間順序演算子  $T$  との兼ね合いに気をつけなければならない。

フーリエ成分は

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) e^{i\frac{\pi n}{\beta} \tau} \\
&= \frac{1}{2} \left( \int_0^{\beta} d\tau G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) e^{i\frac{\pi n}{\beta} \tau} + \int_{-\beta}^0 d\tau G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) e^{i\frac{\pi n}{\beta} \tau} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left( \int_0^{\beta} d\tau G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) e^{i\frac{\pi n}{\beta} \tau} + \int_0^{\beta} d\tau \underbrace{G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau - \beta)}_{-G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)} e^{i\frac{\pi n}{\beta} (\tau - \beta)} \right) \\
&= \frac{1 - e^{-i\pi n}}{2} \int_0^{\beta} d\tau G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) e^{i\frac{\pi n}{\beta} \tau}
\end{aligned} \tag{1.42}$$

となり、 $n$  が奇数の成分しか残らないことがわかる。そこで、

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad (n \in \mathbb{Z}) \tag{1.43}$$

とすると、グリーン関数のフーリエ変換は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) e^{i\omega_n \tau} \tag{1.44}$$

と書くことができる。(1.43) の  $\omega_n$  は松原周波数と呼ばれる。ボソンの場合は、(1.43) において  $n$  が偶数の寄与のみが残るので、松原周波数は、

$$\nu_n = \frac{2n\pi}{\beta}, \quad (n \in \mathbb{Z}) \tag{1.45}$$

と定義される。

### 1.3.2 運動方程式

実時間の場合と同様、運動方程式を導出する。消滅演算子の微分は、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} c_{r\alpha}(\tau) = -[c_{r\alpha}(\tau), H] = - \sum_{\mathbf{r}''\gamma} (t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \mu \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''} \delta_{\alpha\gamma}) c_{\mathbf{r}''\gamma}(\tau) - e^{\tau H} [c_{r\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-\tau H} \tag{1.46}$$

となるので、グリーン関数の運動方程式は、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) &= - \sum_{\mathbf{r}''\gamma} (t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \mu \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''} \delta_{\alpha\gamma}) G_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}, \tau) \\
&\quad - \left( -\langle T_{\tau} e^{\tau H} [c_{r\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-\tau H} c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger} \rangle \right) - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta(\tau)
\end{aligned} \tag{1.47}$$

となる<sup>※9</sup>。天下りの的ではあるが、

$$\left( -\langle T_{\tau} e^{\tau H} [c_{r\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-\tau H} c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger} \rangle \right) = \sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int d\tau' \Sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau - \tau') G_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \tau') \tag{1.49}$$

によって自己エネルギー  $\Sigma$  を導入すると、

$$\sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int d\tau' \left[ \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right) \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''} \delta(\tau - \tau') \delta_{\alpha\gamma} - t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} \delta(\tau - \tau') - \Sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau - \tau') \right] G_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \tau') = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta(\tau) \tag{1.50}$$

<sup>※9</sup> 虚時間グリーン関数の時間順序演算子を用いた定義だと、時間微分がわかりにくいかもしれない。虚時間グリーン関数を時間順序演算子ではなく階段関数で表現すると、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\theta(\tau - \tau') \langle c_{r\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}(\tau') c_{r\alpha}(\tau) \rangle \tag{1.48}$$

となる。この微分を考えれば (1.47) が得られる。



が得られる.

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = T \sum_n G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \quad (1.51)$$

を代入して整理すると、

$$\sum_{\mathbf{r}''\gamma} [(i\omega_n + \mu) \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''} \delta_{\alpha\gamma} - t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \Sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', i\omega_n)] G_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', i\omega_n) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (1.52)$$

空間の並進対称性を仮定すれば、以下のように空間変数もフーリエ変換することができて、

$$\sum_{\gamma} [(i\omega_n + \mu) \delta_{\alpha\gamma} - \epsilon_{\mathbf{k}\alpha\gamma} - \Sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n)] G_{\gamma\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.53)$$

行列的に書けば

$$[(i\omega_n + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)] G(\mathbf{k}, i\omega_n) = I \quad \rightarrow \quad G(\mathbf{k}, i\omega_n) = [(i\omega_n + \mu)I - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)]^{-1} \quad (1.54)$$

が得られる.

### 1.3.3 実時間グリーン関数との関係

Sec.1.2.3 と同様な計算をすると、虚時間グリーン関数に対してもスペクトル表示を得ることができて、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int d\omega \frac{A_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \quad (1.55)$$

となる. 実時間グリーン関数のスペクトル表示 (1.29) (1.30) と比較すれば、虚時間グリーン関数から遅延グリーン関数を求める際は  $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$  とすればよく、虚時間グリーン関数から先進グリーン関数を求める際は  $i\omega_n \rightarrow \omega - i\delta$  とすればよいことがわかる. 松原周波数形式のグリーン関数は以下で説明するような (有限温度での) ダイアグラム展開に不可欠であると同時に、周波数変数が離散的であるので数値計算と相性が良いという長所も持っている. しかし、人間が理解しやすい情報や実験と対応の良い情報を引き出すのは実周波数 (実時間) 形式のグリーン関数の方が優れている. したがって、計算自体は松原形式で行って、解が得られたら  $i\omega_n \rightarrow \omega \pm i\delta$  を行なって人が理解しやすい情報を取り出す、というのが理想的ではある. しかし、解析計算の場合は単に変数の置き換えを行えば良いだけであるが、数値計算の場合はそう簡単ではない. 数値的解析接続<sup>※10</sup>の方法はいくつか提案されているが [6–8]、それぞれ一長一短である. また、松原形式で精度の良い解が得られたとしても (数値的) 解析接続の際に精度が落ちるということもたびたび起こる. ゆえに、実際は、得られる情報は限定的ではあるが、できるだけ松原形式のまま解析を行うということもよくある<sup>※11</sup>.

## 2 ダイアグラム展開

前節で、虚時間や松原周波数というわけのわからないものを変数に持つ虚時間 (松原) グリーン関数を導入した. なぜこのようなわけのわからないものを導入するのかと言うと、それは虚時間グリーン関数が、相互作用しあう多粒子系の解析に有効な方法の一つである (有限温度の) ダイアグラム展開に必須の道具だからである. 虚時間グリーン関数を用いることで、相互作用しあう多粒子系の相関関数等を計算するための厳密な手続きを与えることができる<sup>※12</sup>. ここでは、グリーン関数に着目して<sup>※13</sup> ダイアグラム展開の方法を解説する.

※10 解析計算における解析接続は解析的解析接続? なんかうるさいな...

※11 精度を重視するか、より直感的で詳細な情報を重視するか、の違いである.

※12 実際に計算が実行できるかはまた別問題.

※13 分配関数や熱力学ポテンシャルを対象としてダイアグラム展開を導入したあとでグリーン関数を導入するテキストも多いが、ここでは最初からグリーン関数を対象とする.

## 2.1 相互作用表示

まず、ダイアグラム展開の基本となる相互作用表示というものを導入する。相互作用表示は次のように定義される。

$$A^I(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0} \quad (2.1)$$

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H_0} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H_0})} \quad (2.2)$$

(2.1) (2.2) は  $H_{\text{int}} = 0$ 、すなわち、相互作用がない場合のハイゼンベルグ表示および統計平均を表すものである<sup>\*14</sup>。これを用いると、ハミルトニアン  $H$  で表される系の統計平均は

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H_0} S(\beta) A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H_0} S(\beta))} = \frac{\langle S(\beta) A \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0} \quad (2.3)$$

と表すことができる。ここで

$$S(\tau) = e^{\tau H_0} e^{-\tau H} \quad (2.4)$$

である。(2.4) を微分すると

$$\frac{\partial}{\partial \tau} S(\tau) = e^{\tau H_0} (H_0 - H) e^{-\tau H} = -e^{\tau H_0} H_{\text{int}} e^{-\tau H_0} e^{\tau H_0} e^{-\tau H} = -H_{\text{int}}^I(\tau) S(\tau) \quad (2.5)$$

が得られる。これを積分形に直すと

$$S(\tau) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \cdots \int_0^{\tau_n} d\tau_n [H_{\text{int}}^I(\tau_1) H_{\text{int}}^I(\tau_2) \cdots H_{\text{int}}^I(\tau_n)] \quad (2.6)$$

となる。 $\tau_1$  と  $\tau_2$  の変数を入れ替えると

$$S(\tau) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\tau} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_3 \cdots \int_0^{\tau_n} d\tau_n [H_{\text{int}}^I(\tau_2) H_{\text{int}}^I(\tau_1) \cdots H_{\text{int}}^I(\tau_n)] \quad (2.7)$$

と書けるわけだが、(2.6) と (2.7) は、 $\tau_1$  と  $\tau_2$  の時間順序が逆になったものと見ることもできる。これを踏まえると、時間順序演算子を用いて<sup>\*15</sup>

$$S(\tau) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n T_{\tau} [H_{\text{int}}^I(\tau_1) H_{\text{int}}^I(\tau_2) \cdots H_{\text{int}}^I(\tau_n)] \quad (2.8)$$

のように積分区間を全ての変数で  $[0 : \tau]$  とすることができる<sup>\*16</sup>。ここで、

$$S(\tau, \tau') = S(\tau) S^{-1}(\tau') \quad (2.9)$$

を導入する。(2.8) を導出したのと同様にすれば、

$$S(\tau, \tau') = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n T_{\tau} [H_{\text{int}}^I(\tau_1) H_{\text{int}}^I(\tau_2) \cdots H_{\text{int}}^I(\tau_n)] \quad (2.10)$$

<sup>\*14</sup>じやあんで“相互作用表示”やねんってなる。シュレディンガー表示では、時間発展は状態ベクトルが担い、演算子は時間発展しない。すなわち、 $|\psi_S(t)\rangle = e^{-\tau H} |\psi\rangle$ ,  $A_S = A$  である。逆に、ハイゼンベルグ表示では、時間発展は演算子が担い、状態ベクトルは変化しない。すなわち、 $|\psi_H(t)\rangle = |\psi\rangle$ ,  $A_H(t) = e^{\tau H} A e^{-\tau H}$  である。相互作用表示はこれらの合いの子のような表示で、 $|\psi_I(t)\rangle = e^{\tau H_0} e^{-\tau H} |\psi\rangle$ ,  $A_I(t) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}$  である。演算子の方を見ると、時間発展は相互作用のないハミルトニアンが担っていることがわかる。非常に短い時間間隔  $d\tau \ll 1$  を考えて鈴木トロッター分解  $e^{-d\tau H} = e^{-d\tau(H_0 + H_{\text{int}})} = e^{-d\tau H_0} e^{-d\tau H_{\text{int}}}$  を踏まえると、状態ベクトルの時間発展が相互作用ハミルトニアン  $H_{\text{int}}$  によって駆動されていることがわかる。このように“相互作用表示”と言う名前は、状態ベクトルの立場に立った時の名前である。 $H_0$  の方を押し付けられた演算子の立場からすれば“相互作用してない表示”である。

<sup>\*15</sup> $H_{\text{int}}$  は生成演算子と消滅演算子それぞれ 2 つずつからなるので  $T_{\tau}$  による符号の変化はない。

<sup>\*16</sup> $n!$  は  $n$  個の  $H_{\text{int}}$  の並び替えの場合の数。

を得ることができる. (2.10) を用いると、グリーン関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\langle T_{\tau} c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle = -\frac{\langle T_{\tau} S(\beta, \tau) c_{\mathbf{r}\alpha}^{\dagger}(\tau) S(\tau, \tau') c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}(\tau') S(\tau', 0) \rangle_0}{\langle S(\beta, 0) \rangle_0} \quad (2.11)$$

のように表される.  $S(\tau, \tau')$  がそれぞれ偶数個の  $c, c^{\dagger}$  からなっていることを考えると、時間順序演算子  $T_{\tau}$  の中で  $c, c^{\dagger}$  と  $S$  は順番を変えて良い. また、(2.9) の定義より、 $S(\tau, \tau'') = S(\tau, \tau') S(\tau', \tau'')$  となるので、結局

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\frac{\langle T_{\tau} S(\beta, 0) c_{\mathbf{r}\alpha}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle_0}{\langle S(\beta, 0) \rangle_0} = -\frac{\langle T_{\tau} S(\beta) c_{\mathbf{r}\alpha}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0} \quad (2.12)$$

を得る. (2.12) から、グリーン関数の分子・分母の  $n$  次の項は

$$\langle T_{\tau} c_{i\alpha}^{\dagger}(\tau) H_{\text{int}}^{\dagger}(\tau_1) H_{\text{int}}^{\dagger}(\tau_2) \cdots H_{\text{int}}^{\dagger}(\tau_n) c_{j\beta}^{\dagger}(\tau') \rangle_0 \quad (2.13)$$

$$\langle T_{\tau} H_{\text{int}}^{\dagger}(\tau_1) H_{\text{int}}^{\dagger}(\tau_2) \cdots H_{\text{int}}^{\dagger}(\tau_n) \rangle_0 \quad (2.14)$$

のように、 $H_{\text{int}}$  をたくさん含んでいることがわかる.  $H_{\text{int}}$  は  $c$  と  $c^{\dagger}$  を2つずつ含んでおり、グリーン関数を計算するには、多数の  $c, c^{\dagger}$  の積からなる統計平均を計算しなければならないことがわかる.

以降では、 $H_0$  での統計平均  $\langle \cdots \rangle_0$  の  $\cdots$  の部分に現れる演算子は全て相互作用表示であるとして  $\mathbf{I}$  の添え字は省略する.

## 2.2 Wick の定理, Bloch-de Deominicis の定理

前節の議論から、グリーン関数を計算するためには、多数の  $c, c^{\dagger}$  の積からなる統計平均を計算しなければならないことがわかった. このような項をまともに計算するのは一般に非常に困難であるが、標題の定理を用いることで、比較的計算が容易な  $c, c^{\dagger}$  の組の統計平均  $\langle cc^{\dagger} \rangle_0$  の積に分解することができる.

$A$  を  $c$  または  $c^{\dagger}$  を表す演算子とする.

$$\{A_i, A_j\} = A_i A_j + A_j A_i = (ij) \quad (2.15)$$

が成り立つとする. ここで、 $(ij)$  は  $c$ -数である. この関係を繰り返し用いると、

$$\begin{aligned} \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0 &= (12) \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 - \langle A_2 A_1 A_3 \cdots A_{2n} \rangle_0 \\ &= (12) \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 - (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \langle A_2 A_3 A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 \\ &= (12) \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 - (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots \\ &\quad + (1, 2n) \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle_0 - \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

のように変形できる. (2.16) の最後の項は

$$\langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle_0 = \frac{\text{Tr}(A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 e^{-\beta H_0})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_0})} \quad (2.17)$$

であり、

$$c_l e^{-\beta H_0} = e^{-\beta H_0} \sum_{l'} (e^{-\beta \hat{\epsilon}})_{ll'} c_{l'} \quad (2.18)$$

$$c_l^{\dagger} e^{-\beta H_0} = e^{-\beta H_0} \sum_{l'} c_{l'}^{\dagger} (e^{\beta \hat{\epsilon}})_{l'l}^{\dagger} = \sum_{l'} (e^{\beta \hat{\epsilon}})_{ll'}^* c_{l'}^{\dagger} \quad (2.19)$$

が成り立つ. ここで,  $l$  は空間の自由度 ( $\mathbf{r}$  や  $\mathbf{k}$ ) と内部自由度  $\alpha$  を合わせた添え字であり<sup>\*17</sup>、 $\hat{\epsilon}$  は  $l$  で識別される成分を持つ hopping の行列である<sup>\*18</sup>.

$$M_{ll'} = \begin{cases} (e^{-\beta\hat{\epsilon}})_{ll'} & (\text{消滅演算子の場合}) \\ (e^{\beta\hat{\epsilon}})_{ll'}^* & (\text{生成演算子の場合}) \end{cases} \quad (2.22)$$

と書くことにすると、

$$\begin{aligned} \sum_l (I + M)_{ll} \langle A_l A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0 &= (12) \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 \\ &\quad - (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots + (1, 2n) \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

が得られる.  $n = 1$  の場合を考えると、

$$(12) = \sum_l (1 + M)_{ll} \langle A_l A_2 \rangle_0 \quad (2.24)$$

(2.24) を用いると、(2.16) は、

$$\begin{aligned} \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0 &= \langle A_1 A_2 \rangle_0 \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 - \langle A_1 A_3 \rangle_0 \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots \\ &\quad + \langle A_1 A_{2n} \rangle_0 \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.25)$$

となる. (2.25) を繰り返し用いると、

$$\langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0 = \sum (-1)^{\delta(p)} \langle A_{i_1} A_{i_2} \rangle_0 \langle A_{i_3} A_{i_4} \rangle_0 \cdots \langle A_{i_{2n-1}} A_{i_{2n}} \rangle_0 \quad (2.26)$$

となる. (2.26) の  $\sum$  は、

$$i_1 < i_2, i_3 < i_4, \cdots, i_{2n-1} < i_{2n} \quad (2.27)$$

$$i_1 < i_3 < i_5 < \cdots < i_{2n-1} \quad (2.28)$$

の条件下での和を表す. また、 $\delta(p)$  は、もとの  $(1, 2, \cdots, 2n)$  を  $(i_1, i_2, \cdots, i_{2n})$  と並び替えるときの置換の数である. すなわち、 $A_1 A_2 \cdots A_{2n}$  から可能な並べ替えを全て書き出し、左から2つずつの縮約を作り、並べ替えの際の置換の数が奇数であれば  $(-1)$  を、偶数であれば  $(+1)$  をつけて足し上げることで、 $\langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle_0$  が求まる、というのが (2.26) の言っていることである.

ここでは、 $A_i$  がフェルミオンの場合を示したが、ボソンの場合は (2.26) の  $(-1)$  を  $(+1)$  に置き換えれば良い.

## 2.3 グリーン関数の Wick 分解

### 2.3.1 時間順序

グリーン関数は (2.11) のように書かれるので、その分子と分母には (2.13), (2.14) のような多数の  $H_{\text{int}}$  の積になっている項が現れる. 時間順序積  $T_\tau$  によって (2.8) 式の積分の中で、 $H_{\text{int}}(\tau_1), \cdots, H_{\text{int}}(\tau_n)$  は様々な順序を

<sup>\*17</sup>実空間表示の場合は  $l = (\mathbf{r}, \alpha)$ 、波数空間表示の場合は  $l = (\mathbf{k}, \alpha)$  みたいな感じ.

<sup>\*18</sup> $\hat{\epsilon}$  の成分をあらわに書けば、

$$(\hat{\epsilon})_{\mathbf{k}\alpha, \mathbf{k}'\beta} = \epsilon_{\mathbf{k}\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (2.20)$$

実空間表示の場合、

$$(\hat{\epsilon})_{\mathbf{r}\alpha, \mathbf{r}'\beta} = t_{\mathbf{r}\mathbf{r}', \alpha\beta} \quad (2.21)$$

変える. しかし、この時間順序による影響は、以下のように考えることで実際の計算の際にはいちいち考慮しなくても良いことがわかる.

まず、 $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \dots > \tau_n$  として、グリーン関数の分子 (2.13) の生成・消滅演算子の部分だけを抜き出すと、

$$\begin{aligned} & \langle c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}_1\alpha_1}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\lambda_1}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\gamma_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\lambda_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\gamma_2}(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\beta_2}(\tau_2) \dots \\ & \dots c_{\mathbf{r}_n\alpha_n}^\dagger(\tau_n) c_{\mathbf{r}_n\lambda_n}^\dagger(\tau_n) c_{\mathbf{r}_n\gamma_n}(\tau_n) c_{\mathbf{r}_n\beta_n}(\tau_n) c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(\tau') \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

これを Wick の定理によって、これらを縮約の積に分解したとき

$$\langle c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) \rangle_0 \langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0 \quad (2.30)$$

という項が現れたとする. ここで、 $\tau_1, \tau_2$  の時間変数を持つ他の生成・消滅演算子 ( $c_{\mathbf{r}_1\beta_1}, c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger$  以外の演算子) は、 $\tau_3, \dots, \tau_n$  の生成・消滅演算子と縮約を作っているとする. (2.29) から (2.30) の並び方にする過程で符号変化はないとする. すなわち、元の並び方から偶置換で作られる並びであるとする.

次に、 $\tau_2 > \tau_1 > \tau_3 > \dots > \tau_n$  であるとする. このとき、元の順番は

$$\begin{aligned} & \langle c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\lambda_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\gamma_2}(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\beta_2}(\tau_2) c_{\mathbf{r}_1\alpha_1}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\lambda_1}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\gamma_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) \dots \\ & \dots c_{\mathbf{r}_n\alpha_n}^\dagger(\tau_n) c_{\mathbf{r}_n\lambda_n}^\dagger(\tau_n) c_{\mathbf{r}_n\gamma_n}(\tau_n) c_{\mathbf{r}_n\beta_n}(\tau_n) c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger(\tau') \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

であり、これを Wick 分解して

$$\langle c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) \rangle_0 \langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0 \quad (2.32)$$

が現れたとする. ここで  $\langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0$  の部分の縮約を成す生成・消滅演算子の組み合わせ (縮約の中での順番も含めて) は (2.30) と全く同じであるとする. ただし、(2.27), (2.28) の条件によって、この部分の  $\tau_1, \tau_2$  に関わる部分の順番は (2.30) と逆になるが、縮約  $\langle c^\dagger(\tau_1) c(\tau_i) \rangle_0$  と  $\langle c(\tau_2) c^\dagger(\tau_j) \rangle_0$  の順番を入れ替えても符号は変わらないので、結局 (2.32) の  $\langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0$  の部分は順番まで含めて (2.30) と全く同じ形に変形できる. (2.30) が元の並びから偶置換でできているとするならば、(2.32) は奇置換になるので、 $(-1)$  の符号がつく. 結局 (2.30), (2.32) はまとめて

$$\begin{cases} (+ \langle c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) \rangle_0) \langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0 & (\tau_1 > \tau_2) \\ (- \langle c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) \rangle_0) \langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0 & (\tau_2 > \tau_1) \end{cases} \quad (2.33)$$

と書ける. (2.33) の一番左の縮約は (相互作用のない) グリーン関数の定義そのものなので、結局

$$-G_{0,\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2\beta_1\alpha_2}(\tau_1, \tau_2) \langle \dots \rangle_0 \dots \langle \dots \rangle_0 \quad (2.34)$$

となる. このように、時間順序の影響は縮約をグリーン関数に置き換えることでその定義に吸収することができる. したがって、(2.13), (2.14) のような項を計算する際には、適当な時間順序 (例えば  $\tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_n$ ) を基準にして、それを Wick 分解し  $c(\tau_i)$  と  $c^\dagger(\tau_j)$  が作る縮約を  $-G_0(\tau_i, \tau_j)$  で置き換えればよいということになる.

### 2.3.2 全体の符号

これを踏まえた上で、グリーン関数を Wick 分解するときの符号について考える. まず、(2.29) は偶置換によって

$$\langle c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}_1\alpha_1}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\beta_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\lambda_1}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{r}_1\gamma_1}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\beta_2}(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\lambda_2}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_2\gamma_2}(\tau_2) \dots$$

$$\cdots c_{r_n \alpha_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \beta_n}(\tau_n) c_{r_n \lambda_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \gamma_n}(\tau_n) c_{r' \beta}^\dagger(\tau') \rangle_0 \quad (2.35)$$

のように生成演算子と消滅演算子が交互に並ぶ順序に変更できる。この状態から  $c$  と  $c^\dagger$  の組を作っていくことを考える。例として、 $c_{r\alpha}(\tau)$  と  $c_{r_2\lambda_2}^\dagger(\tau_2)$  が組をつくるとする。このとき、まず、

$$c_{r\alpha}(\tau) c_{r_1 \alpha_1}^\dagger(\tau_1) \underbrace{c_{r_2 \beta_2}(\tau_2) c_{r_2 \lambda_2}^\dagger(\tau_2)} \cdots c_{r_1 \beta_1}(\tau_1) c_{r_1 \lambda_1}^\dagger(\tau_1) c_{r_1 \gamma_1}(\tau_1) c_{r_2 \alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{r_2 \gamma_2}(\tau_2) \cdots \cdots c_{r_n \alpha_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \beta_n}(\tau_n) c_{r_n \lambda_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \gamma_n}(\tau_n) c_{r' \beta}^\dagger(\tau') \quad (2.36)$$

のように、 $c_{r_2 \lambda_2}^\dagger(\tau_2)$  を一つ左の  $c_{r_2 \beta_2}(\tau_2)$  とセットで  $c_{r_1 \alpha_1}^\dagger(\tau_1)$  の右に持ってくる。すなわち、偶置換によって作りたい組を最も近い位置に持ってくるのである。その後、

$$\{c_{r\alpha}(\tau) c_{r_2 \lambda_2}^\dagger(\tau_2)\} c_{r_2 \beta_2}(\tau_2) c_{r_1 \alpha_1}^\dagger(\tau_1) c_{r_1 \beta_1}(\tau_1) c_{r_1 \lambda_1}^\dagger(\tau_1) c_{r_1 \gamma_1}(\tau_1) c_{r_2 \alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{r_2 \gamma_2}(\tau_2) \cdots \cdots c_{r_n \alpha_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \beta_n}(\tau_n) c_{r_n \lambda_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \gamma_n}(\tau_n) c_{r' \beta}^\dagger(\tau') \quad (2.37)$$

と順番を変更すると、これは奇置換になるので、 $(-1)$  がつく。これによって、まず一つ目的の組ができて、残りの部分は  $c$  と  $c^\dagger$  が交互に並ぶ状態になっている。ただし、 $\tau_2$  の演算子が一つ  $\tau_1$  より前にあるので、 $c$  と  $c^\dagger$  が交互に並ぶ状態を維持しながら時間の順序を元に戻す、すなわち、

$$\{c_{r\alpha}(\tau) c_{r_2 \lambda_2}^\dagger(\tau_2)\} c_{r_1 \beta_1}(\tau_1) c_{r_1 \lambda_1}^\dagger(\tau_1) c_{r_1 \gamma_1}(\tau_1) c_{r_1 \alpha_1}^\dagger(\tau_1) c_{r_2 \beta_2}(\tau_2) c_{r_2 \alpha_2}^\dagger(\tau_2) c_{r_2 \gamma_2}(\tau_2) \cdots \cdots c_{r_n \alpha_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \beta_n}(\tau_n) c_{r_n \lambda_n}^\dagger(\tau_n) c_{r_n \gamma_n}(\tau_n) c_{r' \beta}^\dagger(\tau') \quad (2.38)$$

と順序を変更すると、これも奇置換なので、 $(-1)$  がつく。したがって、(2.36)→(2.38) の過程で符号は変化しない。この操作を繰り返すことで、符号の変化なしに任意の  $c$  と  $c^\dagger$  の組に分解できることがわかる。Sec. 2.3.1 の議論より、このように作った  $c(\tau_i)$  と  $c^\dagger(\tau_j)$  による縮約は  $-G_0(\tau_i, \tau_j)$  に置き換えれば良いが、グリーン関数の分子 (2.13), 分母 (2.14) には  $c, c^\dagger$  の組がそれぞれ  $2n+1$  個、 $2n$  個現れるので、縮約を置き換える際の  $-G_0(\tau_i, \tau_j)$  の前の  $-1$  は全体でまとめて、分子の場合は  $-1$ 、分母の場合は  $+1$  とすれば良い。

## 2.4 ファインマンダイアグラム (Feynman diagram)

前節までの議論から、グリーン関数の分母や分子に現れる多数の  $c$  と  $c^\dagger$  の積の統計平均は (相互作用のない) グリーン関数  $G_0$  の積に分解でき、さらに、時間順序積  $T$  や Wick の定理 (2.26) に現れる符号  $(-1)^{\delta(p)}$  は、実際の計算の際にはあらわに考慮する必要がないことがわかった。とはいえ、多くの  $c$  と  $c^\dagger$  の積の中から可能な  $cc^\dagger$  の組を全て書き出して計算する、ということを式の上だけで行おうとすると、(特に  $n$  が大きくなってくると) 計算間違いを起こす可能性が高くなる<sup>\*19</sup> うえに、どういう散乱の構造を考えているのか、といったことが分かりにくい。そこで登場する便利な道具が標題のファインマンダイアグラムである。

### 2.4.1 描き方

図. 2 にグリーン関数の分母と分子に現れる項の一例を示す。

1. 相互作用  $U$  を表す四角を並べる。ここでは、左下と右上が生成演算子に、左上と右下が消滅演算子に対応する。内部自由度に関しては、左下: $\alpha$ , 左上: $\beta$ , 右下: $\gamma$ , 右上: $\lambda$  である<sup>\*20</sup>。
2. 各頂点の  $c$  と  $c^\dagger$  を結ぶ。
3. 結んだ  $c^\dagger(\tau_j)$  の頂点から  $c(\tau_i)$  の頂点に向かう向きに矢印つきの実線を書く。この実線がグリーン関数  $G_0(\tau_i, \tau_j)$  に対応する。

<sup>\*19</sup>すくなくとも私は絶対間違える。そもそも  $n > 2$  は計算する気がない。

<sup>\*20</sup>必ずこうとらなければならない訳ではないが、自分の中では定義は揃えておかないと訳わからなくなる。



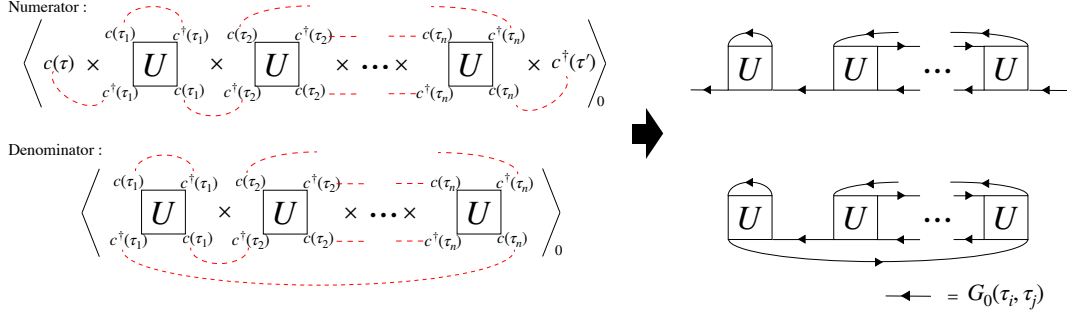


図 2:

## 2.4.2 外線とつながったダイアグラム

図. 3 はグリーン関数の分子の 2 次までのダイアグラムを示したものである。始点 (終点) が  $U$  の四角から始ま (で終わ) っていない実線があるが、これは  $H_{\text{int}}$  からくる  $c, c^\dagger$  ではなく、グリーン関数の定義にある  $c_{r\alpha}(\tau)$  または  $c_{r'\beta}^\dagger(\tau')$  を始点または終点 (もしくは両方) に持つ線で、これを**外線**<sup>\*21</sup>と呼ぶ。図. 3 からわかるように、グリーン関数の分子には、外線とつながっているダイアグラムのみで構成された項と、繋がっているダイアグラムとつながっていないダイアグラムの積になっている項があることがわかる。そして、このつながっていないダイアグラムを全て足し上げたものは、グリーン関数の分母、すなわち  $\langle S(\beta) \rangle_0$  そのものである。これを式で書くと

$$\langle TS(\beta) c_{r\alpha}^I(\tau) c_{r'\beta}^{\dagger I}(\tau') \rangle_0 = \langle S(\beta) \rangle_0 \langle TS(\beta) c_{r\alpha}^I(\tau) c_{r'\beta}^{\dagger I}(\tau') \rangle_{c0} \quad (2.39)$$

となるので、結局グリーン関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = - \frac{\langle TS(\beta) c_{r\alpha}^I(\tau) c_{r'\beta}^{\dagger I}(\tau') \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0} = - \langle TS(\beta) c_{r\alpha}^I(\tau) c_{r'\beta}^{\dagger I}(\tau') \rangle_{c0} \quad (2.40)$$

のように、外線とつながったダイアグラムの総和になることがわかる。ここで、 $\langle \dots \rangle_{c0}$  はつながった (connected) ダイアグラムのみを考えるということを表す。

図. 2 のように  $U$  を並べたとき、Wick 分解では可能な  $c, c^\dagger$  の組合わせを全て足しあげるわけであるが、外線のつながり方として、例えば、外の  $c^\dagger(\tau')$  が  $c(\tau_n)$  とつながる場合もあれば、 $c(\tau_{n-1})$  とつながる場合もある。他の頂点の繋ぎ方を全て足し上げて、内部の積分を実行した場合、この 2 つの寄与は全く同じものとなる。このような外線の繋がり方が異なるだけで同一の寄与を与えるダイアグラムは  $n$  個の  $U$  を並べる場合の数  $n! = n!$  だけあることがわかる。したがって、これらの同一の寄与のうち 1 つだけを計算し、 $n!$  をかけてやれば  $n!$  個のダイアグラムの計算は 1 回で済む。さらに、この  $n!$  という係数は、(2.8) の  $n$  次の項に付いている係数  $1/n!$  とキャンセルする。

以上のことから、グリーン関数の  $n$  次の項をファインマンダイアグラムを使って計算する際の手順は以下ようになる。

1.  $n$  個の  $U$  に対応する四角を並べる。
2. 外側の  $c(\tau), c^\dagger(\tau)$  と結ばれる  $U$  の頂点を 1 つずつ選んで実線で結ぶ。(1 組だけ選べば良い)
3. 内部の  $c$  と  $c^\dagger$  に対応する頂点を実線で結ぶ。(全ての可能な結び方を網羅する。)
4. 四角を  $U$  に、実線を  $G_0$  に対応させて、式に書き直す。
5. 内部変数の和及び積分を実行する。

\*21 最終的に積分されない自由度を持つ線

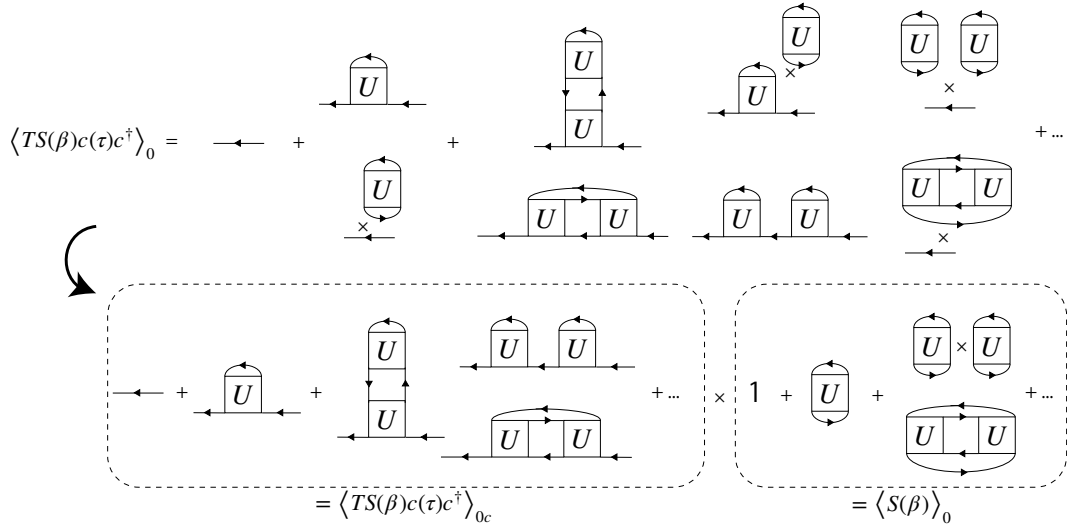


図 3:

6.  $(-1)^n$  の係数をかける<sup>※22</sup>.

## 2.5 既約性

Sec.1 での議論から、グリーン関数は

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = G_{0\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') + \sum_{\alpha_1\beta_1} \sum_{\mathbf{r}_1\tau_1} \int d\tau_1 d\tau_2 G_{0\alpha\alpha_1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \tau, \tau_1) s_{\alpha_1\beta_1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1, \tau_2) G_{0\beta_1\beta}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}', \tau_2, \tau') \quad (2.41)$$

と書けることがわかる.  $s$  は外線と直接つながっている積分変数以外を全て積分して、すべての次数について足し上げたものである. 虚時間と空間に関する並進対称性を考慮すると、

$$G(k) = G_0(k) + G_0(k)s(k)G_0(k) \quad (2.42)$$

のようにフーリエ変換できる. ここで  $k = (\mathbf{k}, i\omega_n)$  である. また、内部自由度の添字は省いた<sup>※23</sup>. (2.42) の  $s(k)$  は、図. 4 のように、グリーン関数線を 1 本切ったときに 2 つに分かれる可約ダイアグラム (reducible

<sup>※22</sup>参考文献に挙げたテキスト [1-5] 等では、グリーン関数の線が閉じているダイアグラムの数だけ  $(-1)$  をかけるという規則があるが、ここにはそれは現れていない. 実はこの規則は相互作用  $U_{\alpha\beta\gamma\lambda}$  の crossing symmetry によって自動的に取り込まれている.

<sup>※23</sup>内部自由度をあらわに書けば

$$G_{\alpha\beta}(k) = G_{0\alpha\beta}(k) + \sum_{\alpha'\beta'} G_{0\alpha\alpha'}(k) s_{\alpha'\beta'}(k) G_{0\beta'\beta}(k) \quad (2.43)$$

となる. すなわち、内部自由度に関しては行列の積のように扱えば良い. とは言ったものの、(2.41) で空間、時間、内部自由度を全てまとめた添字  $a = (\mathbf{r}, \tau, \alpha)$  を用意すれば、

$$G_{ab} = G_{0ab} + \sum_{a'b'} G_{0aa'} s_{a'b'} G_{0b'b} \quad (2.44)$$

となる. 時間や空間に関する並進対称性がない場合、もしくは、あったとしてもあえて  $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega_n, \omega_{n'}) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{nn'} G(\mathbf{k}, i\omega_n)$  と書いてやれば、波数表示やエネルギー表示でも (2.44) と同じ形にできる. 1 体のグリーン関数を持っている自由度に関しては、形式的には、すべて行列的に扱うことができる.



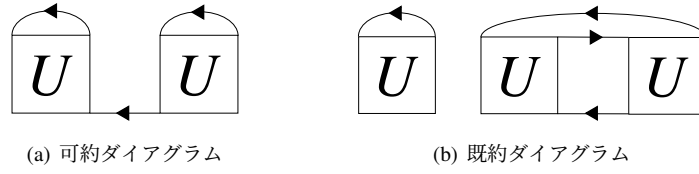


図 4: 既約ダイアグラムと可約ダイアグラム



図 5: ダイソン方程式のダイアグラム表現

diagram) と別れない**既約ダイアグラム (irreducible diagram)** に分けることができる<sup>\*24</sup> . Sec. 1 での議論から、 $s(k)$  というのは、グリーン関数の  $n = 1$  から  $n = \infty$  の寄与から外線を取り除いたものであり、全ての可能な  $U$  の結び方を足し上げたものである。したがって、既約ダイアグラムの集合はグリーン関数線一本を切っても 2 つに分かれないダイアグラムの総和であり、これを  $\Sigma(k)$  と書くことにすると、可約ダイアグラムは  $\Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k)$  のように既約ダイアグラムを  $G_0(k)$  で繋ぐことで構成できる。  $\Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k)$  もまた可約ダイアグラムである。このように  $\Sigma(k)$  に  $G_0(k)\Sigma(k)$  を何度もかけるということを繰り返すことで全ての可約ダイアグラムを網羅することができる。そしてその可約ダイアグラムの集合と  $\Sigma(k)$  の和が  $s(k)$  なので、

$$\begin{aligned} s(k) &= \Sigma(k) + \Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k) + \Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k) + \dots \\ &= \Sigma(k) + \Sigma(k)G_0(k)s(k) \\ &= [\Sigma(k)^{-1} - G_0(k)]^{-1} \end{aligned} \quad (2.45)$$

が得られる。これを (2.42) 式に代入すれば

$$\begin{aligned} G(k) &= G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G_0(k)\Sigma(k)G_0(k) + \dots \\ &= G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G(k) \\ &= [G_0(k)^{-1} - \Sigma(k)]^{-1} \end{aligned} \quad (2.46)$$

が得られる。(2.45),(2.46) は**ダイソン方程式 (Dyson equation)** と呼ばれる。図. 5 はダイソン方程式のダイアグラム表現を示したものである。(2.45) や (2.46) のような無限和の構造から、グリーン関数を計算する際には、既約ダイアグラムのみを考慮しておけば、可約ダイアグラムはダイソン方程式を通して自動的に取り込まれることがわかる。また、(1.54) と (2.46) を見比べると分かるように、Sec. 1.3 で天下り的に導入した  $\Sigma(k)$  は、ダイアグラムの言葉で言うと、(1 体の) 既約ダイアグラムの総和ということになる。

## 2.6 骨格ダイアグラム

Sec.2.5 の既約ダイアグラムはさらに、**骨格ダイアグラム (skelton diagram)** と呼ばれる部分とそれ以外の 2 つの部分に分けることができる。図 6(a) に示したものが骨格ダイアグラム (skelton diagram) の例であり、

<sup>\*24</sup>Ref. [4] では、この 1 体の規約性に関して、プロパー (proper), インプロパー (improper) という言葉を用いていて、後に出てくる 2 体の電子・正孔ペアに対して可約、既約という言葉を用いているが、ここでは 1 体についても 2 体についても可約、既約という言葉を使うことにする。また、Ref. [4] では proper, improper という言葉は相互作用“線”に対しても同様に用いられているが、ここでは相互作用は 4 つ脚のテンソル (絵で描けば四角) であり、1 つの相互作用を取り除いたときにダイアグラムが 2 つに分かれるかどうかというのは、 $U_{\alpha\beta\gamma\delta}$  の成分まで見ないとわからないので、一般的な性質を議論することはできない。

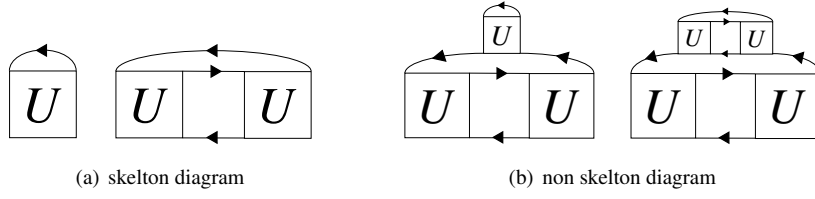


図 6: スケルトンダイアグラム

(b) が骨格ダイアグラムでないダイアグラム (non skelton diagram) の例である. ダイソン方程式 (2.46) を考慮すると、骨格ダイアグラムでないダイアグラムは、骨格ダイアグラムにおいて  $G_0 \rightarrow G$  と置き換えることで自動的に取り込まれる寄与であることがわかる. したがって、骨格ダイアグラムのみを考え、そのグリーン関数線を  $G_0$  ではなく  $G$  で置き換えれば、骨格ダイアグラムでないダイアグラムはあらわに考えなくてもよいことになる. ただしこれをする場合、 $G$  を求めるダイアグラム計算に  $G$  を用いる必要がでてくるので、自己無撞着計算を実行しなければならない.

### 3 2体グリーン関数

ここでは2体のグリーン関数というものを導入する. 1体のグリーン関数が単一粒子の伝搬やスペクトルに関する情報を提供するのに対し、2体のグリーン関数はより複雑な多体効果をとらえることができ、粒子間の相互作用の効果を記述するのに有用な道具である. 電荷やスピン、超伝導ペアの密度-密度の相関関数は、2体グリーン関数から計算することができ、これらを通して電気伝導度や磁化率のような実験で観測される物理量との対応を見ることがもできる. ダイアグラム展開の観点からいうと、2体グリーン関数のダイアグラム構造を理解することで、各種散乱プロセスが物理量にどのような影響を与えるのかを知ることができたり、近似理論の構成の際の基礎を与えることもできる.

#### 3.1 定義やら

2体のグリーン関数は、

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \langle T c_{\mathbf{r}_1\alpha}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\beta}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_4\lambda}(\tau_4) c_{\mathbf{r}_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \quad (3.1)$$

のように定義される<sup>※25</sup>. 1体のグリーン関数の時と同様に、trace の cyclic 則を考えると、

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \tau_1, \tau_2, \tau_4, \tau_3) = \langle T c_{\mathbf{r}_1\alpha}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\beta}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_4\lambda}(\tau_4) c_{\mathbf{r}_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \quad (3.2)$$

のように時間変数をひとつ減らした形に変形できる<sup>※26</sup>. また、空間の並進対称性を仮定すると、相対位置のみの関数となるので、 $\mathbf{r}_3$  を基準にとって

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4, \tau_1, \tau_2, \tau_4) = \langle T c_{(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3)\alpha}(\tau_1) c_{(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_3)\beta}^\dagger(\tau_2) c_{(\mathbf{r}_4-\mathbf{r}_3)\lambda}(\tau_4) c_{(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_3)\gamma}^\dagger \rangle \quad (3.3)$$

と書き直すことができる.  $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_3$  をあらためて  $\mathbf{r}_i$  と書けば

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4, \tau_1, \tau_2, \tau_4) = \langle T c_{\mathbf{r}_1\alpha}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\beta}^\dagger(\tau_2) c_{\mathbf{r}_4\lambda}(\tau_4) c_{\mathbf{0}\gamma}^\dagger \rangle \quad (3.4)$$

ここで、空間と時間の添え字を合わせた  $x = (\mathbf{r}_i, \tau_i)$  と  $k = (\mathbf{k}_i, i\omega_{n_i})$  を導入すると、

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(k_1, k_2, k_4) = \int dx_1 dx_2 dx_4 G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_4) e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} e^{ik_4 x_4} \quad (3.5)$$

※25 時間添え字の番号付けが気持ち悪く感じるかもしれないが、内部自由度の添え字との対応関係がわかりやすいのでこうとっている.

※26 この際、 $\tau_i$  の定義域が変わることに注意.

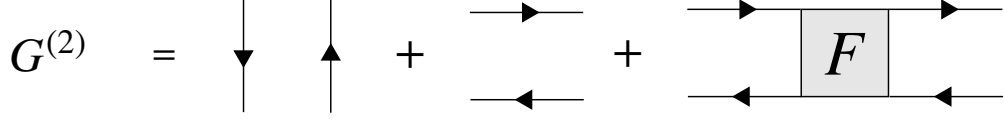


図 7:

を得る。ここで、便宜的に  $\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{x}_i + \omega_{n_i} \tau_i = k_i x_i$  と書いた。あとで導入する particle-hole (ph) pair が運ぶ Bosonic な一般化波数を  $q = (\mathbf{q}, \nu_m)$  と書くような表示にするために

$$\begin{cases} k_1 \rightarrow k \\ k_2 \rightarrow -k - q \\ k_4 \rightarrow k' + q \end{cases} \quad (3.6)$$

ような変数変換を行うと

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(k, k', q) = \int dx_1 dx_2 dx_4 G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3) e^{ikx_1} e^{-i(k+q)x_2} e^{i(k'+q)x_4} \quad (3.7)$$

が得られる。

### 3.2 2体グリーン関数のダイアグラム構造

2体のグリーン関数のダイアグラム展開も基本的には1体のグリーン関数の場合と同じである。ただし、2体のグリーン関数は、 $c$  と  $c^\dagger$  が2つずつの統計平均で定義されるので、外線が4本あらわれる。また、1体の場合の (2.41) で  $s$  を導入したときと同様に、(2体の) 相互作用の効果を表す部分を  $F$  と書くことにすると、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = & G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) G_{\lambda\gamma}(x_4, x_3) - G_{\alpha\gamma}(x_1, x_3) G_{\lambda\beta}(x_4, x_2) \\ & - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \ x'_1 x'_2 \\ \gamma'\lambda' \ x'_3 x'_4}} G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1) G_{\beta'\beta}(x'_2, x_2) F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4) G_{\gamma'\gamma}(x'_3, x_3) G_{\lambda\lambda'}(x_4, x'_4) \end{aligned} \quad (3.8)$$

のように書ける。適当な変数変換とフーリエ変換<sup>\*27</sup>を行うと、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(k, k', q) = & G_{\alpha\beta}(k) G_{\lambda\gamma}(k') \delta_{q0} - G_{\alpha\gamma}(k) G_{\lambda\beta}(k+q) \delta_{kk'} \\ & - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} G_{\alpha\alpha'}(k) G_{\beta'\beta}(k+q) F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(k, k', q) G_{\gamma'\gamma}(k') G_{\lambda\lambda'}(k'+q) \end{aligned} \quad (3.9)$$

ここで、右辺第一項と第二項は disconnected part と呼ばれ、第三項は connected part と呼ばれる。(3.9) のダイアグラム表現は図 7 のようになる。ただし、実線は相互作用を含んだ1体のグリーン関数を表す。この章では、特に断らない限り実線は相互作用を含む1体のグリーン関数を表すものとする。connected part の中にある2体の相互作用の効果を表す部分として導入した  $F$  はフルバーテックス (full-vertex) と呼ばれる。

#### 3.2.1 時空変数を含む crossing symmetry

Sec.1.1.2 で bare な相互作用  $U$  に対して crossing symmetry を示したが、フルバーテックス  $F$  は時空変数までを含めた crossing symmetry を満たす。これを以下で見ていく。

(3.1) の定義より、生成演算子同士または消滅演算子同士の入れ替えに対して、

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_3, x_2, x_4) \quad (3.10)$$

<sup>\*27</sup>“適切な” という意味である。お尻を掻きながら行う変換ではない。

$$G_{a\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -G_{\lambda\beta\gamma a}^{(2)}(x_4, x_2, x_3, x_1) \quad (3.11)$$

が成り立つ。この添え字の入れ替えに対して (3.8) の 1 体のグリーン関数 2 つの積で表されている 2 つの項はお互いが入れ替わるだけであり、この 2 項の組で (3.10), (3.11) の符号反転の性質を満たしている。残りの  $F$  が含まれる項であるが、(3.8) の  $F$  が含まれる項において (3.10) の反転を行うと、

$$\begin{aligned} & - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} \sum_{\substack{x'_1x'_2 \\ x'_3x'_4}} G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1) G_{\beta'\gamma}(x'_2, x_3) F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4) G_{\gamma'\beta}(x'_3, x_2) G_{\lambda\lambda'}(x_4, x'_4) \\ & = - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} \sum_{\substack{x'_1x'_2 \\ x'_3x'_4}} G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1) G_{\gamma'\gamma}(x'_3, x_3) F_{\alpha'\gamma'\beta'\lambda'}(x'_1, x'_3, x'_2, x'_4) G_{\beta'\beta}(x'_2, x_2) G_{\lambda\lambda'}(x_4, x'_4) \end{aligned} \quad (3.12)$$

1 行目から 2 行目は内部変数の文字を入れ替えただけである。(3.10) と (3.12) から、

$$F_{a\beta\gamma\lambda}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -F_{\alpha\gamma\beta\lambda}(x_1, x_3, x_2, x_4) \quad (3.13)$$

を満たさなければならないことがわかる。(3.11) の入れ替えに関しても同様である。このように、 $F$  には、生成 (または消滅) 演算子に対応する頂点同士の内部変数の添え字と時空変数の添え字のセットでの入れ替えに対して符号反転を起こすという性質がある。

### 3.2.2 2 つの 2 体バーテックスの繋ぎ方

ここでは、2 つの 2 体バーテックスの繋ぎ方について考える。結論から言うと、以下で示す 3 種類の繋ぎ方を考えるだけで十分である。その 3 種類の繋ぎ方で 2 体の散乱構造の骨格は構成されている。

2 体グリーン関数の  $U$  に関する 2 次の項を書き下すと、

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{4}\right)^2 U_{\alpha'\beta'_1\gamma'_1\lambda'_1} U_{\alpha'_2\beta'_2\gamma'_2\lambda'_2} \langle T c_{r_1\alpha}(\tau_1) c_{r_2\beta}^\dagger(\tau_2) c_{r'_1\alpha'}^\dagger(\tau'_1) c_{r'_1\lambda'}^\dagger(\tau'_1) c_{r'_1\gamma'_1}(\tau'_1) c_{r'_1\beta'_1}(\tau'_1) \\ & \quad \times c_{r'_2\alpha'_2}^\dagger(\tau'_2) c_{r'_2\lambda'_2}^\dagger(\tau'_2) c_{r'_2\gamma'_2}(\tau'_2) c_{r'_2\beta'_2}(\tau'_2) c_{r_4\lambda}(\tau_4) c_{r_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \end{aligned} \quad (3.14)$$

となる。まずは、両方の  $U$  から生成演算子と消滅演算子に対応する頂点の組みを選び、それらをつなぐグリーン関数の pair (particle-hole pair) によって 2 つの vertex が繋がる場合を考える。 $c_{r_1\alpha}(\tau_1), c_{r_2\beta}^\dagger(\tau_2)$  とつながる  $U$  の頂点の選び方は、それぞれ 4 つの  $c, c^\dagger$  から 1 つずつ選ぶので  $4 \times 4 = 16$  となる。 $c_{r_4\lambda}(\tau_4), c_{r_3\gamma}^\dagger(\tau_3)$  とつながる頂点の選び方は、 $c_{r_1\alpha}(\tau_1), c_{r_2\beta}^\dagger(\tau_2)$  と繋がっていない方の  $U$  から 1 つずつ選ぶので、 $2 \times 2 = 4$  となる。こう選ぶと、内側の頂点の繋ぎ方は一意に定まるので、 $16 \times 4 = 64$  通りの頂点の繋ぎ方があることになる。ただし、この中には内側の  $\tau'_1, \tau'_2$  の順序が逆になっているだけの寄与が含まれるが、これらは Sec. 2.4.2 で示したように、内部変数の積分を実行すると全く同じ寄与を与え、全体の係数  $1/2!$  とキャンセルする。したがって、結局考えるべきダイアグラムの数は 32 個ということになる。

まず、1 番単純なダイアグラムとして図 8(a) のような  $c_{r_1\alpha}(\tau_1)$  と  $c_{r_2\beta}^\dagger(\tau_2)$  が左の  $U$  と、 $c_{r_4\lambda}^\dagger(\tau_4)$  と  $c_{r_3\gamma}(\tau_3)$  が右の  $U$  とつながるような場合を考える。これを式で書くと、

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{4}\right)^2 \langle c_{r_1\alpha}(\tau_1) c_{r'_1\alpha'}^\dagger(\tau'_1) \rangle \langle c_{r_2\beta}^\dagger(\tau_2) c_{r'_1\beta'_1}(\tau'_1) \rangle U_{\alpha'\beta'_1\gamma'_1\lambda'_1} \langle c_{r'_1\gamma'_1}(\tau'_1) c_{r'_2\alpha'_2}^\dagger(\tau'_2) \rangle \langle c_{r'_1\lambda'_1}^\dagger(\tau'_1) c_{r'_2\beta'_2}(\tau'_2) \rangle \\ & \quad \times U_{\alpha'_2\beta'_2\gamma'_2\lambda'_2} \langle c_{r'_2\gamma'_2}(\tau'_2) c_{r_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \langle c_{r'_2\lambda'_2}^\dagger(\tau'_2) c_{r_4\lambda}(\tau_4) \rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

となるが、これは元の並び方から偶置換で到達できるので、符号は + である。次に図 8(a') のような繋ぎ方を式で書くと、

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{1}{4}\right)^2 \langle c_{r_1\alpha}(\tau_1) c_{r'_1\alpha'}^\dagger(\tau'_1) \rangle \langle c_{r_2\beta}^\dagger(\tau_2) c_{r'_1\gamma'_1}(\tau'_1) \rangle U_{\alpha'\beta'_1\gamma'_1\lambda'_1} \langle c_{r'_1\beta'_1}(\tau'_1) c_{r'_2\alpha'_2}^\dagger(\tau'_2) \rangle \langle c_{r'_1\lambda'_1}^\dagger(\tau'_1) c_{r'_2\beta'_2}(\tau'_2) \rangle \\ & \quad \times U_{\alpha'_2\beta'_2\gamma'_2\lambda'_2} \langle c_{r'_2\gamma'_2}(\tau'_2) c_{r_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \langle c_{r'_2\lambda'_2}^\dagger(\tau'_2) c_{r_4\lambda}(\tau_4) \rangle \end{aligned} \quad (3.16)$$

これは奇置換なので、 $-$ がつく。しかし、crossing symmetry  $U_{\alpha\beta\gamma\lambda} = -U_{\alpha\gamma\beta\lambda}$  を考慮すると、(3.16) は

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{4}\right)^2 \langle c_{r_1\alpha}(\tau_1) c_{r'_1\alpha'}^\dagger(\tau'_1) \rangle \langle c_{r_2\beta}(\tau_2) c_{r'_2\beta'}^\dagger(\tau'_2) \rangle U_{\alpha'\gamma'_1\beta'_1\lambda'_1} \langle c_{r'_1\beta'_1}(\tau'_1) c_{r'_2\alpha'_2}^\dagger(\tau'_2) \rangle \langle c_{r'_1\lambda'_1}^\dagger(\tau'_1) c_{r'_2\beta'_2}(\tau'_2) \rangle \\ & \times U_{\alpha'_2\beta'_2\gamma'_2\lambda'_2} \langle c_{r'_2\gamma'_2}(\tau'_2) c_{r_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \langle c_{r'_2\lambda'_2}^\dagger(\tau'_2) c_{r_4\lambda}(\tau_4) \rangle \end{aligned} \quad (3.17)$$

と書き直すことができ、これは(3.15)と全く同じであることがわかる。同様に考えると、図8(a)の形から  $U$  を crossing させてできるダイアグラムは全て同じ寄与を与えることがわかる。crossing 操作の数は、(左右の  $U$  の2通り)  $\times$  ( $c$  または  $c^\dagger$  の2通り) = 4通りある。全ての繋ぎ方を網羅するには、crossing 操作を 0,1,2,3,4 回行ったものを全て足し上げれば良いので、その場合の数は

$$4C_0 + 4C_1 + 4C_2 + 4C_3 + 4C_4 = 16 \quad (3.18)$$

となり、16個の同じ寄与を与えるダイアグラムが存在することになる。そこで、図8(a)のダイアグラムだけを考慮して16をかければよいが、この16は(3.15)の相互作用行列の係数からくる  $(1/4)^2$  とキャンセルする。

次に図8(b)のような、 $c_{r_1\alpha}^\dagger(\tau_1)$  と  $c_{r_3\gamma}(\tau_3)$  が左の  $U$  と、 $c_{r_4\lambda}^\dagger(\tau_4)$  と  $c_{r_2\beta}(\tau_2)$  が右の  $U$  とつながるような場合を考える。これは奇置換になるので、全体の符号は  $-$  となる。上と同様に考えると、こちらも16個の同じ寄与があることがわかる。よって、(a)と(b)のダイアグラムだけを計算すれば、particle-hole の pair でつながる32個のダイアグラムは全て計算できたことになる。また、(a)のような vertex の繋ぎ方は **ph channel** (particle-hole channel), (b)は **ph channel (vertical particle-hole channel)** と呼ばれる。

次に片方の  $U$  から2つの消滅演算子に対応する頂点を、もう片方の  $U$  から生成演算子に対応する頂点を選び、それらをつなぐグリーン関数の pair (particle-particle pair) で2つの vertex が繋がれる場合を考える。片方の  $U$  から  $c$  を2つ、もう片方から  $c^\dagger$  を2つ選ぶので2通り。選んだ2つの  $c$  が外線の2つの  $c^\dagger$  のどちらとつながるか2通り、選んだ2つの  $c^\dagger$  が外線の2つの  $c$  のどちらとつながるか2通り。さらに particle-hole pair では、内側のつながり方は一通りに決まっていたが、2つずつある  $c, c^\dagger$  のうち、どちらがどちらとつながるかの2通りの場合がある。結局全部で  $2 \times 2 \times 2 \times 2 = 16$  通りの場合の数がある。しかし、図8(c)のダイアグラムの左側の  $U$  を  $c$  で crossing させ、右側の  $U$  を  $c^\dagger$  で crossing させると、それは元のダイアグラムそのものになってしまう。これは、同じ寄与を与えているのではなく、同一のダイアグラムになっているということなので、これを数えてしまうと double counting になってしまう。このことを考慮すると、particle-particle pair でつながるダイアグラムは  $16 \times 1/2 = 8$  つしかないということがわかる。これらの8つのダイアグラムは同じ寄与をあたえるので、particle-particle pair でつながるダイアグラムは図8(c)のダイアグラムのみを考えればよい。ただし、係数としては  $8 \times (1/4)^2 = 1/2$  がつくことになる<sup>\*28</sup>。また、図8(c)は **pp channel (particle-particle channel)** と呼ばれる。

上では裸のバーテックス  $U$  を用いたが、時空変数を含んだ crossing symmetry を満しつつ、crossing 操作の前後でダイアグラムの形が変わらないようなバーテックスであれば、ここでの議論はそのまま成り立つ。

### 3.2.3 pp 表現?

これまでは暗黙に、2体グリーン関数  $G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}$  のように書いたときに、 $\alpha\lambda$  に消滅演算子を、 $\beta\gamma$  に生成演算子に対応させるような表現<sup>\*29</sup>、ダイアグラムで描くと左右にそれぞれ生成演算子と消滅演算子に対応する頂点が1つずつ現れるような表現を用いてきた。これは、ph または  $\overline{\text{ph}}$  channel と対応のよい表現<sup>\*30</sup>である。実際、(3.8)や(3.9)の2体グリーン関数の disconnected part には ph と  $\overline{\text{ph}}$  の pair が現れている。ここではこれを **ph 表現** と呼ばせてもら<sup>\*31</sup>。これとは別に pp pair と対応の良い表現も考えることができ、これを

<sup>\*28</sup> particle-particle pair の場合だけいちいちこの  $1/2$  をつけないといけないが、この係数を後ででてくる pp 表現のバーテックスの定義に押し付けると言う流儀もある。この流儀であれば、どの pair に対しても同じ形の式を使うことができる。

<sup>\*29</sup> バーテックスの場合は生成と消滅が逆で、 $F_{\alpha\beta\gamma\lambda}$  と書いた時、 $\alpha\lambda$  に生成演算子を、 $\beta\gamma$  に消滅演算子に対応させる

<sup>\*30</sup> 結局描き方の問題なので、イメージしやすい表現と言った方がよいかもしれない。

<sup>\*31</sup> 別に一般にこう言う呼び方があるわけではない。

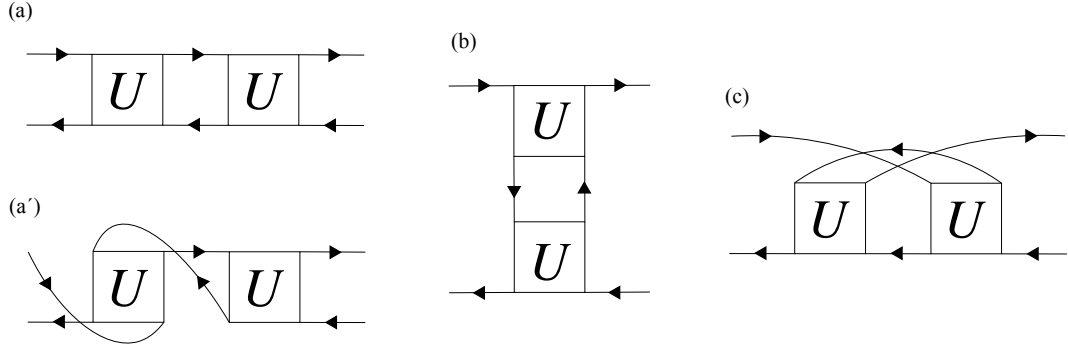


図 8:

ここでは **pp 表現** と呼ばせてもらう. pp 表現の 2 体グリーン関数は、

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)\text{pp}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \langle T c_{\mathbf{r}_1\alpha}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\beta}(\tau_2) c_{\mathbf{r}_4\lambda}^\dagger(\tau_4) c_{\mathbf{r}_3\gamma}^\dagger(\tau_3) \rangle \quad (3.19)$$

と表すことができる. すなわち、左の 2 頂点が消滅演算子に、右の 2 頂点が生成演算子に対応するような表現である. 1 体のグリーン関数と pp 表現のフルバーテックスを用いると、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)\text{pp}}(x_1, x_2, x_3, x_4) &= -G_{\alpha\lambda}(x_1, x_4)G_{\beta\gamma}(x_2, x_3) + G_{\alpha\gamma}(x_1, x_3)G_{\beta\lambda}(x_2, x_4) \\ &\quad - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} \sum_{\substack{x'_1x'_2 \\ x'_3x'_4}} G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1)G_{\beta\beta'}(x_2, x'_2)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}^{\text{pp}}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)G_{\gamma'\gamma}(x'_3, x_3)G_{\lambda'\lambda}(x'_4, x_4) \end{aligned} \quad (3.20)$$

と書ける. Fourier 変換は

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)\text{pp}}(k, k', q) &= -G_{\alpha\beta}(k)G_{\lambda\gamma}(k')\delta_{q, -k-k'} + G_{\alpha\gamma}(k)G_{\beta\lambda}(-k-q)\delta_{kk'} \\ &\quad - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} G_{\alpha\alpha'}(k)G_{\beta\beta'}(-k-q)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}^{\text{pp}}(k, k', q)G_{\gamma'\gamma}(k')G_{\lambda'\lambda}(-k'-q) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Sec.3.2.1 と同様に考えると、

$$F_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -F_{\alpha\beta\lambda\gamma}^{\text{pp}}(x_1, x_2, x_4, x_3) \quad (3.22)$$

や

$$F_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -F_{\alpha\lambda\beta\gamma}(x_1, x_4, x_3, x_2) = F_{\alpha\lambda\beta\gamma}(x_1, x_3, x_4, x_2) \quad (3.23)$$

という対応がえられる. Sec.1.1.2 や Sec.3.2.1 では、ph 表現において crossing symmetry を考えたが、一般に (3.23) のような pp 表現との関係までを含めてを crossing symmetry と呼ぶことが多い.

crossing の操作を行う場合、時空変数が一般化位置  $x = (\tau, \mathbf{r})$  である場合はバーテックスもしくは 2 体のグリーン関数の内部自由度の順番に対応している<sup>※32</sup>ので比較的わかりやすいが、Fourier 変換をしたあとの一般化波数  $k = (\omega_n, \mathbf{k})$  および  $q = (\nu_m, \mathbf{q})$  の表示の場合はすこしややこしくなる. そこで、crossing 操作に関連して出てくる内部自由度、一般化位置、一般化波数の組を以下に示しておく<sup>※33</sup>.

$$D = (\alpha, \beta, \gamma, \lambda), (x_1, x_2, x_3, x_4), (k, k', q) \quad (3.24)$$

$$T = (\alpha, \beta, \lambda, \gamma), (x_1, x_2, x_4, x_3), (k, -q - k', q) \quad (3.25)$$

$$C = (\alpha, \gamma, \beta, \lambda), (x_1, x_3, x_2, x_4), (k, k + q, k' - k) \quad (3.26)$$

※32例えば、 $F_{\alpha\beta\gamma\lambda}(x_1, x_2, x_3, x_4)$  の場合、 $(x_1, \alpha)(x_2, \beta)(x_3, \gamma)(x_4, \lambda)$  のセットで考えればよいということである.

※33導出は appendix で



$$G^{(2)\text{pp}} = \text{crossing diagram} + \text{ph diagram} + \text{pp diagram with } F^{\text{pp}}$$

図 9: pp 表現の 2 体グリーン関数

$$P = (\alpha, \lambda, \gamma, \beta), (x_1, x_4, x_3, x_2), (k, k', -q - k - k') \quad (3.27)$$

$$X = (\alpha, \gamma, \lambda, \beta), (x_1, x_3, x_4, x_2), (k, -k' - q, k' - k) \quad (3.28)$$

これらを用いると crossing symmetry は

$$F(D) = -F(C) \quad (3.29)$$

$$F^{\text{pp}}(D) = -F^{\text{pp}}(T) \quad (3.30)$$

$$F^{\text{pp}}(D) = -F(P) = F(X) \quad (3.31)$$

と簡潔に表すことができる。

### 3.2.4 高次のバーテックスの作り方

図 8(a)(b)(c) のダイアグラムから、外線とつながるグリーン関数を取り除いてできるバーテックスをそれぞれ図 10(a)(b)(c) に示す。Sec.3.2.2 の議論はグリーン関数の pair で繋がれるバーテックスが (時空変数を含む) crossing symmetry を満たし、かつ、crossing の前後でダイアグラムの形が変わらない場合<sup>※34</sup>に成り立つ。図 10(c) すなわち pp pair で繋がれたバーテックスはこの条件を満たすが、図 10(a)(b) すなわち ph または  $\overline{\text{ph}}$  の pair で繋がれたバーテックスは crossing 操作の前後でダイアグラムの形が変わってしまう。もう少し詳しくいうと、図 10(a) は crossing の操作により (b) に変化し、(b) は (a) に変化する。しかし、(a) と (b) のバーテックスを足したものは crossing symmetry を満たしつつ crossing 操作の前後で形が変わることもない。このことを考慮すると、次に示すような手続きで 3 つの channel の pair で  $U$  を繋ぐ全てのダイアグラムを網羅することができる。以下の手順の中で、2 つのバーテックス  $V_i, V_j$  を ph,  $\overline{\text{ph}}$ , pp pair で繋ぐことをそれぞれ  $V_i \chi_0^{\text{ph}} V_j$ ,  $V_i \chi_0^{\overline{\text{ph}}} V_j$ ,  $V_i \chi_0^{\text{pp}} V_j$  と表すことにする<sup>※35</sup>。

1.  $V_1 = U$  とする。

2.  $V_2 = V_1 + V_1 \chi_0^{\text{ph}} V_1 + V_1 \chi_0^{\overline{\text{ph}}} V_1 + V_1 \chi_0^{\text{pp}} V_1$  とする。

3.  $V_3 = V_2 + V_2 \chi_0^{\text{ph}} V_2 + V_2 \chi_0^{\overline{\text{ph}}} V_2 + V_2 \chi_0^{\text{pp}} V_2$  とする。

このとき、例えば  $\chi^{\text{ph}}$  で繋がれた項のなかで、左の  $V_2$  の中の  $U$  と右の  $V_2$  の中の  $U \chi^{\text{ph}} U$  が繋がれるものと、右の  $V_2$  の中の  $U$  と左の  $V_2$  の中の  $U \chi^{\text{ph}} U$  が繋がれるものが同じダイアグラムを与えてしまうので、このような double count は取り除くものとする。

4.  $V_4 = V_3 + V_3 \chi_0^{\text{ph}} V_3 + V_3 \chi_0^{\overline{\text{ph}}} V_3 + V_3 \chi_0^{\text{pp}} V_3$  とする。(double counting は取り除く)

⋮

※34“形が変わらない”というところまで含めて crossing symmetry という場合もあるかも？ちょっとわかんない...

※35ここでは、バーテックスの繋ぎ方に注目しているので内部変数や時空変数は省略したが、これらを省略せずに書くと、ph channel の場合、

$$\sum_{\alpha' \beta' \gamma' \lambda'} \sum_{k_1 k_2} V_{i, \alpha \beta \gamma' \lambda'}(k, k_1, q) \chi_{0, \gamma' \lambda' \alpha' \beta'}^{\text{ph}}(k_1, k_2, q) V_{j, \alpha' \beta' \gamma \lambda}(k_2, k', q) \quad (3.32)$$

$\overline{\text{ph}}$  はこれらの変数を  $D \rightarrow C$  と変更すればよく、pp channel の場合は ph から  $D \rightarrow P$  と変更すればよい。となる。

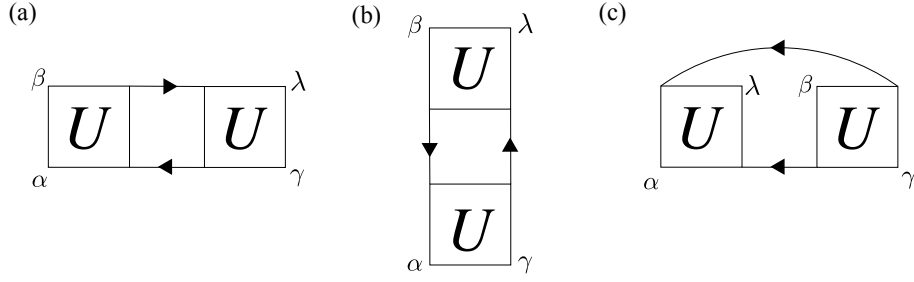


図 10:

この構成の仕方<sup>\*36</sup>で得られるバーテックスはその手続きからわかるように、 $\text{ph}$ ,  $\overline{\text{ph}}$ ,  $\text{pp}$  のどれかの pair を切ると 2 つに分かれるというダイアグラム構造をもつ。逆に言うと、この構成の仕方では考慮されないバーテックスは  $\text{ph}$ ,  $\overline{\text{ph}}$ ,  $\text{pp}$  のどの pair で切ったとしても 2 つに分かれないダイアグラム構造を持つバーテックスである。そのような、 $\text{ph}$ ,  $\overline{\text{ph}}$ ,  $\text{pp}$  のどの pair で切っても 2 つに分かれないようなバーテックスの集合を  $\Lambda$  と書くと、これは (時空変数を含む) crossing symmetry を満たし、かつ、crossing の前後でダイアグラムの形が変わらない。なぜならば、すべてのバーテックスの総和であるフルバーテックス  $F$  は crossing symmetry を満たし crossing の前後でダイアグラムの形は変化してはならず<sup>\*37</sup>、ここでの構成の仕方では生成されるダイアグラムの和は crossing symmetry を満たしつつ crossing 操作前後でダイアグラムの形が変化しないので、それ以外の構造をもつバーテックスの集合である  $\Lambda$  もその条件を満たしていなければならないからである。このような  $\Lambda$  の性質を踏まえると、上記の手続きにおいて  $U$  を  $\Lambda$  に置き換えれば考えるべきすべてのダイアグラムが網羅されることになる。

### 3.2.5 parquet 方程式

Sec.3.2.2 と Sec.3.2.4 の議論を踏まえると、2 体の散乱プロセスの構造に基づいた厳密な方程式群である **parquet 方程式** [9–13] を導くことができる。parquet 方程式を厳密に解くことはできないが、これを元に 2 体の散乱構造を考慮した様々な近似を構成することができる。parquet 方程式に基づいた近似はどういった散乱プロセスを重要視しているのかが比較的わかりやすいので<sup>\*38</sup>、Sec.2.4 で示した手続きにしたがって闇雲にダイアグラムを考慮していくよりもずっと見通しがよい<sup>\*39</sup>。また、Sec.3.2.4 で示した手順によって全てのダイアグラムが網羅できるということはわかったが、double counting をその都度確認して取り除かなければならず、実際に計算を実行するのはかなり面倒である<sup>\*40</sup>。しかし、parquet 方程式を用いれば、double counting 等を考えずに機械的に計算を実行することができる。

Sec.3.2.4 の議論から、2 体の vertex には、 $\text{ph}$ ,  $\overline{\text{ph}}$ ,  $\text{pp}$  pair で切ったときに 2 つに分かれるダイアグラムとどの pair で切っても 2 つに分けることができないダイアグラムがあることがわかった。前者を **channel  $l$** , ( $l = \text{ph}, \overline{\text{ph}}, \text{pp}$ ) に関する可約バーテックス (**reducible vertex**) と呼び  $\Phi_l$  と書き、後者を**完全既約バーテックス (fully irreducible vertex)** と呼び  $\Lambda$  と書く。フルバーテックス  $F$  はこれらのバーテックスの和

$$F(D) = \Lambda(D) + \Phi_{\text{ph}}(D) + \Phi_{\overline{\text{ph}}}(D) + \Phi_{\text{pp}}(D) \quad (3.33)$$

$$= \Lambda(D) + \Phi_{\text{ph}}(D) - \Phi_{\text{ph}}(C) - \Phi_{\text{pp}}^{\text{pp}}(P) \quad (3.34)$$

<sup>\*36</sup>  $U$  に関して、 $V_1$  には 1 次の項が、 $V_2$  には 1~2 次の項が、 $V_3$  には 1~4 次の項が含まれている。上記の手続きを繰り返すことで高次の項が考慮されていく。

<sup>\*37</sup> crossing の前後でダイアグラムの形が変化してしまうのであれば、それは全てのダイアグラムの総和になっていない。

<sup>\*38</sup> 「parquet 方程式自体がわかりにくいんじゃない」と言われたら謝るしかない。

<sup>\*39</sup> ある程度慣れている人に「見通しが良いね」と言われても、初学者は「は?」でしかない。

<sup>\*40</sup> 特に数値計算の場面でこれをコンピューターに実行させるには非常に複雑な命令を書かなければならず、実際に手で計算する以上にめんどくさいことになりうる。



であり<sup>\*41</sup>、ダイアグラムで表現すると図 11 のようになる。また、pp 表現では

$$F^{\text{pp}}(D) = \Lambda^{\text{pp}}(D) + \Phi_{\text{pp}}^{\text{pp}}(D) + \Phi_{\text{ph}}(X) - \Phi_{\text{ph}}(P) \quad (3.35)$$

ここで、2 体の可約性に関する重要な性質を示したい。結論から言うと、「2 つ以上の channel に関して同時に可約になるようなバーテックスは存在しない」というものである。図 12(a) に示した ph channel に関して可約なダイアグラムで  $\overline{\text{ph}}$  pair で別のバーテックスと繋ぐと図 12(b) のようになるが、これは  $\overline{\text{ph}}$  channel に対して可約であるが、もはや ph channel に対しては可約ではない。このように実際に図を描いて考えれば、どう頑張っても 2 つ以上の channel に対して同時に可約になるようなバーテックスは構成できないことがわかる。このことを踏まえると、フルバーテックス  $F$  から channel  $l$  の可約バーテックス  $\Phi_l$  を除いたもの、すなわち、完全既約バーテックス  $\Lambda$  と channel  $l$  以外の可約バーテックスの和

$$\Gamma_l = \Lambda + \Phi_{l_1} + \Phi_{l_2}, \quad (l_1 \neq l_2 \neq l) \quad (3.36)$$

は channel  $l$  に関して既約であるということになる。この  $\Gamma_l$  を **channel  $l$  に関する既約バーテックス**と呼ぶ<sup>\*42</sup>。また、 $\Phi_l$  が channel  $l$  に関して可約ダイアグラムの集合であり、 $\Gamma_l$  が channel  $l$  に関して既約なダイアグラムの集合であることから、

$$\begin{aligned} F &= \Gamma_l + \Phi_l, \quad (l = \text{ph}, \overline{\text{ph}}, \text{pp}) \\ &= \Gamma_l + \Gamma_l \chi_0^l \Gamma_l + \Gamma_l \chi_0^l \Gamma_l \chi_0^l \Gamma_l + \cdots \\ &= \Gamma_l + \Gamma_l \chi_0^l F \end{aligned} \quad (3.37)$$

となる<sup>\*43</sup>。ここで、 $\chi_0^l$  は channel  $l$  の pair を表す。(3.37) はベテ・サルペータ方程式 (Bethe-Salpeter quation) と呼ばれる Dyson 方程式の 2 体 version である。また、(3.33),(3.36),(3.37) の方程式群は 2 体のバーテックスの間の厳密な関係式を与えていて **parquet 方程式**と呼ばれる。parquet 方程式を用いると、完全既約バーテックス  $\Lambda$  が求まっていれば、次に示す手順で、考えるべきすべてのダイアグラムを考慮することができ、ここで登場した各種バーテックス関数をすべて厳密に計算することができる。

1. 初期値として  $\Gamma_l = \Lambda$  とする。
2. (3.37) にあるように、 $\chi_0^l \Gamma_l$  を単位として無限和をとり可約バーテックス  $\Phi_l$  を求める。
3. (3.36) を用いて既約バーテックス  $\Gamma_l$  を更新する。
4. 2. と 3. を収束するまで繰り返す
5. 収束後 (3.33) または (3.37) を用いてフルバーテックス  $F$  を求める。

この手順では double counting を気にせず機械的に計算が実行できる。実際は  $\Lambda$  を厳密に求めることはほぼ不可能であるので、何らかの近似を行うことになる。

### 3.3 感受率

(3.8) の  $G^{(2)}$  から右辺第一項を引いたもの

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -G_{\alpha\gamma}(x_1, x_3)G_{\lambda\beta}(x_4, x_2)$$

<sup>\*41</sup>ここでは、ph 表現での pp の可約バーテックスを  $\Phi_{\text{pp}}$  と表し、pp 表現での pp channel の可約バーテックスを  $\Phi_{\text{pp}}^{\text{pp}}$  と表しているが、このようは表し方はあまり見ない。 $\Phi_{\text{pp}}$  と書いている場合、pp 表現での pp channel の可約バーテックスを表していることが多い(と思う)。その都度、変数を見るなどして確認するしかない。

<sup>\*42</sup>channel によって、内部自由度や時空変数の組み合わせが異なるので、(3.36) では省略している。

<sup>\*43</sup>Sec.3.2.2 での議論を思い出すと、pp channel を考える場合、(3.37) において  $\chi_0^l \Gamma_l$  が 1 つ増えるたびに 1/2 の係数がつく。もしくは、この 1/2 をバーテックスの定義に含めてしまってもよい。

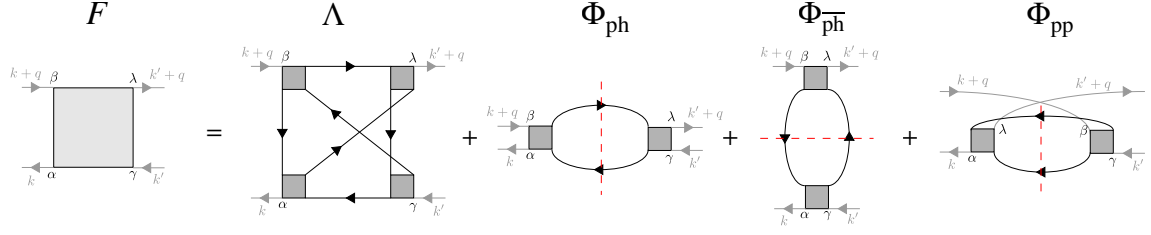


図 11:

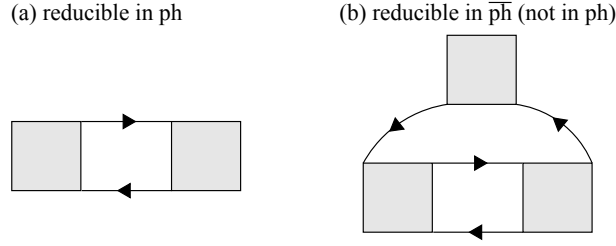


図 12:

$$- \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} \sum_{\substack{x'_1 x'_2 \\ x'_3 x'_4}} G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1) G_{\beta\beta'}(x_2, x'_2) F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4) G_{\gamma'\gamma}(x'_3, x_3) G_{\lambda'\lambda}(x'_4, x_4) \quad (3.38)$$

を ph channel に関する一般化感受率 (generalized susceptibility) と呼ぶ<sup>※44</sup>. 時間空間の並進対称性を仮定して Fourier 変換したものは、

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k, k', q) = & -G_{\alpha\gamma}(k) G_{\lambda\beta}(k+q) \delta_{kk'} \\ & - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} G_{\alpha\alpha'}(k) G_{\beta'\beta}(k+q) F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(k, k', q) G_{\gamma'\gamma}(k') G_{\lambda\lambda'}(k'+q) \end{aligned} \quad (3.41)$$

となる.  $\overline{\text{ph}}$  channel は  $D \rightarrow C$  の変換を行えばよいので、

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\overline{\text{ph}}}(k, k', q) = & G_{\alpha\beta}(k) G_{\lambda\gamma}(k') \delta_{q0} \\ & - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} G_{\alpha\alpha'}(k) G_{\gamma'\gamma}(k') F_{\alpha'\gamma'\beta'\lambda'}(k, k+q, k'-k) G_{\beta'\beta}(k+q) G_{\lambda\lambda'}(k'+q) \end{aligned} \quad (3.42)$$

となる. pp channel に関しては、pp 表現の 2 体グリーン関数 (3.21) の最初の項をのぞいた

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k, k', q) = & G_{\alpha\gamma}(k) G_{\beta\lambda}(-k-q) \delta_{kk'} \\ & - \sum_{\substack{\alpha'\beta' \\ \gamma'\lambda'}} G_{\alpha\alpha'}(k) G_{\beta\beta'}(-k-q) F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}^{\text{pp}}(k, k', q) G_{\gamma'\gamma}(k') G_{\lambda'\lambda}(-k'-q) \end{aligned} \quad (3.43)$$

※44定義に従えば、

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}(x_1, x_2, x_3, x_4) = G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) - G_{\alpha\beta}(x_1, x_2) G_{\lambda\gamma}(x_4, x_3) \quad (3.39)$$

であり、最も簡単な場合として、単一軌道の場合を考え、 $\alpha, \beta$  がアップスピン、 $\gamma, \lambda$  がダウンスピンを表すとして、 $\tau_1 < \tau_2, \tau_3 > \tau_4$  の順序を保ったまま、 $x_1, x_2, x_3, x_4 \rightarrow 0$  とすると、

$$\chi \rightarrow \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle \quad (3.40)$$

のように密度揺らぎが得られる. このような静的な揺らぎを動的に一般化したものを感受率と呼ぶ. また、 $\alpha, \beta, \gamma, \lambda$  の選び方によって、スピン揺らぎ・超伝導揺らぎ・軌道揺らぎ等に対応する様々な感受率を構成することができる. 感受率を最も一般化したものであることから、(3.38) は一般化感受率と呼ばれる.

となる. (3.41),(3.42),(3.43) において  $F = 0$  とした

$$\chi_{0,\alpha\beta\gamma\lambda}^l(k, k', q) = \begin{cases} -G_{\alpha\gamma}(k)G_{\lambda\beta}(k+q)\delta_{kk'} & (l = \text{ph}) \\ G_{\alpha\beta}(k)G_{\lambda\gamma}(k')\delta_{q0} & (l = \overline{\text{ph}}) \\ G_{\alpha\gamma}(k)G_{\beta\lambda}(-k-q)\delta_{kk'} & (l = \text{pp}) \end{cases} \quad (3.44)$$

は既約感受率 (reducible susceptibility) と呼ばれる. これは Sec.3.2.2 で導入した ph,  $\overline{\text{ph}}$ , pp pair そのものである. 既約感受率を用いると、(3.41) は

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k, k', q) = -\chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k, k', q) - \chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k, q)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(k, k', q)\chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k', q) \quad (3.45)$$

$$\chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k, q) = \sum_{k'} \chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{ph}}(k, k', q) \quad (3.46)$$

と書け、(3.43) は

$$\chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k, k', q) = \chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k, k', q) - \chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k, q)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}^{\text{pp}}(k, k', q)\chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k', q) \quad (3.47)$$

$$\chi_{0\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k, q) = \sum_{k'} \chi_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\text{pp}}(k, k', q) \quad (3.48)$$

と書ける.

### 3.4 自己エネルギー

(1.49) で

$$\left(-\langle T_\tau e^{\tau H} [c_{r\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-\tau H} c_{r'\beta}^\dagger \rangle\right) = \sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int d\tau'' \Sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau - \tau') G_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \tau') \quad (3.49)$$

のように自己エネルギーを導入した. (3.49) の左辺の交換関係を計算すると、

$$\begin{aligned} \left(-\langle T_\tau e^{\tau H} [c_{r\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-\tau H} c_{r'\beta}^\dagger \rangle\right) &= \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} \langle T_\tau c_{r\gamma'}(\tau) c_{r'\lambda'}^\dagger(\tau) c_{r\beta'}(\tau) c_{r'\beta}^\dagger(\tau) \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\beta'\lambda'} U_{\alpha\lambda'\beta'\lambda'} \langle T_\tau c_{r\beta'}(\tau) c_{r'\beta}^\dagger(\tau) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\lambda'\beta\beta'}^{(2)}(x, x, x', x) - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\lambda'} U_{\alpha\lambda'\beta'\lambda'} G_{\beta'\beta}(x, x') \end{aligned} \quad (3.50)$$

ここで、 $x = (\tau, \mathbf{r})$ ,  $x' = (0, \mathbf{r}')$  である.

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\lambda'\beta\beta'}^{(2)}(x, x, x', x) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\lambda'}(x, x) G_{\beta'\beta}(x, x') - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\beta}(x, x') G_{\beta'\lambda'}(x, x) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''} \sum_{\substack{x_1'x_2' \\ \gamma''\lambda'' x_3'x_4'}} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(x, x_1') G_{\beta''\lambda'}(x_2', x) F_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(x_1', x_2', x_3', x_4') \\ &\quad \times G_{\gamma''\beta}(x_3', x') G_{\beta'\lambda''}(x, x_4') \end{aligned} \quad (3.51)$$

(3.51) の右辺第一項と第二項は、

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\lambda'}(x, x) G_{\beta'\beta}(x, x') - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\beta}(x, x') G_{\beta'\lambda'}(x, x) \\ &= - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\beta'\lambda'}(x, x) G_{\gamma'\beta}(x, x') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} (\langle c_{\mathbf{r}\beta'}^\dagger c_{\mathbf{r}\lambda'} \rangle - \frac{1}{2} \delta_{\beta'\lambda'}) G_{\gamma'\beta}(x, x') \\
&= - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\beta'\lambda'}(\tau = -0, \mathbf{r} = \mathbf{0}) G_{\gamma'\beta}(x, x') + \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'} U_{\alpha\beta'\gamma'\beta'} G_{\gamma'\beta}(x, x') \quad (3.52)
\end{aligned}$$

(3.51) (3.52) を (3.50) に代入すると、

$$\begin{aligned}
&\left( -\langle T_\tau e^{\tau H} [c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}] e^{-\tau H} c_{\mathbf{r}'\beta}^\dagger \rangle \right) \\
&= - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\beta'\lambda'}(\tau = -0, \mathbf{r} = \mathbf{0}) G_{\gamma'\beta}(x, x') \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\lambda'\beta\beta'}^{(2)\text{connected}}(x, x, x', x) \\
&= - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\beta'\lambda'}(\tau = -0, \mathbf{r} = \mathbf{0}) G_{\gamma'\beta}(x, x') \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(x, x'_1) G_{\beta''\lambda'}(x'_2, x) F_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(x'_1, x'_2, x', x'_4) \\
&\quad \times G_{\beta'\lambda''}(x, x'_4) G_{\gamma''\beta}(x'_3, x') \quad (3.53)
\end{aligned}$$

(1.49) と (3.53) を比較すると、

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\alpha\beta}(x, x') &= - \underbrace{\sum_{\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} G_{\gamma\lambda}(\tau = -0, \mathbf{r} = \mathbf{0})}_{\Sigma^{\text{HF}}} \\
&\quad - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''} \sum_{x_1 x_2 x_4} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(x, x'_1) G_{\beta''\lambda'}(x'_2, x) F_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(x'_1, x'_2, x', x'_4) G_{\beta'\lambda''}(x, x'_4)}_{\Sigma^{\text{G}}(x, x')} \quad (3.54)
\end{aligned}$$

を得る。右辺第一項が Hartree-Fock 項を与え、第二項が相関項を与える。Fourier 変換すれば、

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\alpha\beta}(k) &= - \sum_{\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} \sum_k G_{\gamma\lambda}(k) e^{-i\omega(-0)} \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''} \sum_{k'q} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(k') G_{\beta''\lambda'}(k' + q) F_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(k', k, q) G_{\beta'\lambda''}(k + q) \\
&= - \sum_{\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} \sum_k G_{\gamma\lambda}(k) e^{-i\omega(-0)} \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''} \sum_{k'q} F_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'}(k, k', q) G_{\gamma'\alpha''}(k') G_{\beta''\lambda'}(k' + q) U_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''} G_{\beta'\lambda''}(k + q) \quad (3.55)
\end{aligned}$$

となる<sup>※45</sup>。(3.55) のダイアグラム表現は図 13 のようになる。

※45 1 行目第二項から 2 行目第二項への変換は UGGF の部分に 2 回 crossing の操作を行えば良い。

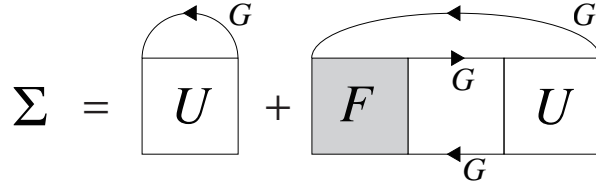


図 13: フルバーテックスを用いた自己エネルギーのダイアグラム表現

## 4 超伝導

### 4.1 南部表示

超伝導状態を考えるため、次のような生成消滅演算子を成分にもつベクトルを導入する.

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} c_{r\alpha_1}(\tau) \\ c_{r\alpha_2}(\tau) \\ \vdots \\ c_{r\alpha_N}(\tau) \\ c_{r\alpha_1}^\dagger(\tau) \\ c_{r\alpha_2}^\dagger(\tau) \\ \vdots \\ c_{r\alpha_N}^\dagger(\tau) \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

ここで、 $N$  は内部自由度の数を表す. (4.1) は南部表示と呼ばれる.

$$\begin{aligned} G(x, x') &= -\langle T_\tau \Psi(x) \Psi^\dagger(x') \rangle \\ &= \begin{pmatrix} G(x, x') & \mathcal{F}(x, x') \\ \bar{\mathcal{F}}(x, x') & \bar{G}(x, x') \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.2)$$

$G, \bar{G}, \mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$  はそれぞれ内部自由度を足に持つ行列で、その成分は、

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = -\langle T_\tau c_{r\alpha}(\tau) c_{r'\beta}^\dagger(\tau') \rangle \quad (4.3)$$

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(x, x') = -\langle T_\tau c_{r\alpha}^\dagger(\tau) c_{r'\beta}(\tau') \rangle \quad (4.4)$$

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta}(x, x') = -\langle T_\tau c_{r\alpha}(\tau) c_{r'\beta}(\tau') \rangle \quad (4.5)$$

$$\bar{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}(x, x') = -\langle T_\tau c_{r\alpha}^\dagger(\tau) c_{r'\beta}^\dagger(\tau') \rangle \quad (4.6)$$

となる.  $G, \bar{G}$  を正常グリーン関数 (Normal Green's function)、 $\mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$  を異常グリーン関数 (Anomalous Green's function) と呼ぶ<sup>※46</sup>.  $G$  と  $\bar{G}$  の関係は

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(x, x') = -\theta(\tau - \tau') \langle c_{r\alpha}^\dagger(\tau) c_{r'\beta}(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle c_{r'\beta}(\tau') c_{r\alpha}^\dagger(\tau) \rangle = -G_{\beta\alpha}(x', x) \quad (4.7)$$

$\mathcal{F}$  と  $\bar{\mathcal{F}}$  の関係は、虚時間ハイゼンベルグ表示のエルミート共役  $\{A(\tau)\}^\dagger = A^\dagger(-\tau)$  を思い出すと

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}(x, x') &= -\theta(\tau - \tau') \langle c_{r\alpha}^\dagger(\tau) c_{r'\beta}^\dagger(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle c_{r'\beta}^\dagger(\tau') c_{r\alpha}^\dagger(\tau) \rangle \\ &= \left[ -\theta(\tau - \tau') \langle c_{r'\beta}(-\tau') c_{r\alpha}(-\tau) \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle c_{r\alpha}(-\tau) c_{r'\beta}(-\tau') \rangle \right]^* \\ &= \left[ -\theta(\tau - \tau') \langle c_{r'\beta}(\tau) c_{r\alpha}(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle c_{r\alpha}(\tau') c_{r'\beta}(\tau) \rangle \right]^* \end{aligned}$$

※46 シラフの Green さんが考えたのが  $G$  で、泥酔したグリーンさんが考えたのが  $\mathcal{F}$ .

$$=\mathcal{F}_{\beta\alpha}^*(\tau, \tau', \mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad (4.8)$$

となる. 空間の並進対称性と反転対称性を仮定して、Fourier 変換すると、

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(k) = - \int dx G_{\beta\alpha}(-x) e^{ikx} = - \int dx G_{\beta\alpha}(x) e^{i(-k)x} = -G_{\beta\alpha}(-k) \quad (4.9)$$

$$\bar{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}(k) = \int dx \mathcal{F}_{\beta\alpha}^*(x) e^{ikx} = \left( \int dx \mathcal{F}_{\beta\alpha}(x) e^{i(-k)x} \right) = \mathcal{F}_{\beta\alpha}^*(-k) \quad (4.10)$$

常伝導状態を考える場合、 $\langle cc \rangle$  や  $\langle c^\dagger c^\dagger \rangle$  はゼロとなるが、超伝導状態ではこれらの相関関数が有限の値を持つ. それによって、Sec.2 のダイアグラム展開の中にもこれらの寄与が現れることになる. しかし、Sec.2 の議論はある程度そのまま流用することができる. まず、既約性について考える. Sec.2 では  $G_0$  線 1 本で切ったときにダイアグラムが 2 つに分かれるかどうか、を考えたが、超伝導状態では  $G_0, \bar{G}_0, \mathcal{F}_0, \bar{\mathcal{F}}_0$  のどれか一本を切ったときにダイアグラムが 2 つに分かれるかどうか、と言うことを考える. Sec.2 で  $G_0$  線一本を切ったときに 2 つに分かれないダイアグラムの集合として自己エネルギー  $\Sigma$  を導入したように、 $G_0, \bar{G}_0, \mathcal{F}_0, \bar{\mathcal{F}}_0$  のどれか一本を切ったときに 2 つに分かれないダイアグラムの集合をそれぞれ  $\Sigma, \bar{\Sigma}, \Delta, \bar{\Delta}$  として

$$\Sigma(k) = \begin{pmatrix} \Sigma(k) & \Delta(k) \\ \bar{\Delta}(k) & \bar{\Sigma}(k) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

を導入すると、

$$\begin{aligned} G(k) &= G_0(k) + G_0(k) \Sigma(k) G_0(k) + G_0(k) \Sigma(k) G_0(k) \Sigma(k) G_0(k) + \cdots \\ &= G_0(k) + G_0(k) \Sigma(k) G(k) \end{aligned} \quad (4.12)$$

のように、超伝導状態に対するダイソン方程式を得ることができる.  $\Sigma, \bar{\Sigma}$  を**正常自己エネルギー (Normal self-energy)**、 $\Delta, \bar{\Delta}$  を**異常自己エネルギー (Anomalous self-energy)** と呼ぶ.  $\Sigma \leftrightarrow \bar{\Sigma}$  には  $G \leftrightarrow \bar{G}$  と同じ関係性があり、 $\Delta \leftrightarrow \bar{\Delta}$  には  $\mathcal{F} \leftrightarrow \bar{\mathcal{F}}$  と同じ関係性がある. 相互作用がない場合、 $\mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$  はゼロなので、

$$G_0(k) = \begin{pmatrix} G_0(k) & 0 \\ 0 & \bar{G}_0(k) \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

である.

## 4.2 エリアシュベルグ方程式

超伝導状態を考えると、ダイアグラム展開の中に  $\mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$  のような、生成および消滅演算子のペアのグリーン関数が現れるため、状況はかなり複雑になる. しかし、正常自己エネルギー  $\Sigma$  および異常自己エネルギー  $\Delta$  は、形式的には、

$$\Sigma_{\alpha\gamma}(k) = \sum_{\beta\lambda} \sum_{k', q} V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^\Sigma(k, k', q) G_{\beta\lambda}(k' + q) \quad (4.14)$$

$$\Delta_{\alpha\lambda}(k) = \sum_{\beta\gamma} \sum_{k, q} V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^\Delta(k, k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}(k' + q) \quad (4.15)$$

の形に書くことができる. ここで、 $V^\Sigma, V^\Delta$  はそれぞれ正常、異常自己エネルギーを与えるバーテックスである. (4.12) と (4.14) (4.15) の連立方程式を**エリアシュベルグ方程式 (Eliashberg equation)** という. ここでは超伝導状態を想定しており、 $V^\Sigma, V^\Delta$  の中には、 $G$  だけでなく  $\mathcal{F}$  も現れるので、一般には Sec.3 までで考えてきた常伝導状態におけるダイアグラムに関する議論をそのまま使うことはできない. しかし、 $\mathcal{F}$  や  $\Delta$  が十分に小さい場合には、常伝導状態の議論を用いることができる.

(4.12) を具体的に計算すると、

$$\begin{pmatrix} G(k) & \mathcal{F}(k) \\ \bar{\mathcal{F}}(k) & \bar{G}(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G(k) + G_0(k)\Delta(k)\bar{\mathcal{F}}(k) & G_0(k)\Sigma(k)\mathcal{F}(k) + G_0(k)\Delta(k)\bar{G}(k) \\ \bar{G}_0(k)\bar{\Delta}(k)G(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Sigma}(k)\bar{\mathcal{F}}(k) & \bar{G}_0(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Delta}(k)\mathcal{F}(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Sigma}(k)\bar{G}(k) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

となる. (4.16) の左上と右上の成分のダイアグラム表現は図 14 のようになる. 超伝導転移温度  $T_c$  付近を想定し、 $\mathcal{F}$  や  $\Delta$  が小さいとして、これらの 1 次の項のみ残すと

$$\begin{pmatrix} G(k) & \mathcal{F}(k) \\ \bar{\mathcal{F}}(k) & \bar{G}(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G(k) & G_0(k)\Sigma(k)\mathcal{F}(k) + G_0(k)\Delta(k)\bar{G}(k) \\ \bar{G}_0(k)\bar{\Delta}(k)G(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Sigma}(k)\bar{\mathcal{F}}(k) & \bar{G}_0(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Delta}(k)\mathcal{F}(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Sigma}(k)\bar{G}(k) \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

を得る. (4.17) の左上の成分は常伝導状態におけるダイソン方程式そのものである. 右上の成分に着目すると、

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(k) &= G_0(k)\Sigma(k)\mathcal{F}(k) + G_0(k)\Delta(k)\bar{G}(k) \\ &\rightarrow [1 - G_0(k)\Sigma(k)]\mathcal{F}(k) = G_0(k)\Delta(k)\bar{G}(k) \\ &\rightarrow \underbrace{[G_0^{-1}(k) - \Sigma(k)]}_{G^{-1}(k)}\mathcal{F}(k) = \Delta(k)\bar{G}(k) \\ &\rightarrow \mathcal{F}(k) = G(k)\Delta(k)\bar{G}(k) \end{aligned} \quad (4.18)$$

$\bar{\mathcal{F}}$  に関しても同様で、結局

$$\begin{pmatrix} G(k) & \mathcal{F}(k) \\ \bar{\mathcal{F}}(k) & \bar{G}(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_0(k) + G_0(k)\Sigma(k)G(k) & G(k)\Delta(k)\bar{G}(k) \\ \bar{G}(k)\bar{\Delta}(k)G(k) & \bar{G}_0(k) + \bar{G}_0(k)\bar{\Sigma}(k)\bar{G}(k) \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

が得られる. 次に、 $\mathcal{F}$  の 1 次の範囲で Sec.1.3.2 と同様に異常グリーン関数  $\mathcal{F}$  に関する運動方程式から、異常自己エネルギーの具体形を導きたい. 消滅演算子の微分は、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) = -[c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau), H] = -\sum_{\mathbf{r}''\gamma} (t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \mu\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''}\delta_{\alpha\gamma})c_{\mathbf{r}''\gamma}(\tau) - e^{\tau H}[c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}]e^{-\tau H} \quad (4.20)$$

異常グリーン関数の運動方程式は、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{F}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = -\sum_{\mathbf{r}''\gamma} (t_{\mathbf{r}\mathbf{r}''\alpha\gamma} - \mu\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}''}\delta_{\alpha\gamma})\mathcal{F}_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \tau) - \left( -\langle T_{\tau} e^{\tau H}[c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}]e^{-\tau H} c_{\mathbf{r}'\beta} \rangle \right) \quad (4.21)$$

(4.16) の右上の成分と運動方程式を見比べれば

$$\begin{aligned} \left( -\langle T_{\tau} e^{\tau H}[c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}]e^{-\tau H} c_{\mathbf{r}'\beta} \rangle \right) &= \sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int d\tau'' \Sigma_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau - \tau') \mathcal{F}_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \tau') \\ &\quad + \sum_{\mathbf{r}''\gamma} \int d\tau'' \Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', \tau - \tau') \bar{G}_{\gamma\beta}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \tau') \end{aligned} \quad (4.22)$$

の様に書くことができることがわかる.

$$\begin{aligned} \left( -\langle T_{\tau} e^{\tau H}[c_{\mathbf{r}\alpha}, H_{\text{int}}]e^{-\tau H} c_{\mathbf{r}'\beta} \rangle \right) &= \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} \langle T_{\tau} c_{\mathbf{r}\gamma'}(\tau) c_{\mathbf{r}\lambda'}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{r}\beta'}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\beta'\lambda'} U_{\alpha\lambda'\beta'\lambda'} \langle T_{\tau} c_{\mathbf{r}\beta'}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} \tilde{G}_{\gamma'\lambda'\beta\beta'}^{(2)}(x, x, x', x) - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\lambda'} U_{\alpha\lambda'\beta'\lambda'} \mathcal{F}_{\beta'\beta}(x, x') \end{aligned} \quad (4.23)$$

ここで、

$$\tilde{G}_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \langle T c_{\mathbf{r}_1\alpha}(\tau_1) c_{\mathbf{r}_2\beta}^{\dagger}(\tau_2) c_{\mathbf{r}_4\lambda}(\tau_4) c_{\mathbf{r}_3\gamma}(\tau_3) \rangle \quad (4.24)$$

である。これをここでは異常 2 体グリーン関数と呼ぶことにする<sup>※47</sup>。 $\mathcal{F}$  に関して 1 次の寄与のみ残す場合、

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = & G_{\alpha\beta}(x_1, x_2)\mathcal{F}_{\lambda\gamma}(x_4, x_3) - \mathcal{F}_{\alpha\gamma}(x_1, x_3)G_{\lambda\beta}(x_4, x_2) + \mathcal{F}_{\alpha\lambda}(x_1, x_4)G_{\gamma\beta}(x_3, x_2) \\ & - G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1)G_{\beta'\beta}(x'_2, x_2)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)\mathcal{F}_{\gamma'\gamma}(x'_3, x_3)G_{\lambda\lambda'}(x_4, x'_4) \\ & + G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1)G_{\beta'\beta}(x'_2, x_2)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)\mathcal{F}_{\lambda\gamma'}(x_4, x'_3)G_{\gamma\lambda'}(x_3, x'_4) \\ & + \mathcal{F}_{\alpha\gamma'}(x_1, x'_3)G_{\beta'\beta}(x'_2, x_2)F_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)G_{\gamma\alpha'}(x_3, x'_1)G_{\lambda\lambda'}(x_4, x'_4) \\ & - 2G_{\alpha\alpha'}(x_1, x'_1)G_{\beta'\beta}(x'_2, x_2)\tilde{F}_{\alpha'\beta'\gamma'\lambda'}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)G_{\gamma\gamma'}(x_3, x'_3)G_{\lambda\lambda'}(x_4, x'_4)\end{aligned}\quad (4.25)$$

とできる<sup>※48</sup>。(4.25) 右辺第 7 項の  $\tilde{F}$  はその内部に 1 つだけ  $\mathcal{F}$  を含み、4 つの頂点の 3 つが生成演算子に対応し、1 つが消滅演算子に対応するようなフルバーテックスである。これをここでは異常フルバーテックスと呼ぶことにする。 $\tilde{F}$  は粒子数を保存するような通常のフルバーテックス  $F$  の 2 つの  $c$  に対応する頂点のうち 1 つが  $c^\dagger$  に置き換わったものであるので、その選び方から 2 通りあるが、これらの寄与は内部のバーテックスの crossing symmetry を考えると同じ寄与を与えるので、それらをひとまとめにして係数 2 をつけてある<sup>※49</sup>。(4.23) の 2 行目第一項に (4.25) を代入すると

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} \tilde{G}_{\gamma'\lambda'\beta\beta'}^{(2)}(x, x, x', x) \\ = \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\lambda'}(x, x) \mathcal{F}_{\beta'\beta}(x, x') - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} \mathcal{F}_{\gamma'\beta}(x, x') G_{\beta'\lambda'}(x, x) + \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} \mathcal{F}_{\gamma'\beta'}(x, x) \underbrace{G_{\beta\lambda'}(x, x')}_{-\tilde{G}_{\lambda'\beta}(x'x)} \\ - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''} \sum_{\gamma''\lambda''} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(x, x'_1) G_{\beta''\lambda'}(x'_2, x) F_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4) \mathcal{F}_{\gamma''\beta}(x'_3, x') G_{\beta'\lambda''}(x, x'_4) \\ + \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''} \sum_{\gamma''\lambda''} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(x, x'_1) G_{\beta''\lambda'}(x'_2, x) F_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4) \mathcal{F}_{\beta'\gamma''}(x', x'_3) \underbrace{G_{\beta\lambda''}(x', x'_4)}_{-\tilde{G}_{\lambda''\beta}(x'_4x')} \\ - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''} \sum_{\gamma''\lambda''} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(x, x'_1) G_{\beta''\lambda'}(x'_2, x) \tilde{F}_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(x'_1, x'_2, x'_3, x'_4) G_{\beta\gamma''}(x', x'_3) \underbrace{G_{\beta\lambda''}(x', x'_4)}_{-\tilde{G}_{\lambda''\beta}(x'_4x')}\end{aligned}\quad (4.26)$$

ここで、(4.25) の右辺第 5, 6 項からくる寄与は crossing symmetry で同じ形に変形できるので、まとめて 2 倍にしている。(4.26) と (4.22) を比較すると、Sec.3.4 と同様の議論から、正常自己エネルギーは、

$$\begin{aligned}\Sigma_{\alpha\beta}(k) = & - \sum_{\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} \sum_k G_{\gamma\lambda}(k) e^{-i\omega(-0)} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''} F_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'}(k, k', q) G_{\gamma'\alpha''}(k') G_{\beta''\lambda'}(k' + q) U_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''} G_{\beta'\lambda''}(k + q)\end{aligned}\quad (4.27)$$

となり、異常自己エネルギーは

$$\begin{aligned}\Delta_{\alpha\beta}(k) = & - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'} U_{\alpha\beta'\gamma'\beta} \sum_k \mathcal{F}_{\gamma'\beta'}(k) \\ & - \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(k') G_{\beta''\lambda'}(k' + q) F_{\alpha''\beta''\gamma''\beta}(k', k, q) \mathcal{F}_{\beta'\gamma''}(k + q) \\ & + \sum_{\beta'\gamma'\lambda'} \sum_{\alpha''\beta''\gamma''} U_{\alpha\beta'\gamma'\lambda'} G_{\gamma'\alpha''}(k') G_{\beta''\lambda'}(k' + q) \tilde{F}_{\alpha''\beta''\gamma''\lambda''}(k, k', q) G_{\beta\gamma''}(k + q)\end{aligned}\quad (4.28)$$

<sup>※47</sup>一般にそういう呼び方がされてるのは知らん。

<sup>※48</sup>添え字とかめっちゃ間違えてそう...

<sup>※49</sup>(4.25) では、 $F_{\alpha\beta\gamma\lambda}$  の  $\gamma$  に対応する  $c$  が  $c^\dagger$  に置き換わった項を書いているが、 $\beta$  が置き換わった項もあって、これらは同じ寄与を与える。



$$\begin{aligned}
\overleftrightarrow{G} &= \overleftarrow{G_0} + \overleftarrow{G_0} \circ \Sigma \overleftrightarrow{G} + \overleftarrow{G_0} \circ \Delta \overleftrightarrow{\mathcal{F}} \\
\overleftrightarrow{\mathcal{F}} &= \overleftarrow{G_0} \circ \Sigma \overleftrightarrow{\mathcal{F}} + \overleftarrow{G_0} \circ \Delta \overleftrightarrow{\tilde{G}}
\end{aligned}$$

図 14: 超伝導状態におけるダイソン方程式

$$\Delta = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]}$$

Figure 15 shows three Feynman diagrams for the linearized Eliashberg equation. The first diagram is a box labeled  $U$  with a self-energy loop labeled  $\mathcal{F}$ . The second diagram is a box labeled  $F$  followed by a box labeled  $U$ , with a self-energy loop labeled  $\mathcal{F}$  and a line labeled  $G$  connecting them. The third diagram is a box labeled  $\tilde{F}$  followed by a box labeled  $U$ , with a self-energy loop labeled  $G$  and a line labeled  $G$  connecting them.

図 15: 線形化された異常自己エネルギー

となる. (4.28) の右辺第三項は、 $\tilde{F}$  中の  $\mathcal{F}$  を外側に持ってくるような変数変換を行えば形式的には (4.15) の形にすることができる. そのような変形をした時の  $V^\Delta$  の中には  $\mathcal{F}$  は含まれていないので、(4.15) は  $\Delta(k)$  に関する線形方程式になっている. これを**線形化エリヤシュベルグ方程式 (linearized Eliashberg equation)**と呼ぶ. (4.28) の右辺第三項は、 $\tilde{F}$  の内部に  $\mathcal{F}$  を含んでおり、常伝導状態における議論がそのまま用いることができず厄介である. ただ、 $\tilde{F}$  中の可約バーテックスは、ph または  $\overline{\text{ph}}$  が途中で pp channel に切り替わるような構造をもつ<sup>\*50</sup>. 多くの場合、ph,  $\overline{\text{ph}}$  pair と pp pair が運ぶ一般化波数は異なるため<sup>\*51</sup>、すくなくとも、 $\mathcal{F}$  や  $\Delta$  が小さいような転移温度付近では、これらの影響は大きくないと考えて良いと思われる<sup>\*52</sup>.

### 4.3 U(1) 対称性

$\mathcal{F}, \tilde{\mathcal{F}}$  が有限の状態がどういう状態であるかを少しだけ見ておく. 任意の  $\theta$  に対して

$$U^\dagger(\theta) c_{r\alpha} U(\theta) = e^{-i\theta} c_{r\alpha} \quad (4.29)$$

$$U^\dagger(\theta) U(\theta) = 1 \quad (4.30)$$

のようなゲージ変換を考える. これは U(1) ゲージと呼ばれる. ハミルトニアンは、

$$U^\dagger(\theta) H U(\theta) = H \quad (4.31)$$

のようにこのゲージ変換に対して不変である. (4.29) の定義から  $U(\theta)$  は 1 粒子状態の位相を  $\theta$  だけ変化させる演算子であるが、多粒子状態においては全ての粒子の位相を同じだけ変化させる演算子になっている. 粒子数が  $N$  に定まった状態は、

$$|\Psi_N\rangle = \prod_j^N c_{r_j\alpha_j}^\dagger |0\rangle \quad (4.32)$$

と書ける<sup>\*53</sup> ので、

$$U^\dagger(\theta) |\Psi_N\rangle = \prod_j^N U^\dagger(\theta) c_{r_j\alpha_j}^\dagger U(\theta) U^\dagger(\theta) |0\rangle$$

\*50 説明いるよね?

\*51 例があった方がよいかな? 2次元正方格子の、相互作用がない場合の ph channel と pp channel の既約感受率を考えればよいんだけど...あと、これは常に正しいわけではないんだよね..

\*52 ちょー自信ない...

\*53 粒子数が定まった状態と言っても、位置座標や内部自由度の組み合わせの数だけ状態があるので、一般の粒子数  $N$  の波動関数はそれらの重ね合わせになる.

$$\begin{aligned}
&= \prod_j^N e^{i\theta} c_{\mathbf{r}_j \alpha_j}^\dagger |0\rangle \\
&= e^{iN\theta} \prod_j^N c_{\mathbf{r}_j \alpha_j}^\dagger |0\rangle \\
&= e^{iN\theta} |\Psi_N\rangle
\end{aligned} \tag{4.33}$$

が得られる。1 行目から 2 行目では、真空に変換を施しても何も変わらないことから  $U^\dagger(\theta)|0\rangle = |0\rangle$  を用いた。このように  $U(\theta)$  は粒子数が定まった状態の絶対位相を変化させる演算子とも言える。また (4.31) より、粒子数が定まった状態というのはハミルトニアンを持つ対称性を保った状態であることもわかる。

次に、 $\tau > \tau'$  として、 $\mathcal{F}$  に  $U(\theta)$  の変換を適用すると、

$$\begin{aligned}
\langle c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}(\tau') \rangle &= \sum_m \langle m | e^{-\beta H} c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}(\tau') | m \rangle \\
&= \sum_m \langle m | e^{-\beta H} \underbrace{U(\theta) U^\dagger(\theta)}_1 c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) \underbrace{U(\theta) U^\dagger(\theta)}_1 c_{\mathbf{r}'\beta}(\tau') \underbrace{U(\theta) U^\dagger(\theta)}_1 | m \rangle \\
&= \sum_m e^{-\beta E_m} \langle m' | \underbrace{U^\dagger(\theta) c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) U(\theta)}_{e^{-\theta}} \underbrace{U^\dagger(\theta) c_{\mathbf{r}'\beta}(\tau') U(\theta)}_{e^{-\theta}} | m' \rangle \\
&= e^{-2\theta} \langle c_{\mathbf{r}\alpha}(\tau) c_{\mathbf{r}'\beta}(\tau') \rangle
\end{aligned} \tag{4.34}$$

となる<sup>\*54</sup>。ここで  $|m'\rangle = U(\theta)|m\rangle$  である。また、 $U(\theta)$  とハミルトニアンは可換であるので、 $|m\rangle$  と  $|m'\rangle$  のエネルギーは同じである。 $\theta$  は任意であるため、(4.34) が成り立つためには  $\langle cc \rangle = 0$ 、すなわち、 $\mathcal{F} = \bar{\mathcal{F}} = 0$  でなければならない。 $\mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$  は有限になるためには、例えば、 $|m\rangle = \sum_N C_N |\Psi_N\rangle$  のような粒子数が不確定な状態を選ぶとよい。この状態に  $U(\theta)$  を作用させると相対位相が生じ、粒子数確定状態の重ね合わせの係数  $C_N$  が適切に選ばれていれば、(4.34) の下から 2 行目の計算の際に生成演算子から生じる  $-2\theta$  の位相が相殺される。しかし、 $U(\theta)$  の作用に対して相対位相を与えるということは状態が変わってしまうということであり、したがって、 $\mathcal{F}$  や  $\bar{\mathcal{F}}$  が有限の状態は、ハミルトニアンが元々もっている大域的  $U(1)$  対称性が自発的に破れた状態によって構成されるということになる。このような性質を持つ波動関数として、例えば、BCS 波動関数

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{-\mathbf{k}}^\dagger) |0\rangle \tag{4.35}$$

がある。ここで、 $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$  である。また、簡単のため、内部自由度の添え字は省いた。ハミルトニアンが  $U(1)$  対称性をもっているので、位相を  $\theta$  だけずらした状態  $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle_\theta = U(\theta) |\Psi_{\text{BCS}}\rangle$  は、

$$\begin{aligned}
U(\theta) H |\Psi_{\text{BCS}}\rangle &= U(\theta) E |\Psi_{\text{BCS}}\rangle \\
&\rightarrow H |\Psi_{\text{BCS}}\rangle_\theta = E |\Psi_{\text{BCS}}\rangle_\theta
\end{aligned} \tag{4.36}$$

となり、この  $U(\theta)$  の変換で結びつく無限個の状態は全て同じエネルギーを持つことになる。

大域的位相が  $\theta$  だけ異なる状態間の遷移確率を計算する。

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\text{BCS}} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle_\theta &= \prod_{\mathbf{k}} \langle 0 | (u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}) (u_{\mathbf{k}} + e^{2i\theta} v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{-\mathbf{k}}^\dagger) | 0 \rangle \\
&= \prod_{\mathbf{k}} (|u_{\mathbf{k}}|^2 + e^{2i\theta} |v_{\mathbf{k}}|^2)
\end{aligned} \tag{4.37}$$

自然体数を取り、 $\theta$  が小さいと思って 2 次までの寄与を考えると、

$$\ln \langle \Psi_{\text{BCS}} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle_\theta = \ln \sum_{\mathbf{k}} (|u_{\mathbf{k}}|^2 + e^{2i\theta} |v_{\mathbf{k}}|^2)$$

<sup>\*54</sup>  $G, \bar{G}$  では、このような位相は現れない。すなわち  $U(1)$  ゲージ変換に対して不変である。

$$\begin{aligned}
&= \ln \sum_k (|u_k|^2 + |v_k|^2 (1 + 2i\theta - 2\theta^2)) \\
&= \ln \sum_k (1 + |v_k|^2 (2i\theta - 2\theta^2))
\end{aligned} \tag{4.38}$$

$\ln(1+x) \approx x - x^2/2$  を用いると、

$$\begin{aligned}
\ln \langle \Psi_{\text{BCS}} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle_\theta &\approx \sum_k \left[ |v_k|^2 (2i\theta - 2\theta^2) - \frac{1}{2} |v_k|^4 (2i\theta - 2\theta^2)^2 \right] \\
&\approx \sum_k \left[ 2i |v_k|^2 \theta - 2 |v_k|^2 \theta^2 (1 - |v_k|^2) \right] \\
&= 2i\theta \sum_k |v_k|^2 - 2\theta^2 \sum_k |u_k|^2 |v_k|^2
\end{aligned} \tag{4.39}$$

$\sum_k |u_k|^2 |v_k|^2$  は平均粒子数  $N$  に比例する量であるので、これを  $\alpha N$  と書くと、

$$\langle \Psi_{\text{BCS}} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle_\theta \propto e^{-2\alpha\theta N} \tag{4.40}$$

これは熱力学極限  $N \rightarrow \infty$  でゼロとなる。エネルギー的に縮退している無限個の大域的位相が異なる状態間の遷移は禁止される。超伝導状態になると、ある特定の位相が選ばれてそこから動けなくなってしまうのである<sup>\*55</sup>。

BCS 状態を話に出したかったので、(4.34) みたいなくどい変換をしたが、(4.31) と trace の cyclic 則を使えば (4.34) の最終行は導出できるので  $\mathcal{F} = \bar{\mathcal{F}} = 0$  は常に成り立つ。trace を用いている限り  $\mathcal{F}$  や  $\bar{\mathcal{F}}$  が有限になることはない。上の説明は少しインチキなのである。実は、trace による統計平均の定義では、上記のような「ある特定の位相が選ばれる」という状態を表現できないのである<sup>\*56</sup>。これをしようとすると、trace 形式ではなく  $C^*$ -代数というものをを用いる必要がある<sup>\*57</sup>。たとえば温度を下げていくとある温度で、元の空間が、互に行き来することができない部分空間のようなもの<sup>\*58</sup>に分かれる。自発的に対称性が破れた状態における統計量は、これらの部分空間のどれかを選んでその空間内での統計和によって計算される。ただ、 $C^*$ -代数のようなものを扱い出すと大変<sup>\*59</sup>なので、trace 形式の範囲で  $\mathcal{F}$  や  $\bar{\mathcal{F}}$  を扱う方法を紹介しておく。これはボゴリューボフ準平均 (Bogoliubov quasi average) と呼ばれるもので、ハミルトニアンに対称性を破るような項、例えば超伝導状態を想定するなら  $H' \propto cc + c^\dagger c^\dagger$  のような項を付け加えて、すべての計算の最後に  $H' \rightarrow 0$  という操作を行うというものである。このやり方であれば、極限操作を行う前のハミルトニアン  $H + H'$  がそもそも元のハミルトニアン  $H$  の対称性を破っている<sup>\*60</sup>ので、trace 形式であっても  $\mathcal{F}$  や  $\bar{\mathcal{F}}$  を有限として扱うことができる。

まあ、ぐだぐだとややこしいことを言ってきたが、trace 形式が使えるか使えないかは上で行ってきたダイアグラム展開の議論には影響を与えない。なぜならば、ダイアグラム展開は“統計平均を取る”という操

<sup>\*55</sup>“位相”という言葉はいいかげんに捉えて、超伝導関連の文献を読んでいるとわけがわからなくなることが多々ある (気がする)。何も考えずに読んでしまうと、“BCS 状態の”波動関数の絶対位相が定まるかのように読めてしまう文献もある (気がする)。特に、超伝導の特性を解説しているような文献では、この辺りの位相のことはもう分かっているという体でいきなり導入されているものが多い (気がする)。

<sup>\*56</sup>すべての位相に対して和をとってしまうので、結局対称性が破れていないような統計量が計算されてしまう。

<sup>\*57</sup>偉そうに言ってるけど、中身は全くわかってないです... KMS 条件とかいうやつで熱平衡状態を定義するらしい。

<sup>\*58</sup>超選択則セクターとかいうらしい。(4.40) に示したイメージに近いと思う。ただ、通常の意味での部分空間ではなく、それぞれが完全に独立したヒルベルト空間をなす、らしい。この辺の事を厳密に定義しようとする、 $C^*$ -代数のような作用素環論まで踏み込まないといけならしい。あと、この辺の話は  $N \rightarrow \infty$  の熱力学極限での話である。有限系においては、通常の trace 形式がそのまま使える。だとすると、現実の系は厳密には有限系だから自発的対称性の破れは起こらないことになって、実験的に観測されている超伝導はなんなの？ってなる。これは、現実の系は厳密には熱平衡には達していないからである。有限系であれば超伝導状態であっても大域的位相の異なる状態間の遷移確率は有限であるが、その確率は宇宙の年齢ほどの時間があっても遷移できないほどに小さい。宇宙の年齢ほどの時間をかけても緩和されないような準安定状態にトラップされているのである。このような事実上超えられないような障壁によって空間が分離される、ということを数学的に厳密に扱うために、熱力学極限や作用素環論を持ち出すのである。

<sup>\*59</sup>というか私が何もわかっていないので...

<sup>\*60</sup>考えたい対称性の破れに対応した  $H'$  をその都度考えなければならないという欠点はある。一般的な形で厳密に定義しようとする、 $C^*$ -代数が必要になってくる...らしい。あと、このやり方も無限自由度系に対するものであって、数値計算とかで使えるものではない。この辺の話は、異常グリーン関数が有限になるということを真面目に考えようとする、色々ややこしいですよ、ってこと。

作の後のプロセスだからである。ダイアグラム展開はグリーン関数を基本要素として組み立てていくプロセスであるが、異常グリーン関数が  $C^*$ -代数や準平均の枠組みの元で有限になったのか、単に有限と仮定されたのか、には直接依存しない。

## 5 SU(2) symmetric case

### 5.1 相関関数

スピン空間の回転対称性 (SU(2) symmetry) がある場合、スピン自由度の組み合わせによって、2 体のグリーン関数やバーテックス関数は、電荷・スピン・一重項ペア・三重項ペアに相当する channel に分解することができる。ここでは、それぞれの相関関数を通じて、スピン添字の組み合わせをみていく。

#### 5.1.1 charge correlation function

電荷密度演算子は

$$\rho(q) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (5.1)$$

と定義され、電荷相関関数は、

$$\begin{aligned} \langle \rho(q) \rho(-q) \rangle &= \sum_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \langle c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma_1} \sum_{\mathbf{k}'\sigma_2} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma_1} c_{\mathbf{k}'\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma_2} \rangle \end{aligned} \quad (5.2)$$

スピン自由度だけに着目して

$$C_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \equiv \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma_1} c_{\mathbf{k}'\sigma_3}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma_4} \rangle \quad (5.3)$$

を定義すると<sup>※61</sup>、

$$\langle \rho \rho \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} + C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} \quad (5.4)$$

SU(2) symmetry を仮定し、アップスピンダウンスピンの入れ替えに対して等価であるとする、

$$C_c \equiv \langle \rho \rho \rangle / 2 = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} = C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} + C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow} \quad (5.5)$$

#### 5.1.2 spin correlation function

スピン密度演算子は

$$S(q) = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma'} \quad (5.6)$$

であり<sup>※62</sup>、スピン相関関数は、

$$\langle S(q) S(-q) \rangle = \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \sum_{\sigma_1 \sigma'_1} \sum_{\sigma_2 \sigma'_2} \sigma_{\sigma_1 \sigma'_1} \sigma_{\sigma_2 \sigma'_2} \langle c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\sigma'_1} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma'_2} \rangle$$

<sup>※61</sup> 2 体グリーン関数において、 $\tau_2 > \tau_1 > \tau_3 > \tau_4$  の時間順序を維持しながら、 $\tau_i \rightarrow 0$  とすれば得られる。

<sup>※62</sup> スピン密度演算子はこれに 1/2 をつけて定義されることが多いが、ここでは 2 体グリーン関数との対応を重視してこの形で定義する。以下のシングレット、トリプレットペアの密度演算子も同様。

$$= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma_1\sigma'_1} \sum_{\sigma_2\sigma'_2} \sigma_{\sigma_1\sigma'_1} \sigma_{\sigma_2\sigma'_2} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma'_1} c_{\mathbf{k}'\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'_2} \rangle \quad (5.7)$$

各成分を書き下すと、

$$\langle S^x S^x \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} + C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} \quad (5.8)$$

$$\langle S^y S^y \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow} - C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} \quad (5.9)$$

$$\langle S^z S^z \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} - C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} \quad (5.10)$$

$$\langle S^x S^y \rangle = i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow} - C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}) \quad (5.11)$$

$$\langle S^y S^x \rangle = -i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow} - C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}) \quad (5.12)$$

$$\langle S^x S^z \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow} - C_{\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow} \quad (5.13)$$

$$\langle S^z S^x \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow} - C_{\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow} \quad (5.14)$$

$$\langle S^y S^z \rangle = -i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow} - C_{\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow}) \quad (5.15)$$

$$\langle S^z S^y \rangle = i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow} - C_{\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow}) \quad (5.16)$$

スピンの数を保存する項のみ残すと、

$$\langle S^x S^x \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} \quad (5.17)$$

$$\langle S^y S^y \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} \quad (5.18)$$

$$\langle S^z S^z \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} - C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} \quad (5.19)$$

$$\langle S^x S^y \rangle = i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}) \quad (5.20)$$

$$\langle S^y S^x \rangle = -i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}) \quad (5.21)$$

$$\langle S^x S^z \rangle = 0 \quad (5.22)$$

$$\langle S^z S^x \rangle = 0 \quad (5.23)$$

$$\langle S^y S^z \rangle = 0 \quad (5.24)$$

$$\langle S^z S^y \rangle = 0 \quad (5.25)$$

SU(2) 対称性を仮定すると、

$$\begin{aligned} C_s &\equiv \langle S^x S^x \rangle / 2 = \langle S^y S^y \rangle / 2 = \langle S^z S^z \rangle / 2 \\ &= C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} - C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow} = C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow} \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$\langle S^{\mu_1} S^{\mu_2} \rangle_{\mu_1 \neq \mu_2} = 0 \quad (5.27)$$

### 5.1.3 singlet pair correlation function

シングレットペア密度演算子は

$$\Delta_e(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}(i\sigma_y)_{\sigma\sigma'} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'} \quad (5.28)$$

シングレットペア相関関数は、

$$\langle \Delta_e(\mathbf{q}) \Delta_e^\dagger(\mathbf{q}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma_1\sigma'_1} \sum_{\sigma_2\sigma'_2} (i\sigma_y)_{\sigma_1\sigma'_1} (i\sigma_y)_{\sigma_2\sigma'_2}^* \langle c_{\mathbf{k}\sigma_1} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'_1} c_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma_2}^\dagger \rangle \quad (5.29)$$

となる<sup>※63</sup>。スピン自由度だけに着目して

$$C_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^{\text{pp}} \equiv \langle c_{\mathbf{k}\sigma_1} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2} c_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma_4}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma_3}^\dagger \rangle \quad (5.30)$$

を定義すると、

$$\langle \Delta_e \Delta_e^\dagger \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} \quad (5.31)$$

SU(2) 対称性を仮定して、

$$C_e \equiv \langle \Delta_e \Delta_e^\dagger \rangle / 2 = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} = C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} \quad (5.32)$$

### 5.1.4 triplet pair correlation function

トリプレットペア密度演算子は

$$\Delta_o(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma} (i\sigma_y \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\sigma'} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'} \quad (5.33)$$

と定義され、トリプレットペア相関関数は、

$$\langle \Delta_o(\mathbf{q}) \Delta_o^\dagger(\mathbf{q}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma_1\sigma_1'} \sum_{\sigma_2\sigma_2'} (i\sigma_y \boldsymbol{\sigma})_{\sigma_1\sigma_1'} (i\sigma_y \boldsymbol{\sigma})_{\sigma_2\sigma_2'}^* \langle c_{\mathbf{k}\sigma_1} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_1'} c_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma_2'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma_2}^\dagger \rangle \quad (5.34)$$

となる。(5.34) に現れる行列の成分は

$$i\sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad i\sigma_y \sigma_y = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \quad i\sigma_y \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

となるので、

$$\langle \Delta_o^x \Delta_o^x \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} \quad (5.36)$$

$$\langle \Delta_o^y \Delta_o^y \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} \quad (5.37)$$

$$\langle \Delta_o^z \Delta_o^z \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} \quad (5.38)$$

$$\langle \Delta_o^x \Delta_o^y \rangle = -i(C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}}) \quad (5.39)$$

$$\langle \Delta_o^y \Delta_o^x \rangle = i(C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}}) \quad (5.40)$$

$$\langle \Delta_o^x \Delta_o^z \rangle = -(C_{\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} - C_{\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}}) \quad (5.41)$$

$$\langle \Delta_o^z \Delta_o^x \rangle = -(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}}) \quad (5.42)$$

$$\langle \Delta_o^y \Delta_o^z \rangle = -i(C_{\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}}) \quad (5.43)$$

$$\langle \Delta_o^z \Delta_o^y \rangle = i(C_{\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}}) \quad (5.44)$$

スピン数を保存する項のみ残すと、

$$\langle \Delta_o^x \Delta_o^x \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} \quad (5.45)$$

$$\langle \Delta_o^y \Delta_o^y \rangle = C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} \quad (5.46)$$

$$\langle \Delta_o^z \Delta_o^z \rangle = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} \quad (5.47)$$

$$\langle \Delta_o^x \Delta_o^y \rangle = -i(C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}}) \quad (5.48)$$

<sup>※63</sup>2 つ目のパウリ行列のスピン成分ひっくり返さんといかんのでは？ と思いがちだけど、これ、元々成分でかいてるからそのままよい。

$$\langle \Delta_o^y \Delta_o^x \rangle = i(C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} - C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}}) \quad (5.49)$$

$$\langle \Delta_o^x \Delta_o^z \rangle = 0 \quad (5.50)$$

$$\langle \Delta_o^z \Delta_o^x \rangle = 0 \quad (5.51)$$

$$\langle \Delta_o^y \Delta_o^z \rangle = 0 \quad (5.52)$$

$$\langle \Delta_o^z \Delta_o^y \rangle = 0 \quad (5.53)$$

SU(2) 対称性を仮定すると、

$$\begin{aligned} C_o &\equiv \langle \Delta_o^x \Delta_o^x \rangle / 2 = \langle \Delta_o^y \Delta_o^y \rangle / 2 = \langle \Delta_o^z \Delta_o^z \rangle / 2 \\ &= C_{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}^{\text{pp}} = C_{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow}^{\text{pp}} = C_{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{pp}} + C_{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{pp}} \end{aligned} \quad (5.54)$$

を得る。

## 5.2 charge, spin, even, odd channels

スピン空間の回転対称性 (SU(2) symmetry) がある場合、2 体のグリーン関数やバーテックス関数は次の 4 つの channel に分解することができる<sup>※64</sup>。

$$A_c(D) = A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(D) + A_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) \quad (5.55)$$

$$A_s(D) = A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(D) - A_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) = A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) \quad (5.56)$$

$$A_e(D) = A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(D) - A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}(D) \quad (5.57)$$

$$A_o(D) = A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(D) + A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}(D) = A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(D) \quad (5.58)$$

ここで、 $A^l$  は、 $l$ (= ph, pp) 表現の量を表す。  $A_c, A_s$  はそれぞれ電荷 (charge) とスピン (spin) に関連する channel である。  $A_e, A_o$  はそれぞれ超伝導の一重項 (singlet) ペアと三重項 (triplet) ペアに関連する channel であるが、singlet の s と spin の s が衝突してしまうので、even, odd としている<sup>※65</sup>。

$$A_c(D) = A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(D) + A_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) = -A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(C) - A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(C) = -\frac{1}{2}(A_c + 3A_s)(C) \quad (5.59)$$

$$= -A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(P) - A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}(P) = \frac{1}{2}(A_e - 3A_o)(P) \quad (5.60)$$

$$A_s(D) = A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(D) - A_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) = -A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(C) + A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(C) = -\frac{1}{2}(A_c - A_s)(C) \quad (5.61)$$

$$= -A_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(P) + A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}(P) = -\frac{1}{2}(A_e + A_o)(P) \quad (5.62)$$

$$A_e(D) = A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(D) - A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}(D) = -A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(P) + A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{ph}}(P) = \frac{1}{2}(A_c - 3A_s)(P) \quad (5.63)$$

$$= A_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(X) - A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(X) = \frac{1}{2}(A_c - 3A_s)(X) \quad (5.64)$$

$$A_o(D) = A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(D) + A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}(D) = -A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(P) - A_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{ph}}(P) = -\frac{1}{2}(A_c + A_s)(P) \quad (5.65)$$

$$= A_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(X) + A_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(X) = \frac{1}{2}(A_c + A_s)(X) \quad (5.66)$$

<sup>※64</sup>分解すること自体は SU(2) symmtry がなくてもできるので、分解すると便利といった方がよいかもしれない。要は、スピン自由度を 4 つ足の添え字として頭に考えなくてもよくなるということである。スピン自由度を落とすことができるので、バーテックスなどの行列サイズが小さくなり、数値計算等においてはメモリや計算時間の節約が可能となる。

<sup>※65</sup>density, magnetic, singlet, triplet で d,m,s,t という文字を用いる場合もある。

が得られる. pp channel のバーテックスの定義に 1/2 の因子を押し付ける流儀では、バーテックスに関しては<sup>※66</sup>、

$$V_c(D) = V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(D) + V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) = -V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(C) - V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(C) = -\frac{1}{2}(V_c + 3V_s)(C) \quad (5.67)$$

$$= -2V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(P) - 2V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(P) = (V_e - 3V_o)(P) \quad (5.68)$$

$$V_s(D) = V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(D) - V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(D) = -V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(C) + V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(C) = -\frac{1}{2}(V_c - V_s)(C) \quad (5.69)$$

$$= -2V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(P) + 2V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(P) = -(V_e + V_o)(P) \quad (5.70)$$

$$V_e(D) = V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(D) - V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(D) = -\frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(P) + \frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(P) = \frac{1}{4}(V_c - 3V_s)(P) \quad (5.71)$$

$$= \frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(X) - \frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(X) = \frac{1}{4}(V_c - 3V_s)(X) \quad (5.72)$$

$$V_o(D) = V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{pp}}(D) + V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}(D) = -\frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(P) - \frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(P) = -\frac{1}{4}(V_c + V_s)(P) \quad (5.73)$$

$$= \frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}(X) + \frac{1}{2}V_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}}(X) = \frac{1}{4}(V_c + V_s)(X) \quad (5.74)$$

となる<sup>※67</sup>。

### 5.3 感受率

(3.45) の右辺第二項を  $\chi^{\text{ph,connected}}$  と書くと、

$$\begin{aligned} \chi_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph,connected}} &= \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} F_{\sigma\sigma\sigma\sigma} \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} \\ &\quad + \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} F_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \chi_{0\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{ph}} \\ &\quad + \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} F_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma} \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} \\ &\quad + \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} F_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \chi_{0\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{ph}} \end{aligned} \quad (5.75)$$

$$\begin{aligned} \chi_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph,connected}} &= \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} F_{\sigma\sigma\sigma\sigma} \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} \\ &\quad + \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} F_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \chi_{0\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} \\ &\quad + \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} F_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma} \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} \\ &\quad + \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} F_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \chi_{0\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} \end{aligned} \quad (5.76)$$

$$\chi_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph,connected}} = \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}} F_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}} \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}} \quad (5.77)$$

が得られる。<sup>※68</sup> SU(2) の対称性がある場合、アップスピンとダウンスピンの入れ替えに対して物理量は不変であるので、charge channel に関して

$$\begin{aligned} \chi_c^{\text{connected}} &= \chi_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{connected}} + \chi_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{connected}} \\ &= (\chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma} + \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}})(F_{\sigma\sigma\sigma\sigma} + F_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}})(\chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma} + \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) \\ &= \chi_{0c} F_c \chi_{0c} \end{aligned} \quad (5.78)$$

<sup>※66</sup>感受率や 2 体グリーン関数はこの限りではないことに注意. バーテックスの繋ぎ方に関して出てくる規則なので.

<sup>※67</sup>ph 表現から pp 表現に移るときに 2 をかけて、pp 表現から ph 表現に移るときに 1/2 をかけるという規則である.

<sup>※68</sup> $F_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}$  のようなスピン数を保存しない量が含まれる項はここには残らない.



spin channel に関して

$$\begin{aligned}
\chi_s^{\text{connected}} &= \chi_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{connected}} - \chi_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{connected}} \\
&= (\chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma} - \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}})(F_{\sigma\sigma\sigma\sigma} - F_{\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}})(\chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma} - \chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) \\
&= \chi_{0s} F_s \chi_{0s}
\end{aligned} \tag{5.79}$$

または、

$$\chi_s^{\text{connected}} = \chi_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{connected}} = \chi_{0s} F_s \chi_{0s} \tag{5.80}$$

が得られる. 同様に (3.47) の右辺第二項を  $\chi^{\text{pp,connected}}$  と書くと、

$$\begin{aligned}
\chi_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp,connected}} &= \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} F_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} \\
&\quad + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} F_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\bar{\sigma}\sigma\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} \\
&\quad + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} F_{\bar{\sigma}\sigma\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} \\
&\quad + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} F_{\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\bar{\sigma}\sigma\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}}
\end{aligned} \tag{5.81}$$

$$\begin{aligned}
\chi_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp,connected}} &= \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} F_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} \\
&\quad + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} F_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\bar{\sigma}\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}} \\
&\quad + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} F_{\bar{\sigma}\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} \\
&\quad + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} F_{\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\bar{\sigma}\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}}
\end{aligned} \tag{5.82}$$

$$\chi_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp,connected}} = \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}} F_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}} \chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}} \tag{5.83}$$

even channel に関して

$$\begin{aligned}
\chi_e^{\text{connected}} &= \chi_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp,connected}} - \chi_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp,connected}} \\
&= (\chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} - \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}})(F_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} - F_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}})(\chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} - \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}) \\
&= \chi_{0e} F_e \chi_{0e}
\end{aligned} \tag{5.84}$$

odd channel に対して

$$\begin{aligned}
\chi_o^{\text{connected}} &= \chi_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp,connected}} + \chi_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp,connected}} \\
&= (\chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}})(F_{\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} + F_{\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}})(\chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\sigma}^{\text{pp}} + \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}) \\
&= \chi_{0o} F_o \chi_{0o}
\end{aligned} \tag{5.85}$$

または

$$\chi_o^{\text{connected}} = \chi_{\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp,connected}} = \chi_{0o} F_o \chi_{0o} \tag{5.86}$$

が成り立つ. このように、

$$(\chi_0 F \chi_0)_r = \chi_{0r} F_r \chi_{0r} \quad (r = c, s, e, o) \tag{5.87}$$

のように積の  $r$  成分は,  $r$  成分の積となる. ここでは感受率に関してこの性質を示したが、これは SU(2) の対称性がある限り任意の 2 体の量の積について成り立つ.

上では、2体の量の積の一般的な性質を示したかったので、本来0になる寄与も顕に残しておいた。今考えている状況では、一体のグリーン関数  $G$  はスピン対角であり、アップスピンとダウンスピンが等価であることを考えると、

$$\chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{ph}} = \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{ph}} \equiv \chi_0 \quad (5.88)$$

$$\chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}} = 0 \quad (5.89)$$

$$\chi_{0\sigma\sigma\sigma\sigma}^{\text{pp}} = \chi_{0\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}^{\text{pp}} \equiv \phi_0 \quad (5.90)$$

$$\chi_{0\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}} = 0 \quad (5.91)$$

となる<sup>※69</sup>。これらを用いると、

$$\chi_c = \chi_0 - \chi_0 F_c \chi_0 \quad (5.92)$$

$$\chi_s = \chi_0 - \chi_0 F_s \chi_0 \quad (5.93)$$

$$\chi_e = \phi_0 - \phi_0 F_e \phi_0 \quad (5.94)$$

$$\chi_o = \phi_0 - \phi_0 F_p \phi_0 \quad (5.95)$$

## 5.4 自己エネルギー

Sec.4.2 で述べたように、正常、異常自己エネルギーはそれぞれ (4.14) (4.15) の形に書くことができる。

まず正常自己エネルギーから見ていく。今正常グリーン関数にはスピン非対角項は存在しない場合を考えているので、

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\gamma}^{\sigma\sigma}(k) &= \sum_{\sigma'} \sum_{\beta\lambda} \sum_{k'q} V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Sigma,\sigma\sigma'\sigma\sigma'}(k,k',q) G_{\beta\lambda}^{\sigma'\sigma'}(k'+q) \\ &= \sum_{\beta\lambda} \sum_{k'q} [V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Sigma,\sigma\sigma\sigma\sigma}(k,k',q) G_{\beta\lambda}^{\sigma\sigma}(k'+q) + V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Sigma,\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}(k,k',q) G_{\beta\lambda}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(k'+q)] \end{aligned} \quad (5.96)$$

とかける。ここではスピン自由度に着目したいので上付き添え字として書いた。

$$V^{\Sigma,\sigma\sigma\sigma\sigma} = \frac{1}{2} [V_c^{\Sigma} + V_s^{\Sigma}] \quad (5.97)$$

$$V^{\Sigma,\sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}} = V_s^{\Sigma} \quad (5.98)$$

$$G^{\sigma\sigma} = G^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \quad (5.99)$$

を踏まえると、正常自己エネルギーは

$$\Sigma_{\alpha\gamma}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\lambda} \sum_q [V_c^{\Sigma} + 3V_s^{\Sigma}]_{\alpha\beta\gamma\lambda}(k,q) G_{\beta\lambda}(k+q) \quad (5.100)$$

となる。次に異常自己エネルギーを見ていく。singlet の場合、

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha\lambda}^{\text{singlet}}(k) &= \frac{1}{2} [\Delta_{\alpha\lambda}^{\sigma\bar{\sigma}}(k) - \Delta_{\alpha\lambda}^{\bar{\sigma}\sigma}(k)] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \sum_{\sigma'\bar{\sigma}'} \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta,\sigma\sigma'\bar{\sigma}'\bar{\sigma}}(k,q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma'\bar{\sigma}'}(k+q) - \sum_{\sigma'\bar{\sigma}'} \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta,\bar{\sigma}\bar{\sigma}'\sigma'\sigma}(k,q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma'\bar{\sigma}'}(k+q) \right] \end{aligned}$$

<sup>※69</sup>  $\chi_{0\sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{\text{ph}}$  や  $\chi_{0\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma}^{\text{pp}}$  は確かに (3.44) の定義をみると、一体グリーン関数  $G$  のスピン非対角項が含まれるから 0 になるのはわかるんだけど、単に  $G$  線の繋ぎ方としてはあっていんじゃないの？ ( $G$  線の繋ぎ方を変えればスピン対角になるから) と思う人もいるかもしれない。しかし、そういう繋ぎ方も踏まえた上で (3.44)-(3.48) の定義を得ているので、ここでこれらの寄与を有限に残してしまうと double counting になってしまう。同じ寄与を与えるダイアグラムを全部数え上げて (3.44) で代表させていると言っても良い。要は、Sec.3.2.2 で2体のバーテックスの繋ぎ方を説明した時と同じノリである。

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left[ \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma\bar{\sigma}}(k+q) + \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\bar{\sigma}\sigma}(k+q) \right. \\
&\quad \left. - \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma\bar{\sigma}}(k+q) - \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\bar{\sigma}\sigma}(k+q) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \sum_{\beta\gamma} \sum_q (V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(k, q) - V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma}(k, q)) (\mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma\bar{\sigma}}(k+q) - \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\bar{\sigma}\sigma}(k+q)) \right]
\end{aligned} \tag{5.101}$$

のように変形できて

$$V^{\Delta, \sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}} = V^{\Delta, \bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma} = \frac{1}{2} [V_c^\Delta - V_s^\Delta] \tag{5.102}$$

$$V^{\Delta, \sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}} = V^{\Delta, \bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma} = V_s^\Delta \tag{5.103}$$

$$\mathcal{F}^{\text{singlet}} = \frac{1}{2} [\mathcal{F}^{\sigma\bar{\sigma}} - \mathcal{F}^{\bar{\sigma}\sigma}] \tag{5.104}$$

を踏まえると、

$$\Delta_{\alpha\lambda}^{\text{singlet}}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} \sum_q [V_c^\Delta - 3V_s^\Delta] \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\text{singlet}}(k+q) \tag{5.105}$$

を得る. triplet の場合、

$$\begin{aligned}
\Delta_{\alpha\lambda}^{\text{triplet}}(k) &= \frac{1}{2} [\Delta_{\alpha\lambda}^{\sigma\bar{\sigma}}(k) + \Delta_{\alpha\lambda}^{\bar{\sigma}\sigma}(k)] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \sum_{\sigma'\bar{\sigma}'} \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\sigma'\bar{\sigma}'\bar{\sigma}}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma'\bar{\sigma}'}(k+q) + \sum_{\sigma'\bar{\sigma}'} \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\bar{\sigma}'\sigma'\sigma}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma'\bar{\sigma}'}(k+q) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma\bar{\sigma}}(k+q) + \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\bar{\sigma}\sigma}(k+q) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma\bar{\sigma}}(k+q) + \sum_{\beta\gamma} \sum_q V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\bar{\sigma}\sigma\sigma}(k, q) \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\bar{\sigma}\sigma}(k+q) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \sum_{\beta\gamma} \sum_q (V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \sigma\sigma\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(k, q) + V_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{\Delta, \bar{\sigma}\sigma\bar{\sigma}\sigma}(k, q)) (\mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\sigma\bar{\sigma}}(k+q) + \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\bar{\sigma}\sigma}(k+q)) \right]
\end{aligned} \tag{5.106}$$

(5.102) (5.103) と、

$$\mathcal{F}^{\text{triplet}} = \frac{1}{2} [\mathcal{F}^{\sigma\bar{\sigma}} + \mathcal{F}^{\bar{\sigma}\sigma}] \tag{5.107}$$

を踏まえると、

$$\Delta_{\alpha\lambda}^{\text{triplet}}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} \sum_q [V_c^\Delta + V_s^\Delta] \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\text{triplet}}(k+q) \tag{5.108}$$

## 6 近似

ここでは、parquet 理論の目線から、いくつかの近似を紹介していく.

### 6.1 parquet 近似

まず、parquet 理論に基づいた最もシンプルな近似手法である **parquet 近似**を紹介する. これは、完全既約バーテックス  $\Lambda$  をベアなバーテックス  $U$  に置き換えてしまうという近似である. 最も複雑なバーテックスを  $U$  に置き換えるというかなり大胆な簡略化を行なっているものの、Sec.3.2.5 で示した手続きを実行す

るには(特に多軌道系においては)非常に大きな計算コストを必要としてしまう. また、相互作用が大きい領域ではあまり良い結果を与えないなど、その計算コストに見合うリターンがあまり期待できない近似であると言わざるを得ない. そこで、本来、3つの時空変数  $(k, k', q)$  に依存する各 channel の既約バーテックス  $\Gamma_l$  ( $l = \text{ph}, \overline{\text{ph}}, \text{pp}$ ) を定数として扱うという **simplified parquet**[14, 15] という手法も提案されている. こちらの手法は実質的には時空変数 1 つだけを扱えばよく、計算コストが大幅に軽減されている.

## 6.2 揺らぎ交換近似

強相関系の解析に有用な近似手法である揺らぎ交換近似 (**fluctuation exchange approximation, FLEX**) を parquet 理論の立場から見てみる. FLEX の標準的な説明としては、「バブル型と呼ばれるダイアグラムとラダー型と呼ばれるダイアグラムを無限次までとる近似」と紹介される<sup>\*70</sup> が、parquet 理論の立場から言うと、「完全既約バーテックスの最低次以外の項と pp channel を無視した上で異なる channel が混じり合う<sup>\*71</sup> 散乱プロセスを無視した近似」<sup>\*72</sup> となる. 異なる channel が混じり合うプロセスを無視するので各 channel の既約バーテックスは  $\Gamma_l = U$  となる.

### 6.2.1 general case

FLEX では、フルバーテックスおよび可約バーテックスは

$$F(D) = U(D) + \Phi_{\text{ph}}(D) - \Phi_{\text{ph}}(C) \quad (6.1)$$

$$\Phi_{\text{ph}}(q) = -U\chi_{\text{ph}}(q)U \quad (6.2)$$

$$\chi_{\text{ph}}(q) = \chi_{0\text{ph}}(q)[1 + U\chi_{0\text{ph}}(q)]^{-1} \quad (6.3)$$

のようになる. ここで、

$$\chi_{0\text{ph}, \alpha\beta\gamma\lambda}(q) = - \sum_k G_{\alpha\gamma}(k) G_{\lambda\beta}(k+q) \quad (6.4)$$

である. (3.55) に (6.1) のフルバーテックスを代入して自己エネルギー (の相関部分) の表式を求めたい. (6.1) の各項を順番に見ていく. まず、右辺第一項は、

$$\Sigma_{\alpha\gamma}^{\text{cr1}}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\beta\lambda} [U\chi_{0\text{ph}}(q)U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k+q) \quad (6.5)$$

のように 2 次摂動の自己エネルギーを与える. 右辺第二項は、

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\gamma}^{\text{cr2}}(k) &= \frac{1}{2} \sum_{\beta\lambda} [\Phi_{\text{ph}}(q)\chi_{0\text{ph}}(q)U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k+q) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\beta\lambda} [U\chi_{\text{ph}}(q)U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k+q) - \frac{1}{2} \sum_{\beta\lambda} [U\chi_{0\text{ph}}(q)U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k+q) \end{aligned} \quad (6.6)$$

<sup>\*70</sup> この資料のような相互作用を線ではなく四角で描くスタイルでは、そもそもバブルやラダーという絵が描けない.

<sup>\*71</sup> 「混じり合う」という表現は少し混乱を招くかもしれない. Sec.3.2.5 で示したように、複数の channel に同時に属するようなバーテックスは存在しない. ここで言っている“異なる channel が混じり合うバーテックス”というのは、図 12(b) のようなものと考えてもらえばよい. pp channel と fully irreducible に属する 2 つのバーテックスが ph channel で繋がっているが、これ自体は ph channel に属する.

<sup>\*72</sup> このように説明されると、「揺らぎ交換してない近似」やん、って感じてしまう... 「揺らぎ交換近似」という名前は、FLEX よりもさらに揺らぎを交換していない(狭義の、オリジナルの?) 乱雑位相近似 (RPA) と比べて、いろんな波数のやり取りの効果を取り込んでいる、という意味で「揺らぎ交換近似」という名前がついている(はず). 狭義の RPA といったのは、バブル型のダイアグラムのみ取り込む RPA のことを指している. バブル型のダイアグラムによって構成される無限和は、全ての散乱過程で同じ波数  $q$  を受け渡し続けるために、他の波数とのカップリングが存在しない. それに対してラダー型のダイアグラムは、 $\chi_0(k, q)U\chi_0(k', q)$  の形の散乱過程で  $k-k'$  の受け渡しが起こり(実際は  $U$  が波数に依存しないので  $k, k'$  は式には現れないが)、それぞれの散乱過程で全ての  $k, k'$  の組を考慮するためさまざまな波数のカップリングが生じ、これを「揺らぎ交換」と呼んでいる(多分). FLEX と同じようにバブル型とラダー型を考えて、グリーン関数を  $G$  ではなく  $G_0$  とするものを RPA といっているもの(広義の RPA) もあって、これは揺らぎ交換してるやん、ってなる..

となる. 右辺第三項は少し複雑である.

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\alpha\gamma}^{\text{cr3}}(k) &= -\frac{1}{2} \sum [\Phi_{\text{ph}}(k' - k) \chi_{0\text{ph}}(k', q) U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k + q) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{k', q} \Phi_{\text{ph}, \alpha\gamma'\beta\lambda'}(k' - k) G_{\gamma'\alpha'}(k') G_{\beta'\lambda'}(k' + q) U_{\alpha'\beta'\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k + q) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{k'', q'} \Phi_{\text{ph}, \alpha\gamma'\beta\lambda'}(q') G_{\beta\lambda}(k'') G_{\beta'\lambda'}(k'' + q') U_{\lambda\beta'\gamma\alpha'} G_{\gamma'\alpha'}(k + q') \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\beta\lambda} [\Phi_{\text{ph}}(q) \chi_{0\text{ph}}(q) U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k + q) \\
&= \Sigma_{\alpha\gamma}^{\text{cr2}}(k)
\end{aligned} \tag{6.7}$$

(6.7) の 2 行目から 3 行目では、 $k' - k = q', k + q = k''$  の変数変換と  $U$  の crossing 操作を行った. 以上より、FLEX における正常自己エネルギーは

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\alpha\gamma}(k) &= - \sum_{\gamma\lambda} U_{\alpha\gamma\beta\lambda} \sum_k G_{\gamma\lambda}(k) e^{-i\omega(-0)} \\
&\quad + \sum_q \sum_{\beta\lambda} [U \chi_{\text{ph}}(q) U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k + q) - \frac{1}{2} \sum_q \sum_{\beta\lambda} [U \chi_{0\text{ph}}(q) U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k + q)
\end{aligned} \tag{6.8}$$

次に  $\mathcal{F}$  に関して 1 次の異常自己エネルギーの表式を求める. 正常自己エネルギーの場合と同様、(4.28) に (6.1) のフルバーテックスを代入するわけであるが、正常自己エネルギーと事情がことなるのは、右辺第三項である. 正常自己エネルギーの場合は、変数変換によって、(6.1) の右辺第二項からくる寄与と第三項からくる寄与は ph channel のみから構成される形になることが示されたが、異常自己エネルギーの場合は、第三項は変数変換を行ったとしても、ph と  $\overline{\text{ph}}$  channel が混じり合うような形になってしまう. parquet 理論の観点から見た場合の FLEX は異なる channel が混ざるプロセスを無視する近似であるので、(6.1) の右辺第三項は無視する. したがって、FLEX における線形化された異常自己エネルギーは、

$$\Delta_{\alpha\lambda}(k) = -\frac{1}{2} \sum_{\beta'\gamma'} U_{\alpha\beta'\gamma'\beta} \sum_k \mathcal{F}_{\gamma'\beta'}(k) + \sum_q \sum_{\beta\lambda} [U \chi_{\text{ph}}(q) U]_{\alpha\beta\gamma\lambda} \mathcal{F}_{\beta\gamma}(k + q) \tag{6.9}$$

となる.

## 6.2.2 SU(2) symmetric case

Sec.5.2 ので示した変換則を用いると FLEX におけるフルバーテックスは

$$F_c(D) = \Lambda_{0c}(D) + \Phi_c(D) - \frac{1}{2} [\Phi_c + 3\Phi_s](C) \tag{6.10}$$

$$F_s(D) = \Lambda_{0s}(D) + \Phi_s(D) - \frac{1}{2} [\Phi_c - \Phi_s](C) \tag{6.11}$$

となる. ここで、 $\Lambda_0$  は完全既約バーテックスの最低次の項、すなわち、ベアなバーテックス  $U$  である. わざわざこう書いたのは、習慣的に用いられている spin channel のベアバーテックス  $U_s$  の符号が、2 体の散乱構造を一般性に着目して式を導出する場合と逆になってしまうからである. すなわち、 $\Lambda_{0s} = -U_s$ ,  $\Lambda_{0r} = U_r$  ( $r = c, e, o$ ) である.  $U_s$  を使うと spin channel だけ符号を変えなければならない場合があるが、 $\Lambda_{0s}$  を使えば他の channel とすべて同じ形で書ける. 同様に、可約バーテックスと感受率は

$$\Phi_r(q) = -\Lambda_{0r} \chi_r(q) \Lambda_{0r} \tag{6.12}$$

$$\chi_r(q) = \chi_0(q) [1 + \Lambda_{0r} \chi_0(q)]^{-1} \tag{6.13}$$

となる。次に自己エネルギーであるが、(6.8) や (6.9) の [...] の部分を Sec.5.4 で示したような channel の分配にすればよく、正常自己エネルギーは

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\alpha\gamma}(k) = & -\frac{1}{2} \sum_{\gamma\lambda} [\Lambda_{0c} + 3\Lambda_{0s}]_{\alpha\gamma\beta\lambda} \sum_k G_{\gamma\lambda}(k) e^{-i\omega(-0)} \\
& + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{\beta\lambda} [\Lambda_{0c}\chi_c(q)\Lambda_{0c} + 3\Lambda_{0s}\chi_s(q)\Lambda_{0s}]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k+q) \\
& - \frac{1}{4} \sum_q \sum_{\beta\lambda} [\Lambda_{0c}\chi_0(q)\Lambda_{0c} + 3\Lambda_{0s}\chi_0(q)\Lambda_{0s}]_{\alpha\beta\gamma\lambda} G_{\beta\lambda}(k+q)
\end{aligned} \tag{6.14}$$

異常自己エネルギーは

$$\begin{aligned}
\Delta_{\alpha\lambda}^{\text{singlet}}(k) = & -\frac{1}{4} \sum_{\beta'\gamma'} [\Lambda_{0c} - 3\Lambda_{0s}]_{\alpha\beta'\gamma'\beta} \sum_k \mathcal{F}_{\gamma'\beta'}^{\text{singlet}}(k) \\
& + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{\beta\lambda} [\Lambda_{0c}\chi_c(q)\Lambda_{0c} - 3\Lambda_{0s}\chi_s(q)\Lambda_{0s}]_{\alpha\beta\gamma\lambda} \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\text{singlet}}(k+q)
\end{aligned} \tag{6.15}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{\alpha\lambda}^{\text{triplet}}(k) = & -\frac{1}{4} \sum_{\beta'\gamma'} [\Lambda_{0c} + \Lambda_{0s}]_{\alpha\beta'\gamma'\beta} \sum_k \mathcal{F}_{\gamma'\beta'}^{\text{triplet}}(k) \\
& + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{\beta\lambda} [\Lambda_{0c}\chi_c(q)\Lambda_{0c} + \Lambda_{0s}\chi_s(q)\Lambda_{0s}]_{\alpha\beta\gamma\lambda} \mathcal{F}_{\beta\gamma}^{\text{triplet}}(k+q)
\end{aligned} \tag{6.16}$$

となる。

工事中

## A ハミルトニアンとか

### A.1 ホッピング項・相互作用項と生成・消滅演算子の交換関係

以下で使う交換関係の公式

$$[A, BC] = ABC - BAC = ABC + BAC - BAC - BCA = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (\text{A.1})$$

$$[A, BC] = ABC - BAC = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C] \quad (\text{A.2})$$

生成・消滅演算子の反交換関係は、

$$\{c_{i\alpha}^\dagger, c_{j\beta}\} = \{c_{i\alpha}, c_{j\beta}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} \quad (\text{A.3})$$

$$\{c_{i\alpha}^\dagger, c_{j\beta}^\dagger\} = \{c_{i\alpha}, c_{j\beta}\} = 0 \quad (\text{A.4})$$

であることを用いると、ホッピング項と消滅演算子の交換関係は

$$\begin{aligned} [c_{k\gamma}, H_0] &= \left[ c_{k\gamma}, \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} t_{ij\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} \right] \\ &= \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} t_{ij\alpha\beta} [c_{k\gamma}, c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta}] \\ &= \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} t_{ij\alpha\beta} \left( \underbrace{\{c_{k\gamma}, c_{i\alpha}^\dagger\}}_{=\delta_{ik}\delta_{\gamma\alpha}} c_{j\beta} - c_{i\alpha}^\dagger \underbrace{\{c_{k\gamma}, c_{j\beta}\}}_{=0} \right) \\ &= \sum_j \sum_\beta t_{kj\gamma\beta} c_{j\beta} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$(i\alpha)$  を成分とするベクトルの的に書くと

$$[c, H_0] = \hat{t}c \quad (\text{A.6})$$

となる。生成演算子は、

$$[c_{k\gamma}^\dagger, H_0] = [H_0, c_{k\gamma}]^\dagger = - \sum_j \sum_\beta t_{kj\gamma\beta}^* c_{j\beta}^\dagger \quad (\text{A.7})$$

ベクトルの的に書くと、

$$[c^\dagger, H_0] = -c^\dagger \hat{t}^\dagger \quad (\text{A.8})$$

相互作用項は、

$$\begin{aligned} [c_{j\mu}, H_{\text{int}}] &= \left[ c_{j\mu}, \sum_i \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} U_{\alpha\beta\gamma\lambda} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\lambda}^\dagger c_{i\gamma} c_{i\beta} \right] \\ &= \sum_i \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} [c_{j\mu}, c_{i\alpha}^\dagger c_{i\lambda}^\dagger c_{i\gamma} c_{i\beta}] \\ &= \sum_i \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} \left( [c_{j\mu}, c_{i\alpha}^\dagger c_{i\lambda}^\dagger] c_{i\gamma} c_{i\beta} + \underbrace{[c_{j\mu}, c_{i\gamma} c_{i\beta}]}_{=0} c_{i\alpha}^\dagger c_{i\lambda}^\dagger \right) \\ &= \sum_i \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} \left( \underbrace{\{c_{j\mu}, c_{i\alpha}^\dagger\}}_{=\delta_{ji}\delta_{\mu\alpha}} c_{i\lambda}^\dagger - c_{i\alpha}^\dagger \underbrace{\{c_{j\mu}, c_{i\lambda}^\dagger\}}_{=\delta_{ji}\delta_{\mu\lambda}} \right) c_{i\gamma} c_{i\beta} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\beta\gamma\lambda} U_{\mu\beta\gamma\lambda} c_{j\lambda}^\dagger c_{j\gamma} c_{j\beta} - \sum_{\alpha\beta\gamma} U_{\alpha\beta\gamma\mu} c_{j\alpha}^\dagger c_{j\gamma} c_{j\beta} \\
&= 2 \sum_{\beta\gamma\lambda} U_{\mu\beta\gamma\lambda} c_{j\lambda}^\dagger c_{j\gamma} c_{j\beta} \\
&= -2 \sum_{\beta\gamma\lambda} U_{\mu\beta\gamma\lambda} c_{j\gamma} c_{j\lambda}^\dagger c_{j\beta} + 2 \sum_{\beta\lambda} U_{\mu\beta\lambda\lambda} c_{j\beta}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

## B ハイゼンベルグ表示に関するなんたらかんたら

### B.1 虚時間の定義域を拡張する際の注意

虚時間グリーン関数の定義を、

$$G(\tau) = - \langle T c(\tau) c^\dagger \rangle \tag{B.1}$$

とする。ここで、時間順序積  $T$  は時間変数大きいものを左に持ってきて、その際にフェルミオンであれば  $-1$ , ボソンであれば  $+1$  をかける、という演算子である。何も考えずに虚時間変数  $\tau$  の定義域を  $[-\infty : \infty]$  としてしまうと、以下のように、 $G(\tau)$  は  $2\beta$  の周期関数にはならない。

$\tau > 0$  として、 $G(\tau + \beta)$  を計算すると、

$$\begin{aligned}
G(\tau + \beta) &= - \text{Tr} \left( e^{-\beta H} e^{(\tau+\beta)H} c e^{-(\tau+\beta)H} c^\dagger \right) \\
&= - \text{Tr} \left( e^{-\beta H} c^\dagger e^{\tau H} c e^{-\tau H} \right) \\
&= - \text{Tr} \left( e^{-\beta H} c^\dagger c(\tau) \right)
\end{aligned} \tag{B.2}$$

となり、虚時間変数大きい方が右側にあるという、 $-\beta \leq \tau \leq \beta$  の範囲に含まれない形が出てきてしまう。

### B.2 実時間・虚時間のハイゼンベルグの運動方程式

実時間のハイゼンベルグ表示は

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt} \tag{B.3}$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \tag{B.4}$$

であるので、これを微分すれば

$$i \frac{\partial}{\partial t} A(t) = i \times i e^{iHt} (HA - AH) e^{-iHt} = -[H, A(t)] \tag{B.5}$$

を得る。一方、虚時間のハイゼンベルグ表示は

$$A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H} \tag{B.6}$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \tag{B.7}$$

であるので、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} A(\tau) = e^{\tau H} (HA - AH) e^{-\tau H} = [H, A(\tau)] \tag{B.8}$$

となり、実時間の場合と交換関係の前の符号が逆になる。



### B.3 cyclic 則

2 点相関関数は次のように、trace の cyclic 則と  $H$  同士が交換することを用いると、

$$\begin{aligned}\langle A(t)B(t') \rangle &= \text{Tr}(e^{-\beta H} e^{iHt} A e^{-iHt'} e^{iHt'} B e^{-iHt'}) \\ &= \text{Tr}(e^{-\beta H} e^{iH(t-t')} A e^{-iH(t-t')} B) \\ &= \langle A(t-t')B \rangle\end{aligned}\tag{B.9}$$

のように変形することができ、 $t-t'$  の関数であることがわかる。虚時間に関しても全く同様で、

$$\langle A(\tau)B(\tau') \rangle = \langle A(\tau-\tau')B \rangle\tag{B.10}$$

## C ダイアグラムのなんたらかんたら

### C.1 繋がっていない項が分母とキャンセルするやつ

Sec. 2.4.2 での議論で、繋がっていない部分の寄与が本当に (係数まで含めて) ちゃんとキャンセルするのかを確かめたい。

$U$  に関して  $m$  次の  $\langle TS(\beta)c(\tau_1)c^\dagger(\tau_2) \rangle_0$  の項の中で、外線と繋がっている部分が  $U$  の  $n$  次であるような項を、ここでは  $n$  次でつながる  $m$  次の項と呼ぶことにする。

そのような項の数は、 $m$  個の  $U$  から外線とつながる  $n$  個選ぶ場合の数なので、

$${}_m C_n = \frac{m!}{n!(m-n)!}\tag{C.1}$$

$m$  次の項には  $1/m!$  の係数がかかっているの、 $n$  次でつながる  $m$  次の項には

$$\frac{1}{n!(m-n)!}\tag{C.2}$$

のような係数がつく。これはただの掛け算の形なので、つながる部分に  $1/n!$ 、繋がらない部分に  $1/(m-n)!$  と分ければ、繋がらない部分の寄与はグリーン関数の計算 (2.40) において全ての次数を足し上げれば分母の  $\langle S(\beta) \rangle_0$  からくる寄与と正しくキャンセルする。

### C.2 2 体グリーン関数の頂点の入れ替えによる変数の変化

2 体グリーン関数の Fourier 変換の式を書くと

$$G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(k_1, k_2, k_4) = \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) e^{ik_1(x_1-x_3)} e^{ik_2(x_2-x_3)} e^{ik_3(x_3-x_3)} e^{ik_4(x_4-x_3)}\tag{C.3}$$

$x_3$  の変数は計算には影響しないが、あえて残している。ここで、 $(x_2, \beta)$  と  $(x_3, \gamma)$  を入れ替える操作を行うと、

$$G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(k_1, k_2, k_4) = \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_3, x_2, x_3) e^{ik_1(x_1-x_2)} e^{ik_2(x_3-x_2)} e^{ik_3(x_2-x_2)} e^{ik_4(x_4-x_2)}\tag{C.4}$$

このうえで  $x_i - x_3 \rightarrow x_i$  という書き換えを行うと、

$$\begin{aligned}G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(k_1, k_2, k_4) &= \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_3, x_2, x_4) e^{ik_1(x_1-x_2)} e^{ik_2(-x_2)} e^{ik_4(x_4-x_2)} \\ &= \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_3, x_2, x_4) e^{ik_1 x_1} e^{-i(k_1+k_2+k_4)x_2} e^{ik_4 x_4}\end{aligned}\tag{C.5}$$

(3.6) と同様の変数変換

$$\begin{cases} k_1 \rightarrow \tilde{k} \\ -k_1 - k_2 - k_4 \rightarrow -\tilde{k} - \tilde{q} \\ k_4 \rightarrow \tilde{k}' + \tilde{q} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

を行うと、

$$G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{q}) = \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_3, x_2, x_4) e^{i\tilde{k}x_1} e^{-i(\tilde{k}+\tilde{q})x_2} e^{i(\tilde{k}'+\tilde{q})x_4} \quad (\text{C.7})$$

(3.7) と全く同型の式が得られる. (3.6) と (C.6) から  $k_1, k_2, k_3$  を消去すれば

$$\begin{cases} \tilde{k} = k \\ \tilde{k}' = k + q \\ \tilde{q} = k' - k \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

となる.  $G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) = -G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_4, x_3, x_2)$  <sup>※73</sup> を考慮すると、

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(k, k', q) &= \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\beta\gamma\lambda}^{(2)}(x_1, x_2, x_3, x_4) e^{ikx_1} e^{-i(k+q)x_2} e^{i(k'+q)x_3} \\ &= - \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(x_1, x_4, x_3, x_2) e^{i\tilde{k}x_1} e^{-i(\tilde{k}+\tilde{q})x_2} e^{i(\tilde{k}'+\tilde{q})x_3} \\ &= -G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{q}) \\ &= -G_{\alpha\gamma\beta\lambda}^{(2)}(k, k+q, k'-k) \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

となる. 同様に考えることで、以下のように頂点の入れ替えと変数のセットが得られる.

$$D = (\alpha, \beta, \gamma, \lambda), (k, k', q) \quad (\text{C.10})$$

$$T = (\alpha, \beta, \lambda, \gamma), (k, -q - k', q) \quad (\text{C.11})$$

$$C = (\alpha, \gamma, \beta, \lambda), (k, k + q, k' - k) \quad (\text{C.12})$$

$$P = (\alpha, \lambda, \gamma, \beta), (k, k', -q - k - k') \quad (\text{C.13})$$

$$X = (\alpha, \gamma, \lambda, \beta), (k, -k' - q, k' - k) \quad (\text{C.14})$$

$D$  を基準として添え字の入れ替えが偶数回であれば符号は +、奇数回であれば - である. ここで示した規則は 2 体の vertex 関数にも同様に成り立つ.

※73 2 体のグリーン関数の定義 (3.1) から導かれる性質

## 参考文献

- [1] F. Alexander, L. and W. John, Dirk, Quantum Theory of Many-Particle Systems (McGraw-Hill College, 1971).
- [2] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, and R. A. Silverman, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics (Dover Publications, Inc., 1975).
- [3] 阿部龍三, 統計力学 (東京大学出版会, 1992).
- [4] 高田康民, 多体問題 (朝倉書店, 1999).
- [5] 高野文彦, 多体問題 (培風館, 1975).
- [6] H. J. Vidberg and J. W. Serene, Solving the eliashberg equations by means ofn-point padé approximants, [Journal of Low Temperature Physics](#) **29**, 179 (1977).
- [7] O. Gunnarsson, M. W. Haverkort, and G. Sangiovanni, Analytical continuation of imaginary axis data for optical conductivity, [Phys. Rev. B](#) **82**, 165125 (2010).
- [8] D. Bergeron and A.-M. S. Tremblay, Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation, [Phys. Rev. E](#) **94**, 023303 (2016).
- [9] Y. A. Bychkov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinski, Possibility of superconductivity type phenomena in a one-dimensional system, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **50**, 738 (1966).
- [10] G. Rohringer, A. Valli, and A. Toschi, Local electronic correlation at the two-particle level, [Phys. Rev. B](#) **86**, 125114 (2012).
- [11] V. Janis, The hubbard model at intermediate coupling: renormalization of the interaction strength, [Journal of Physics: Condensed Matter](#) **10**, 2915 (1998).
- [12] V. Janiš, Stability of self-consistent solutions for the hubbard model at intermediate and strong coupling, [Phys. Rev. B](#) **60**, 11345 (1999).
- [13] H. Kusunose, Influence of spatial correlations in strongly correlated electron systems: Extension to dynamical mean field approximation, [Journal of the Physical Society of Japan](#) **75**, 054713 (2006), <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.75.054713> .
- [14] R. Mizuno, M. Ochi, and K. Kuroki, Simplification of the local full vertex in the impurity problem in dmft and its applications for the nonlocal correlation, [Journal of the Physical Society of Japan](#) **91**, 034002 (2022), <https://doi.org/10.7566/JPSJ.91.034002> .
- [15] H. Kusunose, Self-consistent fluctuation theory for strongly correlated electron systems, [Journal of the Physical Society of Japan](#) **79**, 094707 (2010), <https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.094707> .